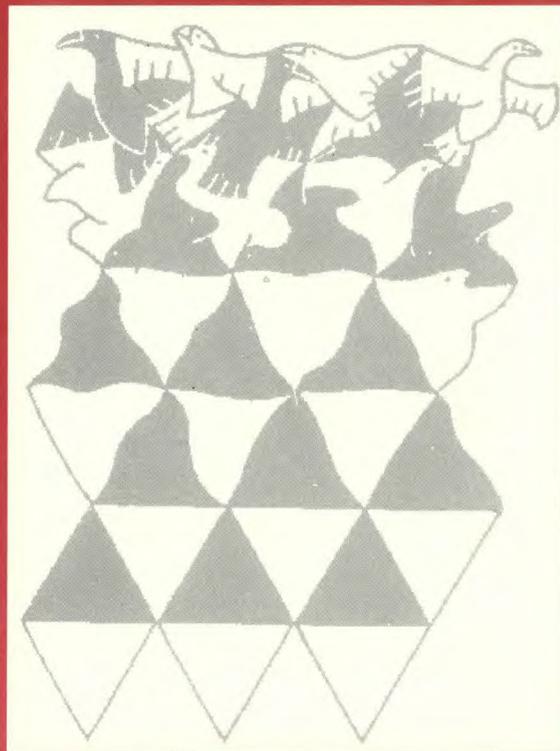


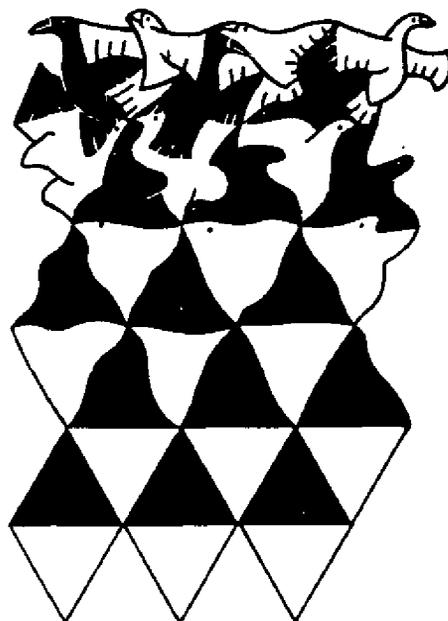
R
E
S
U
M
O
S

XVIII

**ENCONTRO NACIONAL
DE FÍSICA DA MATÉRIA
CONDENSADA**



XVIII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada



Resumos

530.406 Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 18,
E56f Caxambu, 1995
18 Física da Matéria Condensada: resumos, São Paulo, S.B.F., 1995
397 p.
1. Física da Matéria Condensada - Congressos; I. Título

Índice

Física Atômica e Molecular (ATO)	5
Biofísica (BIO).....	29
Crescimento, Caracterização e Propriedades dos Materiais (CCP)	52
Cristalografia (CRI)	66
Física Estatística e Fenômenos Críticos (EST).....	82
Flúidos Complexos	134
Instrumentação (INS).....	145
Ciência dos Materiais (MAT)	165
Metais e Materiais Magnéticos (MMM).....	183
Ótica (OTI).....	231
Polímeros (POL)	257
Ressonância Magnética (RES).....	275
Semicondutores (SEM).....	288
Supercondutividade (SUC)	306
Superfícies e Filmes Finos (SUF)	328
Palestras Vespertinas	356
Índice de Autores e Apresentações	365
Errata.....	397

FÍSICA ATÔMICA E MOLECULAR

Novos Métodos Teóricos (ATO) - 07/06/95

Simetria dinâmica no espectro vibracional do monofluoracetileno (HCCF). Ressonâncias de Fermi: bandas $\nu_5 = 0$.

ESMERINDO DE SOUSA BERNARDES, YVONE MARIA MASCARENHAS HORNOS, JOSÉ EDUARDO MARTINHO HORNOS

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

Nova análise do espectro vibracional do monofluoracetileno (HCCF) pelo modelo dos *vibrons*, no limite de simetria dinâmica. Novas linhas vibracionais foram analisadas experimentalmente e reportadas por Holland et al (*J. Molec. Spectrosc.* 151(2), 346, 1992), totalizando 106 tons vibracionais. Obtivemos um desvio médio de 10.92 cm^{-1} , confirmando a nossa primeira análise (Bernardes et al, *Chem. Phys. Lett.* 203(2-3), 143, 1992), a qual resultou um desvio médio de 11.09 cm^{-1} . Este sistema é hoje o melhor exemplo de simetria dinâmica conhecido em Física Molecular. Este trabalho contém uma análise de algumas ressonâncias de Fermi importantes envolvendo os estados com $\nu_5 = 0$ mostrando como o modelo dos *vibrons* levanta as degenerências de um modelo harmônico. Como resultado, uma organização dos níveis vibracionais com propriedades de hierarquia é obtida.

APROXIMAÇÃO ADIABÁTICA HIPERESFÉRICA PARA O ÁTOMO DE HÉLIO

M. MASILI, J. J. DE GROOTE, J. E. M. HORNOS
Instituto de Física de São Carlos - USP

A energia não adiabática para o estado fundamental do átomo de hélio é obtida na Aproximação Adiabática Hiperesférica. Curvas de potencial, acoplamentos não adiabáticos e funções de canal são calculados por um procedimento numericamente exato, baseado na expansão analítica das funções de canal. As equações radiais acopladas são resolvidas por técnicas convencionais. A convergência do procedimento é investigada conforme acoplamentos não adiabáticos são sistematicamente introduzidos. A inclusão de onze curvas de potencial e funções de canal dá uma energia para o estado fundamental que difere do melhor cálculo variacional em partes por bilhão.

ÁTOMOS DO GRUPO IV INTERAGINDO COM NANO-TUBOS DE CARBONO

HÉLIO CHACHAM, MÁRIO SÉRGIO C. MAZZONI,
FLÁVIO V. LAPER
UFMG

JOSÉ LUIZ A. ALVES

Univ. Federal de São João Del Rey

Efetuamos cálculos de primeiros princípios, na aproximação de Hartree-Fock, para átomos do grupo IV (carbono, silício, germânio, estanho e chumbo) interagindo com tubos de carbono de dimensões nanométricas (nano-tubos). Consideramos tubos de camada única de carbono, abertos nas extremidades, e com ligações pendentes saturadas por átomos de hidrogênio. Verificamos, em nossos cálculos, que a interação entre os átomos do grupo IV e o nano-tubo é atrativa. Verificamos, entretanto, a existência de uma barreira de potencial para que os átomos entrem no nano-tubo. Esta barreira cresce com o número atômico, no grupo IV. A interação atrativa e a barreira de ativação são consistentes com resultados experimentais da literatura. Calculamos também correções relativísticas para a energia total, por meio de cálculos na aproximação de Hueckel estendido parametrizados por cálculos Hartree-Fock-Dirac. A contribuição relativística para a energia total tende a tornar os átomos mais ligados ao nano-tubo.

ESTUDOS DE ESTABILIDADE ESTRUTURAL EM NANOTUBOS

GILBERTO DE PAIVA, PEDRO VENEZUELA,
ADALBERTO FAZZIO, S. CANUTO
DFMT-USP

Estudamos as propriedades estruturais de novas formas de carbono denominadas nanotubos, utilizando o potencial interatômico empírico de Tersoff em simulações de Monte Carlo.

Nanotubos são estruturas de carbono onde os átomos formam uma superfície cilíndrica de ligações tipo sp^2 , como no grafite. Eles são formados ao provocarmos descargas elétricas entre eletrodos de grafite em uma câmara com gás inerte ou metano, de forma semelhante a produção de fulerenos. Experimentalmente observa-se uma grande quantidade de tubos distintos, com diâmetros variando entre 6Å a 8Å , comprimentos de dezenas a centenas de angstroms e extremidades diversas (zig-zag, braço de cadeira e irregulares).

Fizemos um programa para gerar as coordenadas de um nanotubo qualquer, "enrolando uma folha de grafite sobre a superfície de um cilindro", e estudamos a estabilidade dos nanotubos variando o diâmetro, comprimento, temperatura, e forma da extremidade. Também

estudamos o comportamento de tubos com átomos de hidrogênio em seus dangling bonds.

A partir das simulações, observamos que nanotubos são estáveis a temperaturas menores que 3500K. Acima de 3500K, as extremidades de tubos com diâmetros pequenos (da ordem de 7Å) se fecham, enquanto que tubos com diâmetros maiores permanecem inalterados.

Quando colocamos átomos de hidrogênio de forma aleatória ao redor do tubo, estes se ligam aos átomos de carbono nas extremidades e superfície do nanotubo. Na presença de hidrogênio, os tubos são instáveis a temperaturas maiores que 2000K.

Aproximação do Espaço Local para o Tratamento de Interações Dependentes do Tempo

BERNARD KIRTMAN

Department of Chemistry University of California Santa Barbara

CLÁUDIA REGINA CAMPOS DE CARVALHO, CELSO P. DE MELO

Departamento de Física - UFPE

O método da Aproximação do Espaço Local tem sido aplicado com sucesso ao tratamento de diferentes pro-

blemas em que uma interação eletrônica localizada ocorre em um sistemas extenso. Recentemente, o método foi formalmente estendido para descrição de interações dependentes do tempo. Neste trabalho são apresentados os detalhes desse tratamento que se baseia em uma partição adequada da evolução temporal da matriz densidade $P(t)$ do problema. Para o caso do espalhamento de íons por uma superfície, por exemplo, a evolução temporal é dividida em uma seqüência de intervalos de tempo $\dots, t_i, t_{i+1}, \dots$: para cada intervalo de tempo considerado, a projeção local do hamiltoniano correspondente a coordenadas fixas no instante inicial do intervalo determina a evolução da matriz $P_i(t)$, enquanto a contribuição das regiões não-locais do sistema surge através da matriz $Q(t) = P(t) - P_i(t)$ que leva em conta a mudança de coordenadas ocorrida durante o intervalo de tempo considerado. A introdução da Aproximação do Espaço Local para a variação de $Q(t)$ permite que o cálculo correspondente possa ser inteiramente efetuado com o uso de grandezas locais. Resultados preliminares para a interação de íons tanto com superfícies metálicas quanto cadeias poliméricas extensas são apresentados. (Apoio CNPq e FINEP).

Polarization and Symmetry Properties of X-ray Raman Scattering

HANS ÅGREN

Institute of Physics and Measurement Technology, S-58183 Linköping, Sweden

We review recent progress in the theory of resonance elastic and inelastic X-ray scattering with particular attention to symmetry and polarization properties. The dependences of the X-ray scattering section with respect to parity, core hole localization, Stokes doubling, chemical shifts, polarization and interference effects are discussed, and the excitation energy dependences under symmetry selected excitation are uncovered. The various effects are illustrated by a set of model calculations on molecules with an element of symmetry; H_2S , N_2 , C_6H_6 , $C_6H_5NH_2$, C_{60} and C_{70} .

Colisões em Átomos, Moléculas e Íons (ATO) - 07/06/95

MECANISMOS DE PERDA ELETRÔNICA EM COLISÕES DE He^+ COM

He, Ne, Ar, Kr, Xe.

MARCELO MARTINS SANT'ANNA, ANTÔNIO CARLOS FONTES DOS SANTOS, GERALDO MONTEIRO SIGAUD, EDUARDO CHAVES MONTENEGRO

Departamento de Física. PUC-RJ

WILSON SOUZA MELO

Instituto de Física. UFF

A perda eletrônica de íons de alta velocidade em colisões com átomos neutros é devida a dois mecanismos diferentes. No modo "screening", a perda eletrônica é

basicamente devida à interação núcleo-elétron, com os elétrons do alvo assumindo o papel passivo de blindar o campo Coulombiano do núcleo alvo na vizinhança do elétron ativo do projétil. Para uma velocidade fixa do projétil, espera-se que esta contribuição forneça uma dependência não linear com o número atômico Z do alvo, devida a blindagem incompleta em regiões de parâmetro de impacto onde a ocorrência da ionização é mais provável. Dentro das teorias de primeira ordem, se a blindagem estiver completamente ausente, a dependência esperada é em Z^2 ; na presença de blindagem, a dependência deve ser entre Z e Z^2 . Por outro lado, no modo "antiscreening", onde a perda é devida à ação dos elétrons do alvo e o núcleo alvo não desempenha nenhum papel ativo, a dependência esperada seria aproximadamente linear em Z . Assim, para teorias de primeira ordem, a dependência geral com Z seria domi-

nada pelo modo "screening" quando Z aumenta. Foram medidas seções de choque totais de perda eletrônica de íons de He^+ incidindo sobre alvos de He , Ne , Ar , Kr e Xe na faixa de energia de 1.0 a 4.0 MeV para complementar medidas prévias e os resultados apontam em direção a uma contribuição muito menor para o modo "screening" do que o previsto pelas teorias de primeira ordem, possivelmente relacionado a um efeito de saturação que só se manifesta no canal de "screening".

PERDA TOTAL, CAPTURA SIMPLES E DUPLA DE C^{3+} EM, He, Ne, Ar, Kr e Xe.

WILSON DE SOUZA MELO

UFF

MARCELO MARTINS SANT'ANNA, ANTÔNIO CARLOS FONTES DOS SANTOS, CARLOS VIEIRA DE BARROS LEITE FILHO, GERALDO MONTEIRO SIGAUD, EDUARDO CHAVES MONTENEGRO
PUC-RIO

Foram medidas seções de choque de perda total e captura para íons C^{3+} em He, Ne, Ar, Kr e Xe em energias entre 1,0 e 3,5 MeV. Foram também medidas seções de choque de dupla captura entre 1,0 e 3,0 MeV. É estudada a dependência em Z da perda e da captura eletrônica no regime de velocidades intermediárias. Nestas velocidades, os canais de captura e perda eletrônica são fortemente acoplados e é necessária uma análise conjunta destes dois canais para entender os resultados experimentais. 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, como é chamado por alguns autores. No primeiro caso, a dependência esperada para a seção de choque de perda com o número atômico do alvo seria com Z^2 de acordo com teorias de primeira ordem, mas espera-se que ocorra um efeito de saturação para Z grande. No modo antiblindagem, a dependência esperada seria aproximadamente linear com Z . Nota-se em todas as energias medidas que a captura cresce com Z rapidamente e suaviza-se para valores de Z grandes. Por outro lado, a perda mostra um efeito de estrutura pronunciado que se torna mais importante quando a energia decresce. Apesar disto, existe uma clara tendência à saturação para ambas seções de choque com Z grande. Uma possível razão para a presença do efeito de estrutura é a ocorrência do processo de perda e transferência simultânea, que se torna importante no regime de baixa energia e para maiores estados de carga do projétil, afetando fortemente a medida de seção de choque de perda.

SCATTERING OF HIGH-ENERGY

ELECTRONS BY CH_4 AT SMALL ANGLES

RONALDO S. BARBIERI

Departamento de Química - UFSCar

The study of the generalized oscillator strength (GOS) and cross sections of gases is of great importance in the understanding of astrophysical, photochemical, and radioactive processes. In this work, values of generalized oscillator strength (GOS) and their moments were obtained for methane by means of high-energy (25-28 keV) electron energy-loss spectroscopy. The experimental setup and procedures have been described elsewhere [1,2]. Using crossed-beams geometry, energy-loss spectra, from 4 up to 1000 eV, were recorded by use of a Mollenstead energy analyzer in the angular range from 0.6° to 4.2° . The absolute GOS distribution was obtained by Bethe sum rule normalization of the relative experimental scattered intensities.

[1]R. S. Barbieri & R. A. Bonham, *Phys. Rev. A* **44**, 7361 (1991). [2]R. S. Barbieri & R. A. Bonham, *Phys. Rev. A* **45**, 7929 (1992).

MODELO CINÉTICO DE UMA DESCARGA LUMINESCENTE A BAIXA PRESSÃO EM MISTURAS $N_2 - O_2$

JACIMAR NAHORNY

UFSC

CARLOS MATOS FERREIRA

Centro de Electrodinâmica - Instituto Superior Técnico

Lisboa Portugal

BORIS GORDIETS

Lebedev Physical Institute Moscow - Russia

Um modelo cinético uni-dimensional foi desenvolvido de maneira a interpretar os resultados experimentais obtidos do estudo de uma descarga elétrica em misturas $N_2 - O_2$. Este modelo, inclui a solução da equação de Boltzmann para os elétrons, as equações de balanço cinético para as espécies neutras e iônicas mais importantes presentes na descarga, as equações descrevendo a cinética vibracional das moléculas de nitrogênio no estado fundamental e a equação de balanço térmico da coluna positiva. Sendo fortemente acopladas, estas equações são resolvidas numericamente de forma auto-coerente em função dos parâmetros de funcionamento da descarga, ou seja, pressão, composição química, fluxo, densidade de corrente, temperatura do gás, diâmetro e temperatura das paredes do tubo.

Com este modelo determinamos a população dos 20 primeiros níveis vibracionais do N_2 , dos estados eletrônicos excitados N_2 (A, B, C, a, a', a''), $O_2(a, b)$, $N(^2D, ^2P)$ e $O(^1D, ^1S)$, bem como as concentrações das espécies neutras $N, O, O_3, NO(X), N_2O$ e iônicas N_2^+, N_4^+, O^+, O^- . Calculamos também o campo elétrico reduzido (E/n), as temperaturas do gás e vibracional além da densidade eletrônica.

Na solução da equação de Boltzmann, as seções efica-

zes para os processos considerados são obtidas da literatura e são levados em conta os processos de colisões elásticas, inelásticas e superelásticas. Quanto a cinética das partículas pesadas, 130 reações físico-químicas são consideradas, sendo que os coeficientes de reação, quando não encontrados na literatura, são obtidos através de aproximações analíticas.

A comparação entre resultados teóricos e experimentais nos permitiram mostrar que os principais canais de formação do NO são ligados a reações entre moléculas de N_2 vibracionalmente excitadas e átomos de oxigênio. Mostramos também que as perdas das espécies N e O nas paredes do tubo apresentam uma importância fundamental nas equações de balanço do NO .

Acoplamento multicanal em excitações eletrônicas da molécula de H_2 por impacto de elétrons utilizando o método multicanal de Schwinger.

CLÁUDIO S. SARTORI, MARCO AURÉLIO P. LIMA
Unicamp

Um dos problemas teóricos mais importantes da área de espalhamento de elétrons por moléculas a baixas energias é o estudo de convergência das seções de choque de excitação eletrônica. Tal convergência depende basicamente da influência de canais eletrônicos energeticamente abertos (o chamado efeito multicanal) e de fechados (efeito de polarização) sobre a seções de choque de excitação de um dado estado. Devido a limitações computacionais nem sempre é possível incluir os estados eletrônicos necessários para convergência. Estamos estudando a molécula de Hidrogênio levando em conta os primeiros 10 estados tripletos. Para tanto estamos calculando as seções de choque de excitação destes estados em diversas aproximações (2, 3, ... 5 canais abertos simultaneamente) e verificando quais são mais fortemente acoplados. Além disso, estamos estudando a influência dos estados singletos correspondentes (aqueles que, em uma linguagem de partículas independentes, possuem a mesma configuração de orbitais moleculares que os tripletos) sobre as seções de choque de excitação dos estados tripletos.

Uso de pseudo-potenciais gerados na "Local Density Approximation" em cálculos moleculares Hartree-Fock

ANTONIO J. OLIVEIRA
UFMA

ALEXANDRA P. P. NATALENSE, MARCO A. P. LIMA, LUIZ G. FERREIRA
UNICAMP

A idéia do pseudo-potencial "norm-conserving" é antiga na Química Quântica [1]. Os pseudo-potenciais usados pelos químicos são naturalmente gerados resolvendo-se

o átomo com o método de Hartree-Fock (HF). Recentemente usamos pseudo-potenciais gerados por físicos de Estado Sólido em cálculos de espalhamento eletrón-molécula [2], [3]. Estes pseudo-potenciais são gerados resolvendo-se o átomo na Aproximação da Densidade Local (LDA). Há algumas vantagens dos pseudo-potenciais LDA sobre os HF, porque a LDA inclui alguns efeitos de correlação que estão ausentes no método HF.

Existem muitas maneiras de se gerar pseudo-potenciais na LDA [3], [4], [5], [6]. Então é importante conhecermos até que ponto estes pseudo-potenciais são bons e quanto são transferíveis para cálculos moleculares HF. Para ter respostas a estas perguntas, decidimos fazer uma investigação sistemática de diferentes pseudo-potenciais (LDA) em cálculos HF das estruturas eletrônicas de algumas moléculas (CH_4 , SiH_4 , CF_4 , $SiCl_4$). Um plano como este exigiu de nós desenvolver códigos que permitem colocar os muitos pseudo-potenciais em forma adequada às bases Gaussianas de nosso código HF. Nossos resultados serão apresentados na Conferência.

Referências:

- [1] P.A. Christiansen, Y.S. Lee, K.S. Pitzer, J. Chem. Phys. **71**, 4445 (1979);
- [2] M.H.F. Bettega, L.G. Ferreira, M.A.P. Lima, Phys. Rev. A **47**, 1111 (1993);
- [3] G.B. Bachelet, D.R. Hamann, M. Schluter, Phys. Rev. B **26**, 4199 (1982);
- [4] G.P. Kerker, J. Phys. **C13**, L189 (1980);
- [5] N. Troullier, J.L. Martins, Sol. St. Comm. **74**, 613 (1990);
- [6] D. Vanderbilt, Phys. Rev. B **32**, 8412 (1985).

Painéis I (ATO) - 07/06/95

Electronic Stopping Power of $< 100 >$ Axial-Channeled He-Ions in Si Crystals

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

*Instituto de Física - UFRGS, C. P. 15051, 91540-000
Porto Alegre, RS, Brasil*

R. STOLL, CHR. KLATT, S. KALBITZER
*Max-Planck Institut für Kernphysik, D-9000 Heidelberg,
Germany*

Uma elevada taxa de coloração é observada nos filmes finos de fluoreto de lítio irradiados com feixe de elétrons é essencial para a fabricação de dispositivos integrados de comunicação ótica integrada. Sabe-se que a forma e o tamanho dos grãos podem diminuir a eficiência dos

dispositivos fabricados através da absorção ou espalhamento da radiação e do feixe de elétrons, podendo inviabilizar economicamente a produção dos dispositivos óticos. O processo de produção dos filmes de fluoreto de lítio podem conduzir a materiais policristalinos com distribuição preferencial de orientações cristalográficas, que é dito textura. as várias propriedades destes filmes, que dependem das orientações de seus planos e direções cristalográficas serão anisotrópicas. Este trabalho mostra a influência das variáveis de deposição, tempo/temperatura de tratamento térmico e do tipo de substrato, sobre a textura dos filmes finos de fluoreto de lítio, através das figuras de pólos direta (fdp) que mostram apenas a projeção estereográfica e a distribuição de densidades dos pólos cristalográficos de um plano selecionado.

NOVO MÉTODO PARA DETERMINAÇÃO DE PERFIL DE VÁCUO RESIDUAL UTILIZANDO O FENÔMENO DE TROCA DE CARGA.

NEIDE GONÇALVES, HUGO MILWARD RIANI DE LUNA, RAUL JOSÉ DONANGELO, NELSON VELHO DE-CASTRO-FARIA, ODAIR D. GONÇALVES, GINETTE JALBERT

UFRJ

JUAN CARLOS ACQUADRO
USP

Desenvolvemos um novo método que permite obter o perfil de distribuição do vácuo ao longo do tubo acelerador de um tandem de stripper gasoso que se pretende utilizar em física de colisões atômicas. O método baseia-se na colisão de ions com o gás residual e está sendo testado no acelerador 5SDH-1, NEC 1.7MV, com stripper de N_2 e He^+ e H^+ como ions incidentes. Este tipo de acelerador, tem sido utilizado essencialmente para ciência de materiais (RBS, channeling, etc) e análise de traços (PIXE). Recentemente nosso grupo iniciou trabalhos com troca de carga de C^{q+} , N^{q+} e O^{q+} com gases nobres. Para esta aplicação, onde a corrente do feixe pode ser muito pequena e os feixes espúrios indesejáveis, é importante ter um bom vácuo dentro do tubo acelerador após o stripper gasoso. Trocas de carga nesta região geram um contínuo de energia para diferentes estados de carga do projétil e do gás residual. Quando não se está interessado em altas correntes ou estados de carga alta a pressão no stripper pode ser diminuída, o que melhora o vácuo dentro do tubo acelerador. Em caso contrário, a pressão no tubo acelerador pode ser suficientemente alta para induzir indesejáveis trocas de carga. De qualquer forma, é importante conhecer o perfil da distribuição de vácuo ao longo do tubo acelerador após o stripper e sua importância na indução de uma troca de carga secundária. A idéia básica do método é trocar a carga do íon incidente em colisão

com o gás residual e/ou ionizar o gás residual. Esta troca depende da energia do íon incidente no instante da colisão com átomos ou moléculas do gás residual e da densidade (pressão) do gás. O método está sendo testado no acelerador 5SDH-1 do IF-USP e resultados preliminares indicam que o método é bastante preciso.

DESTRUIÇÃO DE MOLÉCULAS RÁPIDAS DE HeH^+ EM COLISÕES COM GASES NOBRES.

ITAMAR BORGES JR, LUIS FELIPE DE SOUSA COELHO, NELSON VELHO DE-CASTRO-FARIA, GINETTE JALBERT

Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro

Mediram-se as seções de choque totais σ_D para a destruição de ions moleculares HeH^+ em He e em Ar ($3,0 \leq v \leq 5,0$ u.a.) e em Ne (3,0 e 4,0 u.a.). Os resultados foram comparados, de duas formas distintas, com os obtidos previamente para os projéteis H, H_2 , H_2^+ e H_3^+ incidindo nos mesmos alvos e com as mesmas velocidades. Primeiramente obtiveram-se os quocientes $\sigma_D(Ar)/\sigma_D(Ne)$, $\sigma_D(Ar)/\sigma_D(He)$ e $\sigma_D(Ne)/\sigma_D(He)$ e verificou-se que, dentro das barras de erro, seus valores são independentes da velocidade e, além disso, concordam com os obtidos para os outros projéteis. Estes quocientes indicam uma proporcionalidade aproximada das seções de choque com o tamanho do alvo (entendido como o raio da subcamada mais externa dos gases nobres - raio de Hartree-Fock). Numa segunda análise as seções de choque de destruição de HeH^+ são comparadas com as dos outros projéteis e verifica-se que elas obedecem a uma regra de normalização simples: $S(E) = (I/n)\sigma^{projétil}(E)$, onde a seção normalizada $S(E)$ coincide, para os diversos projéteis, dentro das barras de erro. Na expressão acima n é o número de elétrons do projétil e I é a energia de excitação mínima absorvida por ele. As seções de choque de destruição de HeH^+ em He e Ne foram comparadas aos valores medidos por outro grupo a mais baixas velocidades. Para tal, extrapolou-se aquelas seções de choque obtendo-se excelente concordância com os valores medidos por nosso grupo.

O Estudo do Estado Eletrônico Fundamental $X^1\Sigma_g^+$, da Molécula de Na_2 , pela Técnica de Espectroscopia por Transformada de Fourier Associada a Fluorescência Induzida à Laser

GUACIARA MACÊDO DOS SANTOS, CARLOS EDUARDO FELLOWS, CARLOS A. MASSONE

UFF

Neste trabalho é feita uma nova análise do estado eletrônico fundamental $X^1\Sigma_g^+$, da molécula de Na_2 . Esta foi realizada através da técnica de espectroscopia por transformada de Fourier, associada com a técnica

de fluorescência induzida por laser. Nos espectros obtidos observou-se transições cobrindo os 62 primeiros níveis vibracionais do estado eletrônico fundamental $X^1\Sigma_g^+$. As raias espectrais obtidas tiveram seus correspondentes números de onda reduzidos a constantes espectroscópicas através do método de mínimos quadrados, considerando como modelo o desenvolvimento de Dunham. Neste cálculo 8025 raias espectrais foram reduzidas à 42 constantes espectroscópicas com um erro médio quadrático de $5,2 \times 10^{-3} \text{cm}^{-1}$. Com estes parâmetros (as constantes espectroscópicas), foi possível calcular, através do método R.K.R., os valores de energia e os pontos extremos da curva de potencial do estado eletrônico $X^1\Sigma_g^+$. Posteriormente, esta curva foi corrigida pelo método I.P.A., que consiste na utilização de teorias de perturbação de primeira ordem no ajuste final das curvas de energia potencial.

FIRST PRINCIPLES MOLECULAR DYNAMICS OF THE REACTION $D + HF$ $DF + H$

REINALDO OLIVEIRA VIANNA, ANDRÉA DIAS
QUINTÃO, JOSÉ RACHID MOHALLEM
UFMG

The possibility of studying dynamical processes in atoms and molecules within the Born-Openheimer approximation by "ab initio" methods was opened since the first work by Car and Parrinello [Phys. Rev. Lett. 55, 2471 (1985)] for the density functional approximation. We have developed a valence bond analogous methodology [R. O. Vianna, Tese de Doutorado, UFMG, 1994] in order to study chemical reactions and cluster formation. We are now applying this methodology to the title reaction aiming at the investigation of effects of the different masses of D and H on the potential barrier and on the whole dynamics.

Mössbauerspectroscopic Investigations on Liquid-Crystal Ferro-Complexes: Observation of Bridging Behavior and Magnetic Relaxation Phenomena

G. H. WALE, F. J. LITTERST
Institut für Metallphysik und Nukleare Festkörperphysik,
Technische Universität Braunschweig, Germany. Germany
U. STEBANI, G. LATTERMANN
Institut für Makromolekulare Chemie I Universität
Bayreuth Germany

Liquid-crystal iron-complexes have been synthesized in three different ways. The 1,4,7 - $(FeCl_3) - 1,4,7$ -triacacyclononane complexes have been recrystallized from ether/ethanole or from octanole. One sample has been synthesized with $(FeCl_3) \cdot (H_2O)$. Similar complexes containing different metal centers show discotic molecules and a columnar order.

Mössbauerspectroscopic measurements show a bridged molecular structure for all the samples. The composition of the compounds varies for dry $FeCl_3$ and $(FeCl_3) \cdot (H_2O)$ and depends on the way of recrystallisation. The appearance of monomer molecules depends just on the presence of H_2O . Monomeric and dimeric iron centers are characterized especially by different f-factors and different quadrupole splittings. All of the iron places are in high spin Fe(III) state. First-time heating of the samples on air is accompanied by an irreversible exchange of the bridging ligands. Heating of this modified compound leads to phase transitions, resulting a reversible reduction to high spin Fe(II) and subsequent reoxidation by oxygen to high spin Fe(III) at RT. The monomer molecules show magnetic relaxation behavior for temperatures below 40K. First interpretations show a magnetic coupling between iron centers and superparamagnetic order for low temperatures, caused by liquid-crystalline order.

NÍVEIS DE ENERGIA DE SISTEMAS QUÂNTICOS COM MASSA VARIÁVEL

R. N. COSTA FILHO, F. S. A. CAVALCANTE, C. A. S. ALMEIDA, V. N. FREIRE
Universidade Federal do Ceará

Estudamos a influência nos níveis de energia na hipótese de uma variação espacial da massa de partículas confinadas em poços quânticos. Os possíveis Hamiltonianos dos sistemas são descritos pelo operador energia cinética :

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial z} \right) [m(z)^{-1}] \left(\frac{\partial}{\partial z} \right),$$

e uma contribuição ao potencial confinante, que é uma função do tipo de dependência espacial da massa das partículas e de parâmetros α e β relacionados ao conjunto de possibilidades de hermiticidade e conservação de corrente de probabilidade. Para um dado potencial, mostramos que os níveis de energia dependem do tipo de variação espacial das massas das partículas, assim como dos valores de α e β . Limites para a extensão da dependência espacial da massa são determinados para estabelecer as condições de validade da hipótese da massa constante.

ESTUDO ESPECTROSCÓPICO DO COMPOSTO 2,5-BIS(2'-BENZOXAZOLIL) HIDROQUINONA E SEUS DERIVADOS METILADOS EXCITADOS POR LASER Nd-YAG.

L. DE BONI, S. L. S. CUNHA
Instituto de Física - UFRGS
V. STEFANI
Instituto de Química - UFRGS

Apresentamos um estudo espectroscópico do complexo molecular 2,5-bis(2'-benzoxazolil)hidroquinona e seus derivados metilados, quando excitados pelo segundo (532nm) e terceiro (355nm) harmônicos do laser de Nd-YAG. Uma propriedade molecular importante, desta categoria de moléculas, é apresentar uma forma tautomérica, decorrente de uma transferência protônica, quando excitadas por luz ultravioleta. Ação laser em 600nm foi observado nos derivados deste composto com uma metila, quando excitados por laser uv, enquanto nos derivados duplamente metilados, cuja transferência protônica é inibida pelas metilas, observa-se emissão laser em sua banda violeta. (Este trabalho foi parcialmente financiado pela FAPERGS, CNPq, FINEP).

Descrição da ligação Si-CN nos cianosilanos

A. L. A. FONSECA, CARLOS F. DE S. CASTRO
Universidade de Brasília

As moléculas contendo grupos CN tem recebido uma considerável atenção na literatura, devido à sua grande ocorrência, especialmente nas áreas relacionadas à bioquímica. Também na química do meio interestelar, tais moléculas tem sido objeto de estudo. Diversos trabalhos tem fornecido informações a respeito da ligação Si-CN. Os cianosilanos $SiH_{4-n}(CN)_n$ são isovalentes com a série correspondente dos cianometanos $CH_{4-n}(CN)_n$ e formam uma das séries mais simples onde a ligação Si-CN pode ser analisada. É bem conhecido o fato de que compostos de carbono e Silício tem propriedades químicas bastante diferentes. Isto deriva das diferentes formas de participação dos orbitais s e p de cada um dos átomos na formação da ligação química. Deste modo, efetuamos cálculos ab Initio nas duas séries, procurando estabelecer diferenças e analogias, tanto na formação da ligação Si-CN, bem como na participação do grupo CN, para o qual tem sido observadas semelhanças que indicam um comportamento pseudohalogenico para este grupo. Desta forma, pudemos estabelecer o caráter da ligação Si-CN, o comportamento químico dos cianosilanos e a participação do grupo CN nestas duas séries.

CÁLCULO DA PERDA DE ENERGIA ELETRÔNICA DE PARTÍCULAS ALFAS CANALIZADAS EM SI

PEDRO LUIS GRANDE, JOSÉ HENRIQUE R. DOS SANTOS, MONI BEHAR
UFRGS

GREGOR SCHIWIEZ
Hahn-Meitner Institut, Berlin

O poder de freamento eletrônico em direções preferenciais em alvos cristalinos tem sido muito estudado durante os últimos anos tanto do ponto de vista teórico quanto do experimental. Uma análise experimental e

teórica da perda de energia eletrônica de íons canalizados é uma tarefa muito complexa devido as incertezas oriundas da dependência em termos do parâmetro de impacto da perda de energia, da distribuição de estados de carga e das possíveis trajetórias dos íons ao longo dos eixos ou entre planos cristalográficos. Neste trabalho mostramos cálculos da perda de energia eletrônica como função do parâmetro de impacto para partículas alfa incidindo nas direções $\langle 100 \rangle$ e $\langle 110 \rangle$ de silício cristalino em primeira aproximação de Born. A soma sobre os estados finais de energia é feita exatamente sem recorrer a aproximações do tipo regra de soma. Os resultados são comparados com alguns modelos teóricos existentes tais como Oen-Robinson, Firsov e "Local Density Approximation. Também é analisado o papel dos elétrons de valência na razão entre o poder de freamento eletrônico canalizado e o mesmo em uma direção aleatória.

MODELOS ESTRUTURAIS PARA AGLOMERADOS DE SILÍCIO.

CARLOS RENATO ZACHARIAS
UNESP - Guaratinguetá, ITA - São José dos Campos
MAURÍCIO RUV LEMES, ARNALDO DAL PINO
JUNIOR
ITA - São José dos Campos

Resultados experimentais recentes indicam a existência de pelo menos dois isômeros para aglomerados de Silício na faixa de 10 a 40 átomos. Um isômero é descrito por uma estrutura alongada enquanto o outro, por uma forma mais esférica e compacta. Usando técnicas de dinâmica molecular de tight-binding estudamos aglomerados de 14 a 32 átomos, arranjados em dois tipos de estrutura. A primeira consistia de hexágonos dispostos ao longo do eixo de simetria, com um átomo em cada extremidade, todos pertencentes à superfície e com número de coordenação tres, enquanto a outra, mais compacta, com átomos no interior com coordenações maiores. Nossos cálculos indicam que a primeira estrutura é mais estável para aglomerados menores, enquanto a segunda, para aglomerados maiores. Esses cálculos são coerentes com resultados obtidos a partir da teoria do funcional de densidade na aproximação de densidade local.

Modelo de Força "Tight Binding" Para Dinâmica Molecular: Aplicação a Aglomerados de Silício.

MAURÍCIO RUV LEMES, ARNALDO DAL PINO
JUNIOR
Instituto Tecnológico de Aeronáutica

Um método de Simulação para cálculos de Dinâmica Molecular usando o modelo semi-empírico "Tight Binding" é proposto. O procedimento permite que

as interações interatômicas sejam determinadas pelos cálculos de estrutura eletrônica e energia total de primeiros princípios sem recorrer ao ajuste de dados experimentais. Para isto, criamos um código computacional (TB) para o cálculo de estrutura eletrônica de sistemas moleculares, desenvolvemos um programa para Otimização de geometria de aglomerados moleculares baseado no método de Recozimento Simulado que foi unificado ao TB. Também desenvolvemos um programa para o cálculo de forças atômicas para ser empregado em simulações de Dinâmica Molecular de sistemas moleculares. Para efeito de teste, aplicamos esta metodologia a aglomerados pequenos de silício (Si_n , $n < 12$). Esta escolha justifica-se devido ao interesse em aglomerados de silício de porte médio (Si_n , $20 < n < 50$), bem como a existência de cálculos de primeiros princípios para aglomerados pequenos. Concluimos que a utilização do método descrito acima para aglomerados maiores, onde os cálculos de primeiros princípios são proibitivos, são promissores e encontram-se em andamento.

Perda de energia de ions de Hélio rápidos canalizados em Silício.

L. M. PIMENTEL, R. DONANGELO
Universidade Federal do Rio de Janeiro
 J. C. ACQUADRO
Universidade de São Paulo

Baseada na recente idéia apresentada por um grupo do IF-UFRS[1] estamos iniciando o estudo da perda de energia e equilíbrio de carga de ions de He^+ e He^{++}

com energias de até 1MeV/u canalizados nas direções $\parallel 110_z$ e $\parallel 100_z$ de cristais finos de Si. Os cristais, fornecidos pela IBM/USA, têm espessura inferior a $1\mu m$. Analisamos as propriedades do espectro de RBS (Rutherford Backscattering) obtido em incidência aleatória e canalizada. Para medir essa perda de energia foi colocado um filme fino de Au na parte posterior do alvo. A medida da perda de energia consiste na determinação da diferença das energias do pico do Au nos regimes de incidência aleatória e canalizada. As experiências estão sendo realizadas no LAMFI do IF-USP o qual possui uma fonte de ions de rádio-freqüência seguida de troca de carga (forno de Rb) que fornece ions de He, os quais são acelerados por um potencial de até 1.6MV. Um goniômetro de precisão de dois eixos permite alinhar o cristal para encontrar a canalização a ser estudada. A energia dos ions retro-espalhados é medida por detectores de barreira de superfície. Mostraremos os espectros de RBS e os primeiros valores medidos.

Referência:

[1] -J. H. R. dos Santos, P. L. Grande, H. Bondinov e M. Behar (a ser publicado).

Workshop: Problemas em F.A.M. com Demanda de Computação de Alto Desempenho (ATO) - 08/06/95

ESPALHAMENTO DE PÓSITRONS E ELÉTRONS POR MOLÉCULAS: UM PROBLEMA DE ALTA DEMANDA COMPUTACIONAL

MARCO AURÉLIO PINHEIRO LIMA
 UNICAMP

Hoje em dia, a grande motivação tecnológica para estudar o processo de espalhamento de elétrons por moléculas se encontra nos chamados plasmas de baixa pressão e temperatura (plasmas frios). Plasmas frios são ambientes de descarga onde a colisão de elétrons com átomos e moléculas tem um papel especial: ela transforma gases inertes em uma sopa altamente reativa de ions, radicais, e moléculas excitadas capaz de gerar modificações importantes em superfícies em contacto com esses plasmas ("etching", diamantização nitretação, etc). O controle fino desta sopa depende de nossa capacidade de modelar estes ambientes de descarga. A modelagem exige o conhecimento das seções de choque de excitação eletrônica que ocasionam dissociação e ionização molecular. A obteção destas seções de choque é uma tarefa muito difícil tanto para teóricos quanto para experimentais. A dificuldade experimental se encontra na resolução do espectro eletrônico: é possível dizer quanto de energia o elétron perdeu, *mas, na maioria dos casos, não é possível apontar qual dos estados moleculares foi de fato excitado pelo impacto desse elétron.* A dificuldade teórica será objeto de meu seminário. Nele, discutirei as aproximações necessárias e a demanda computacional exigida para resolver o problema de forma adequada. Além disso, discutirei aspectos teóricos do problema de espalhamento de pósitrons por moléculas que, embora pareça ser um problema semelhante, apresenta fenômenos bastante distintos, como por exemplo, a formação e aniquilação de positrônios em ambientes moleculares.

ASPÉCTOS COMPUTACIONAIS NO CÁLCULO DE ESTRUTURA ELETRÔNICA DE ÁTOMOS E MOLÉCULAS

SYLVIO CANUTO

Instituto de Física da USP

Os fundamentos da mecânica quântica necessários para se estudar boa parte dos problemas associados a estrutura eletrônica de átomos, moléculas e clusters são conhecidos há mais de cinquenta anos. Embora avanços consideráveis tenham sido obtidos, é necessário admitir que o progresso desta área teórica está fortemente relacionado, ou mesmo dependente, as sofisticações computacionais obtidas nas poucas décadas recentes. Em boa medida, técnicas sofisticadas foram desenvolvidas tendo-se em conta algoritmos e máquinas computacionais acessíveis. Como já é bem sabido, a solução precisa da equação de Schrodinger não-relativista dá resposta a um número grande de problemas em física atômica, molecular, do estado sólido e mesmo da química. Por estas razões, ao longo das últimas décadas vários métodos foram desenvolvidos e aprimorados para o estudo da estrutura eletrônica da matéria. Entre estes, os métodos de interação de configurações e perturbação de muitos corpos, ou sua extensão infinita conhecida como "Coupled-Cluster", tem sido de grande utilidade. Este destaque é consequência de suas habilidades em atingir a solução exata, no limite de sua aplicabilidade. Nesta apresentação, discutiremos estes métodos do ponto de vista do avanço computacional ocorrido nos últimos anos. Arriscaremos também algumas previsões para o futuro próximo.

Por Impacto de Elétrons Utilização de super-computação em Química Quântica e Modelagem Molecular

MARCO ANTÔNIO CHAER NASCIMENTO

Departamento de Físico-Química, Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro

Nos últimos cinco anos pudemos observar um fantástico crescimento das áreas de Física e Química Computacional, resultado do desenvolvimento de novas metodologias e algoritmos aliado à utilização de supercomputadores.

Do ponto de vista de cálculos "ab-initio", os métodos pseudo-espectrais passaram a permitir o tratamento rigoroso de sistemas contendo mais do que cem átomos. Funções de onda auto-consistentes e correlacionadas, como uma dependência exponencial em N (número de funções de base) da ordem de 2,1-2-2 podem agora ser calculadas. Por outro lado, métodos de dinâmica molecular, acoplados ou não a métodos "ab-initio" ("embedding") começam a ser empregados para o estudo de modelos mais realísticos de sistemas físico-químicos de grande importância prática. Na nossa apresentação procuraremos demonstrar a importância da utilização de supercomputadores nas áreas de catálise heterogênea (difusão, adsorção e reação), propriedades mecânicas de polímeros e enovelamento de proteínas. Apoio: CNPq, Finep.

Hot Topics I (ATO) - 08/06/95

A MICROSCOPIC MODEL TO ELECTRONIC AVALANCHE AND MULTIPLICATION FACTOR IN PROPORTIONAL CHAMBERS

D. P. ALMEIDA

IF-UFRJ

This work presents a microscopic model that determines the electronic multiplication factor for gaseous chambers operating in proportional mode. The Townsend's first coefficient (α/P) for the electronic discharge phenomena in gases is expressed in terms of inelastic and ionization cross sections of the electron-atom collision reaction. Both the individual ionization process and the

energy loss by electron impact excitation are described through the Bethe formula. Theoretical models capable of describing α 's physical nature can be an important tool in understanding electronic avalanche effect. The main purpose of this paper are to present a theoretical treatment which introduces the energy loss occurring during the electronic multiplication in proportional chambers. We developed - using the model presented earlier - a calculation which describes the electronic avalanche in argon and xenon. Elastic and inelastic collision between the drifted electron and the media particles are considered. The present results agree well with previous empirical models and to experimental data available in the literature.

COVALENT BINDING IN METAL CLUSTERS

JOSÉ RACHID MOHALLEM, REINALDO OLIVEIRA
 VIANNA
 UFMG
 ANTONIO CARLOS PAVÃO
 UFPE
 ROY MCWEENY
 Università di Pisa

We report for the first time valence bond calculations with the explicit use of unsynchronized resonance structures introduced by Linus Pauling [Nature, 161, 1029(1948)]. We show that resonances involving these structures contribute to the stabilization and conformation of Li clusters, give qualitative pictures for the anticipation of the most stable geometries and dissociation channels and also play a central role in a valence bond explanation of the three center bonds in plane alkaline clusters. The theory mixes electronic structure and conformation in the explanation of cluster stability and makes connection with the appearance of magic numbers. Various discrepancies between the predictions of the superatom model and MO-CI calculations can be interpreted. This is the first "ab initio" checking of Pauling's ideas and our results seem to confirm his arguments on the existence of the "metallic orbital" and that the metallic bond has a covalent character.

MODELAGEM GEOMÉTRICA-HIPERBÓLICA DE DENDRÍMEROS

ISAAC DE MELO XAVIER JUNIOR
 Departamento de Química Fundamental, UFPE
 ANTONIO DE PÁDUA, VICENTE CARIRI
 Departamento de Física, UFPE
 FERNANDO MORAES
 Institute for Advanced Studies, Princeton

Recentemente, macromoléculas com estruturas altamente ramificadas denominadas de dendrimeros têm sido sintetizadas com controle de tamanho, da forma, da topologia, da flexibilidade e da química de superfície [J. M. Frechet, Science **263**, 1710 (1994)]. Estas moléculas emanam de um ponto central e têm um número definido de gerações e grupos terminais. Neste trabalho fazemos o uso do modelo geométrico - hiperbólico para a rede de Bethe [J. A. Miranda-Neto e F. Moraes, J. Phys. (France), **2** 1657 (1992); *ibid* **3**, 29 (1993)] para estudar as propriedades de escalonamento geométrico do hidrocarboneto $C_{1134}H_{1146}$, que consiste de 94 unidades de fenilacetileno com um esqueleto isomorfo a rede de Bethe tricoordenada. Com este modelo nós encontramos um limite superior para o tamanho molecular, o perfil de densidade e comparamos nossos resultados com as simulações computacionais e a teoria desenvolvida para o crescimento molecular dendrítico.

Painéis II (ATO) - 08/06/95

PRODUÇÃO DE H^- A PARTIR DE HeH^+ , COM VELOCIDADE DE 4,0 u.a., COLIDINDO COM GASES NOBRES.

ITAMAR BORGES JR, LUIS FELIPE DE SOUSA
 COELHO, NELSON VELHO DE-CASTRO-FARIA,
 GINETTE JALBERT

Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro

Foram medidas as seções de choque de produção de H^- para ions rápidos de HeH^+ colidindo com He, Ne e Ar em $v=4$ u.a.. Esta velocidade do projétil assegura que a captura eletrônica é desprezível e portanto que este processo de produção se dá apenas pelo canal $He^{++} + H^-$. Foi efetuada a comparação para processo similar em projéteis moleculares H_3^+ , levando a $H^+ + H^+ + H^+$. As probabilidades de produção de H^- , considerando que o projétil foi destruído, são dadas, após normalização pelo número de prótons do projétil, por $P_{HeH^+} = \sigma(HeH^+ \rightarrow H^-) / \sigma_D^{HeH^+}$ e por $P_{H_3^+} = (1/3)\sigma(H_3^+ \rightarrow H^-) / \sigma_{H_3^+}$. Os valores experimentais destas grandezas são comparáveis e podem ser interpretados a partir de um modelo estatístico simples. Nesse modelo (a) um íon H^- apenas emergirá se, antes da colisão, os dois elétrons estiverem juntos de um próton e (b) a chance de cada elétron estar junto de um núcleo independe de existir ou não outro elétron, o que leva a $P_{HeH^+} / P_{H_3^+} = 9/4$. Após a explosão os fragmentos se afastam com velocidade relativa menor que 1 u.a. e portanto a captura é bastante provável. Verificase que o quociente $P_{HeH^+} / P_{H_3^+}$ é da ordem da unidade. Isto mostra uma inibição mais forte na produção de H^- a partir de HeH^+ do que a partir de H_3^+ , o que pode ser causado pela captura mais eficiente pelo íon He^{++} do que pelos dois prótons do H_3^+ fragmentado.

IONIZAÇÃO DE IONS RÁPIDOS DE CARGA MÚLTIPLA.

GUSTAVO DE MEDEIROS AZEVEDO
 Departamento de Física, PUC-Rio

NELSON DE-CASTRO-FARIA, GINETTE JALBERT,
 RAUL JOSÉ DONANGELO

Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro

Em trabalhos recentes foi demonstrada a possibilidade de se estudar a ionização de ions multicarregados por impacto de elétrons utilizando a técnica de canalização. O experimento consiste em se enviar um íon de carga q e velocidade v sobre um canal particular do cristal e observar diferentes ions de carga q' que são transmitidos. Na análise, consideramos que os ions colidindo com os elétrons do meio são equivalentes a um feixe

eletrônico colidindo sobre o íon. Cálculos de seções de choque de ionização utilizando esta interpretação necessitam de uma modelagem correta da situação física que inclui o conhecimento das equipotenciais do canal, da densidade eletrônica local e, conseqüentemente, da trajetória do íon.

Uma análise preliminar foi realizada, na qual foi feita a hipótese que os íons canalizados estariam numa situação de equilíbrio no espaço transversal, ou seja, o fluxo de partículas seria uniforme dentro do espaço transversal disponível. Tal hipótese permitiu que a análise considerasse somente valores médios das grandezas relevantes (equipotenciais e densidade eletrônica), sem um conhecimento detalhado das trajetórias dos íons dentro do sólido.

Realizamos uma nova análise utilizando um programa desenvolvido por nós, que descreve a situação física de forma mais realista, já que nele resolvemos as equações de movimento do íon dentro do canal, acopladas às equações diferenciais que descrevem os processos de ionização sucessivas do íon canalizado. Apresentaremos os resultados obtidos relativos à questão do equilíbrio estatístico no espaço transversal e as seções de choque de ionização por impacto de elétrons de íons de Xe canalizados na direção $\langle 110 \rangle$ do Si.

IONIZATION CROSS SECTIONS FOR ELECTRON IMPACT ON NEON (Ne - Neⁿ⁺); WITH N=1 to 5)

D. P. ALMEIDA, C. F. L. GODINHO
 IF-UFRJ
 A. C. S. FONTES
 IF-PUC

Electron impact ionization of atoms is a fundamental process from both experimental and theoretical point of view. Determination of absolute excitation and ionization cross sections for electrons in gases is important for several reasons. The most obvious ones are applications of these data in plasma physics, astrophysics and radiation chemistry. In this context experimental results are presented for multiple ionization cross section of neon by electron impact with energies ranging from 0,14 to 3keV, based on time-of-flight technique. This work also presents the values of dipole oscillator strength (DOS) for multi-ionization of an atomic target reaction by electron impact as a function of the target final charge state. In all cases the energy dependence of the cross section is in agreement with the Bethe theoretical relation which gives a possibility of comparing with photoionization cross sections. A comparison with others experimental data is presented and discrepancies discussed.

Ionização Por Impacto de Elétrons do Tetracloreto de Carbono

D. P. ALMEIDA, F. ZAPPA, C. F. L. GODINHO
 IF-UFRJ

O tetracloreto de carbono é uma substância de muitas aplicações práticas, sendo normalmente usada nos laboratórios químicos como um solvente e reagente. Neste trabalho apresentamos os espectros obtidos com o Espectrômetro de Massa por Colisão Eletrônica, usando a técnica do tempo-de-vôo, e uma energia de impacto de elétrons variando entre 100 e 1000 eV. Este equipamento foi usado para a obtenção das medidas de seção de choque de ionização por impacto de elétrons em átomos (gases nobres) com bastante sucesso, e o objetivo do presente trabalho é continuar as medidas de seção de choque, agora em moléculas. Nos espectros observa-se que o canal de ionização não dissociativa é minoritário quando comparado à formação de CCl_3^+ , CCl_2^+ , e CCl^+ . Isso não ocorre por exemplo com o metano, que possui a mesma simetria espacial. No futuro, nossos dados de reação de impacto de elétrons serão comparados a dados equivalentes para reações de colisão de fótons.

UTILIZAÇÃO DO FUNCIONAL - \bar{C} PARA O CÁLCULO DE SEÇÕES DE CHOQUE DE MOLÉCULAS POR IMPACTO PÓSITRONS

JORGE LUIZ DA SILVA LINO
 Instituto Tecnológico de Aeronáutica - ITA
 MARCO AURÉLIO PINHEIRO LIMA
 Instituto de Física Gleb Wataghin - UNICAMP

Neste trabalho apresentamos seções de choque elásticas para o átomo de Hélio e a molécula de H_2 por impacto de pósitrons utilizando o método variacional Funcional- \bar{C} (CF). Este método, que foi inicialmente proposto para o espalhamento de elétrons [1] (e implementado somente para moléculas de simetria cilíndrica [2]) consiste em descrever melhor a função de onda de espalhamento do método multicanal de Schwinger (SMC) que comporta-se de maneira eficaz apenas quando o potencial de espalhamento envolvido é de curto alcance. A versão atual do CF foi desenvolvida para um tratamento mais adequado do SMC para pósitrons [3] quando as moléculas envolvidas no processo de colisão possuem um potencial de longo alcance. A diferença básica dos dois métodos (CF e SMC) no contexto de pósitrons está na requisição do primeiro e do segundo termo de Born na amplitude do CF. Assim como o SMC o CF é aplicável a alvos de geometria arbitrária e pode incorporar efeitos de polarização. Como um teste de nossos procedimentos, apresentaremos resultados para os sistemas $e^+ - \text{He}$ e $e^+ - \text{H}_2$.

[1] Takatsuka and McKoy, Phys. Rev. A23, 4115 (1981)

[2] L. M. Tao, K. Takatsuka and V. McKoy, J. Phys. B14, 4115 (1981)

[3] J. S. E. Germano and M. A. P. Lima, Phys. Rev. A47, 3976 (1993)

Apoio Financeiro: Fapesp, CNPq e Finep.

**DISCRETE VARIABLE REPRESENTATION
AND NEGATIVE COMPLEX POTENTIAL.
APPLICATION FOR THE
PHOTODISSOCIATION OF HCl^+**

FREDERICO VASCONCELLOS PRUDENTE, JOAQUIM
JOSÉ SOARES NETO
Universidade de Brasília - UnB

The Discrete Variable Representation (DVR) has been successfully used in several calculations of molecular processes. The potential is diagonal and the kinetic energy operator can be calculated analytically in this theory. This leads to a very efficient way of calculating ro-vibrational states of molecules. We develop here a numerically optimized Discrete variable representation and use it in the calculation of the photodissociation process of HCl^+ and other diatomic molecules. There are two methodologies to calculate photodissociation: scattering theory and a negative complex potential formulation. The second methodology utilizes a complex barrier in the asymptotic region of the potential given rise to a complex bound state problem. We show here that this procedure is simpler than the one using scattering theory and produce results of the same accuracy. Numerical work illustrate this point showing results for the ion HCl^+ using both techniques.

**Discrete Variable Representation and Complex
Potential for Calculating Resonant States of
Van der Waals Molecules**

LUÍS SILVA DA COSTA, JOAQUIM JOSÉ SOARES NETO
Universidade de Brasília - UnB

We utilize the discrete variable representation method (DVR) and complex L^2 functions to calculate resonant states for diatomic and tri-atomic Van der Waals molecules in the present work. The complex L^2 functions are eigenfunctions of a complex Hamiltonian containing a negative imaginary potential. This Hamiltonian is given by: $H' = H - iV$ where H is the actual Hamiltonian and V is the absorbing potential which is defined only in the asymptotic region. The procedure leads to a diagonalization of complex and non-Hermitian matrix, H' . The complex eigenfunctions are obtained in two steps, we diagonalize the real part of the Hamiltonian H , and utilize this eigenfunctions as basis functions to obtain the eigenvalues and eigenfunctions of the total Hamiltonian H' . We obtain resonant states (associated with the real eigenvalues), and lifetimes of this states of diatomic and tri-atomic Van der Waals molecules.

**Excitação Vibracional de Moléculas de
Oxigênio Por Impacto de Elétrons**
EVANDRO MARCOS SAIDEL RIBEIRO, LUIZ EUGÊNIO
MACHADO, LEE MU-TAO, MILTON MASSUMI
FUJIMOTO
UFSCar
LUIZ MARCO BRESANSIN
Unicamp

Estudos de processos de excitação vibracional de moléculas são relevantes para muitas áreas de investigação em Física e Química. Por exemplo, as propriedades de reatividade de moléculas são frequentemente dependentes do nível vibracional em que se encontram^a. Neste trabalho utilizamos o método variacional iterativo de Schwinger (SVIM)^b para o estudo de excitações vibracionais da molécula de Oxigênio (O_2) induzidas por impacto de elétrons. O SVIM já foi utilizado com sucesso para o estudo de processos semelhantes em outros sistemas moleculares^c. No presente trabalho somente as transições $v = 0 \rightarrow v' = 0, 1, 2, 3$ do processo eletronicamente elástico (no estado eletrônico fundamental) foram consideradas. As amplitudes de espalhamento dependentes da distância internuclear (R) foram calculadas para sete valores, $1.8 \leq R \leq 3.1$ a.u. As funções de onda vibracionais foram calculadas numericamente utilizando a curva de potencial do estado eletrônico fundamental do tipo RKR^d. Os cálculos foram efetuados separadamente para os canais dubleto (spin total $S = \frac{1}{2}$) e quarteto ($S = \frac{3}{2}$), e a seção de choque total é dada pela média estatística destas contribuições. Calculamos as seções de choque diferenciais (SCD) e integrais (SCI) para elétrons incidentes com energias na faixa de 10 a 40 eV. Um grupo experimental do exterior^e está atualmente fazendo medidas de SCD que, se disponíveis até à época do Encontro, serão comparadas aos nossos resultados.

Apoio: FAPESP, CNPq e FINEP-PADCT.

^aP. W. Atkins, *Physical Chemistry*, Oxford University Press, 4th Ed. (1990)

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

^cLee Mu-Tao, L. E. Machado, L. M. Bescansin and G. D. Meneses, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 24 509 (1991)

^dP. H. Krupenie, *J. Phys. Chem. Ref. Data* 1 483 (1972)

^eP. J. O. Teubner, comunicação pessoal (1994)

**Uma nova abordagem para a solução da
equação de Schrödinger dependente do tempo
para moléculas triatômicas - Aplicação à
fotodissociação de H_2O .**

TARCÍSIO MARCIANO DA ROCHA FILHO, JOAQUIM
JOSÉ SOARES NETO

Departamento de Física - Universidade de Brasília

Apresentamos uma nova abordagem para a solução da equação de Schrödinger dependente do tempo baseada nos métodos de separação de operadores e

da decomposição pseudo-espectral e da Representação da Variáveis Discretas (RVD). Para uma molécula triatômica, com momento angular total nulo, utilizamos as coordenadas de Jacobi. Utilizando alternadamente a passagem para as diferentes representações em variáveis discretas consideradas é possível mostrar que grande parte dos cálculos de propagação pode ser feita uma única vez ao início do cálculo e armazenada em memória, permitindo assim uma melhora drástica no desempenho numérico do método. Esta abordagem permite realizar cálculos de propagação dependente do tempo em estações de trabalho atualmente disponíveis, em tempos de CPU bastante confortáveis, exigindo no entanto uma grande quantidade de memória RAM (da ordem de algumas centenas de MegaBytes), que já começam a ser comumente encontradas nas atuais estações de trabalho. A presente abordagem é aplicada ao problema da fotodissociação da molécula de água.

A PRODUÇÃO DE UM FEIXE ATÔMICO NUM ESTADO METAESTÁVEL POR COLISÃO DE ELÉTRONS: OS CASOS DO MG E DO CA.

FERNANDO J. DA PAIXÃO
UNICAMP

Nos últimos anos foram produzidos experimentalmente feixes de átomos num estado excitado metaestável de Mg e Ca. A motivação destas experiências é o resfriamento destes átomos para a sua posterior utilização num relógio atômico. O arranjo experimental do feixe de elétrons é tal forma que o estado metaestável produzido possui algumas propriedades muito interessantes e ainda não observadas. Este trabalho consiste em fazer uma análise teórica do processo de produção destes feixes e mostrar como surgem estas novas propriedades. Faremos uma estimativa teórica dos novos efeitos e vamos sugerir algumas experiências novas que podem ser feitas com estes feixes atômicos.

DIPOLE-FORBIDDEN, MULTIELECTRON VALENCE EXCITATION AND GENERALIZED OSCILLATOR STRENGTH FOR THE $5t_2 \rightarrow 6a_1$ TRANSITION IN THE SiF_4 MOLECULE.

HELOISA M. BOECHAT-ROBERTY, MARIA LUIZA M. ROCCO
UFRJ
CARLOS ALBERTO LUCAS
UFF
G. GERSON B. DE SOUZA
UFRJ

The electronic excitation of the silicon tetrafluoride (SiF_4) molecule has been studied by angle-resolved electron energy-loss technique, at 1.0 keV incident electron

energy, in the 5 to 100 eV energy range. A very broad and intense band has been observed with intensity maximum at about 44 eV for scattering angles larger than 4° and has been tentatively assigned to the dipole-forbidden excitation of multielectronic processes in this molecule. As far as we know is the first time that a process like this is observed in any molecule. The absolute generalized oscillator strength (GOS) for the $5t_2 \rightarrow 6a_1$ electronic transition located at 13.0 eV has been determined. A minimum has been observed in the GOS for this transition at the square of the momentum transfer, $K^2 = 1.4$ a.u.. We also present the elastic differential cross section determined at 1.0 keV, in the 0 to 3.0 K^2 range.

Photo-fragmentation Spectroscopy of Small Carbon-containing Molecules

ANTONIO RUBENS BRITTO DE CASTRO
LNLS and IFGW-UNICAMP, Campinas SP Brasil
SANDEEP KAKAR, OLLE BJOERNEHOLM, OLIVER LOEFKEN, THOMAS MOELLER
HASYLAB am DESY, D 22603 Hamburg FRG

Photo-induced fragmentation of clusters and molecules gives information on energy relaxation and bond properties in condensed matter.

We studied the fragmentation of C-C bonds, due to irradiation with photons of energy close to 300 eV, of C_6H_6 , C_6H_{10} and C_6H_{12} .

These substances exhibit different C bonds, and are relevant in CVD of diamond films. Among other goals, this is a preliminary to studies of Carbon clusters which we have recently started.

The experiments were done at the high photon flux, high spectral resolution beamline BW3 at HASYLAB (Hamburg, FRG). The photon source is an undulator. A vapor jet of the species of interest was admitted to a vacuum chamber where it was crossed by a monochromatic photon beam tuned in the C K-edge range. The interaction region was at the entrance of a time-of-flight spectrometer where the positive ions were collected and mass analyzed.

The results are consistent with the following model: the excitation of a $C1s$ electron into an unoccupied orbital is followed by Auger type decay resulting in various valence vacancies. Almost all C_6H_{12} is broken into several pieces. On the contrary, a substantial amount of C_6H_6 survives irradiation, revealing the presence of some efficient energy-redistribution mechanism, which might be related to the electronic structure of the aromatic ring. The strength of the $C1s \pi^*$ peak is well correlated with the abundance of the double bond $C=C$; it is strong on C_6H_6 and absent on C_6H_{12} .

The partial ion yield shows marked differences in spectral behavior for the fragments $(CH_3)^+$, $(C_4H_n)^+$, $(C_6H_6)^+$, which can also be understood within a simple model.

**PRESENÇA DE C_2H_2 E C_2H_4 NA CINÉTICA
DAS REAÇÕES NO PROCESSO DE
FORMAÇÃO DA FULIGEM**

CHRISTIAN ALEXANDRE VIEIRA, JOAO A. FACIN,
MARCO A. F. SCARPARO, CARLOS ALBERTO

FERRARI
UNICAMP
ZHOU ZHIYAO

*Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics - Chinese
Academy of Science*

Pelo efeito fotoacústico da amostra em célula determinamos, para a linha de absorção do LASER de CO_2 , de intensidade I_0 , a relação $S/N \times \text{concentração}$ da amostra, considerado o ruído de fundo. Das curvas de intensidade, I , do feixe de LASER transmitido, para as linhas absorvida e não absorvida, em função da altura h , a partir do queimador, podemos mapear as concentrações das amostras na chama. Da confrontação destes levantamentos com os resultados obtidos pela técnica da extinção da radiação LASER pela chama podemos inferir hipóteses sobre o precursor do processo de formação de fuligem na queima de hidrocarbonetos [Frenclack, M.; Clary, D. W.; Gardiner Jr., W. C. and Stein, S. E. 20th Symposium (Int.) on Combustion. The Combustion Institute, Pittsburg, Pennsylvania, p. 887 and 21st Symp. (Int.) on Combustion. The Combustion Institute, Pittsburg, Penn., p. 1067; Smedley, J.M., Williams, A. and Bartle, K. D.; Combustion and Flame, 91:71-82 (1992)]

**EFEITO NÃO PERTURBATIVO DA
BLINDAGEM NO PROCESSO DE PERDA
ELETRÔNICA**

PEDRO LUIS GRANDE
UFRGS

GERALDO M. SIGAUD, EDUARDO MONTENEGRO
PUC-Rio

GREGOR SCHIWITZ
Hahn-Meitner Institut, Berlin

A perda de elétrons de íons em colisões atômicas é dominada por dois mecanismos: a interação núcleo-elétron e a interação elétron-elétron. Estes dois mecanismos possuem comportamentos muito diferentes com relação ao parâmetro de impacto da colisão e a carga nuclear do alvo. Medidas das seções de choque de perda eletrônica de He^+ incidindo em alvos gasosos (He, Ne, Ar, Kr e Xe) realizadas no laboratório Van Der Graaff da PUC-Rio, mostram um forte efeito de saturação dessas seções de choque como função do número atômico Z do alvo. Tal efeito de saturação é proveniente da blindagem passiva que os elétrons do alvo desempenham na colisão e não pode ser descrito em primeira ordem de teoria de perturbação. A fim de se obter a influência da correlação (elétron-elétron) entre os elétrons do projétil e do alvo é necessário se descontar esse efeito de blindagem,

o que implica na resolução precisa da equação de Schroedinger dependente do tempo para o elétron ativo perturbado pelo potencial blindado (núcleo + elétrons) devido ao alvo gasoso. O método da resolução da equação de Schroedinger dependente do tempo é baseado na expansão da solução geral em orbitais atômicos centrados no átomo onde se encontra o elétron ativo (onde se mede a seção de choque de perda eletrônica). Assim, se origina um conjunto de equações diferenciais acopladas para os coeficientes desta expansão (método dos canais acoplados). Cálculos realizados em computadores de pequeno porte mostram que, a medida que a carga nuclear (a perturbação) aumenta, mais estados intermediários são necessários para se obter uma boa representação da função de onda final e convergência nas probabilidades resultantes. Daí o uso de um supercomputador (CRAY - UFRGS) com mais memória e velocidade torna-se imprescindível. Os resultados obtidos para as seções de choque de perda eletrônica de He^+ mostram que o efeito não perturbativo da blindagem passiva torna-se muito mais importante que a interação elétron-elétron (modo de "antiscreeing"). Efeitos não perturbativos no modo de "antiscreeing" são também investigados.

**SECÇÃO DE CHOQUE DIFERENCIAL
ELÁSTICA PARA O ESPALHAMENTO DE
ELÉTRONS POR MOLÉCULAS DE CH_4 E**

SO_2

I. IGA, M. A. E. FERREIRA, M. -T. LEE, J. C.
NOGUEIRA, M. G. P. HOMEM, H. S. MIGLIO

UFSCar

Nesse trabalho reportamos medidas de secção de choque diferencial elástica relativas para impacto de elétrons em moléculas de CH_4 e SO_2 no intervalo de 200 a 1000 eV. Algumas condições experimentais usadas durante as medidas são: corrente do feixe primário de elétrons em torno de 4×10^{-6} A; o intervalo angular em que foram feitas as medidas foi de -30° a 140° ; pressão de trabalho cerca de 1×10^{-6} torr. Todos os dados são tomados a temperatura ambiente. Os elétrons espalhados são analisados por um analisador de velocidades do tipo Mollenstedt que dá uma resolução em energia de 1×10^{-3} . Visto que o feixe de elétrons primário não é monocromatizado os espectros vibracional e rotacional não são resolvidos. A normalização das seções de choque para valores absolutos será feita usando a técnica do fluxo relativo, onde usaremos vários gases como padrões secundários afim de investigar a influência de diferentes padrões sobre as seções de choque. O resultado de tais estudos, bem como as seções de choque diferenciais absolutas para tais moléculas, serão apresentadas durante o congresso.

ESPALHAMENTO ELÁSTICO DE ELÉTRONS POR MOLÉCULAS DE N_2O .

MICHELIN S. E, KROIN T

Departamento de Física, UFSC

MU-TAO L

Departamento de Química, UFSCar

MACHADO L. E

Departamento de Física, UFSCar

L. M. BRESANSIN

UNICAMP

O método variacional de Schwinger completado com a aproximação de Born (BCSVM) foi recentemente proposto por Lee *et al.*^(a), para o estudo do espalhamento elástico de elétrons por moléculas para baixas e médias energias do elétron incidente. Nesta aproximação, os elementos da matriz-T expandidos em ondas parciais são calculados ao nível estático-troca (SE), usando o método variacional iterativo de Schwinger (SVIM)^(b) onde as contribuições de altas ordens, já que na expansão em ondas parciais truncamos para um l_{max} , são então avaliadas via uma aproximação tipo Born. O BCSVM já foi aplicado para o cálculo da seção de choque diferencial elástica de várias moléculas lineares como $C_2H_2^{(a)}$ (10-200eV), $NO^{(c)}$ (5-500eV), etc e os resultados obtidos são encorajadores quando comparados com dados experimentais disponíveis. Neste trabalho vamos aplicar o BCSVM para o espalhamento elástico $e^- - N_2O$, uma molécula poliatômica que nos últimos anos tem despertado o interesse de pesquisadores das áreas da química, física e biologia. Porém a despeito deste interesse, muito pouco se conhece sobre esta molécula, particularmente com relação as seções de choque, sendo que os resultados conhecidos são muitas vezes inconsistentes entre si. Mesmo a nível de espalhamento elástico, os poucos trabalhos experimentais fornecem informações incompletas e para uma pequena faixa de energias do elétron incidente^(d,e). Com respeito a trabalhos teóricos para o espalhamento elástico desta molécula, até onde pudemos averiguar, não existe nenhum dado disponível na literatura. Assim fizemos o cálculo da seção de choque diferencial elástica e da seção de choque total, quando comparamos nossos resultados com os disponíveis na literatura notamos uma concordância qualitativa muito boa entre as formas das curvas para energias maiores do elétron incidente (acima de 10 eV). Para baixas energias (<10 eV), nossos resultados são mais altos que os experimentais, acreditamos que esta diferença seja devido a negligência de efeitos de polarização para pequenos ângulos de espalhamento, como discutido por Lee *et al.* Maiores detalhes serão fornecidos durante a apresentação. Apoio CNPq, FAPESP.

^(a) Lee M-T, Bescansin, L. M., Lima, M. A. P., Machado L. E. and Leal, E. P., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 23, 4331 (1990).

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

^(c) Mu-Tao Lee, Milton M. Fujimoto, Sérgio E. Michelin, Luiz E. Machado and Luiz M. Bescansin, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 25 L505 (1992).

^(d) Marinković B., Szmytkowski Cz., Pejčv V., Filipović D. and Vušković I., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, 19 2365 (1986).

^(e) Johnstone W. M. and Newell W. R., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 26 129 (1993).

Ionization of ground state hydrogen in an intense laser field.

ROSANGELA B. PEREIRA, ANTONIO LUCIANO DE A. FONSECA, ANTONIO CLEVES NUNES

Depart. de Física UnB

Multiphoton absorption by bound electrons has been considered on several occasions. It is considered on the basis of Keldysh-Faisal-Reiss (KFR) type approximation, the changes in the cross section of multiphoton ionization of a bound electron due to the presence of a multiphoton laser field. The usual formulae for the cross section obtained in early works formally solves the problem of the influence of the intense laser field on the process of electron scattering. But the result (containing an infinite series of products of Bessel functions) is not satisfactory from the physical point of view. So it is necessary to learn to analyze such expressions when the argument of the Bessel function is not small and, consequently, it is impossible to restrain the infinite series in N (N is an integer) to the first few terms. In this work we shall consider the multiphoton ionization by an electron bound in hydrogen in a powerful laser field as in early works by using a similar approach to the one used by Seely and Harris for the probability transition of the electron in the study of multiphoton inverse Bremsstrahlung in plasmas. We find that in the regime of intense laser fields the cross section decreases as E_0^{-3} E_0 being the intense-field amplitude. A physical explanation for this behaviour is provided.

ELECTRON CORRELATION EFFECTS IN MOLECULES: A PARTICULAR CASE.

RONALDO S. BARBIERI

Departamento de Química - UFSCar

DÉBORA COIMBRA, LUIZ EUGÊNIO MACHADO

Departamento de Física - UFSCar

Electron correlation effects in atoms and molecules can be measured by means of electron scattering within the first Born approximation. Such effects can be observed on the elastic, inelastic and total scattering separately. Since the elastic cross section depends on the one-electron density, the correlation effects are very difficult to be measured.

The X-ray incoherent scattering factor, associated to inelastic scattering, is one of the most sensitive quantities to electron correlation in atoms and molecules. It

relates to the electron pair correlation function. Experimental determination of the correlation effects is made by comparison of the measured cross section (or their corresponding factors) to the corresponding theoretical quantities. The magnitude of the correlation depends on the theory level (IAM, HF, CI) employed for calculation of the quantities of interest. We intend to present some results on electron correlation effects on the elastic scattering of acetylene. Other results, from the literature, will be surveyed.

EMISSÃO ANÔMALA DE ELÉTRONS EM COLISÕES BINÁRIAS SIMPLES

FLÁVIA PEREZ SANTOS, GERALDO MONTEIRO SIGAUD

Departamento de Física, PUC-Rio

GUNTER KREBS, MARTIN KUZEL, KARL ONTJES GROENEVELD

Institut für Kernphysik (IKF), J.W. Goethe Universität, Frankfurt/Main

Uma das estruturas que aparece nos espectros de velocidades duplamente diferenciais de elétrons emitidos a 0° em colisões atômicas é o assim-chamado pico de Encontro Binário (BE) originário de colisões elásticas entre o projétil pesado incidente e elétrons do alvo. Uma abordagem simples de tal colisão com um elétron ligado, inicialmente em repouso, mostra que o máximo do pico de BE deve estar localizado em uma energia

$$E_f = 4(m_e/m_p)E_p \cos^2 \Theta_{\text{lab}} - E_{\text{lig}}$$

onde E_f é a energia final do elétron emitido do alvo, m_e e m_p são respectivamente as massas do elétron e do projétil, E_p é a energia do projétil incidente, Θ_{lab} é o ângulo de emissão do elétron no laboratório e E_{lig} é a energia de ligação do elétron ativo do alvo. O pico de BE é mais largo devido ao perfil Compton do elétron do alvo. Resultados recentes mostram que, para sistemas assimétricos a velocidades intermediárias com $Z_p > Z_t$, onde Z_p e Z_t são respectivamente as cargas nucleares do projétil e do alvo, um desvio significativo $\Delta E = E_f - E_{\text{exp}}$, comparado com a energia prevista pela abordagem simples mencionada acima, ocorre para a energia máxima do pico de BE. Apesar das primeiras observações levarem, para a mesma velocidade incidente, a um valor de ΔE aproximadamente constante, independente dos estados de carga do projétil, resultados mais recentes apontam para valores de desvios proporcionais à carga do projétil. Para obter mais informações sobre a dependência deste desvio na energia com o estado de carga do projétil, foram medidos espectros de emissão eletrônica para sistemas onde $Z_p < Z_t$. Os espectros foram obtidos usando-se os aceleradores Van de Graaff de 4MV da PUC-Rio e de 7MV do IKF. Foram utilizados feixes de He, C, O, N, com vários estados de carga, colidindo com alvos gasosos em uma

faixa de energia entre 0,5 e 7 MeV. Os elétrons emitidos foram analisados através de um espectrômetro eletrostático de placas paralelas (PUC-Rio) e de um espectrômetro magnético (IKF).

Aprisionamento de Átomos, Moléculas e Instrumentação (ATO) - 09/06/95

Espectroscopia de alta-resolução para estados excitados usando átomos frios

SÉRGIO RICARDO MUNIZ, LUIS GUSTAVO MARCASSA, D. MILORI, RICARDO HOROWICZ, SÉRGIO CARLOS ZÍLIO, VANDERLEI SALVADOR BAGNATO

Departamento de Física e Ciência dos Materiais Instituto de Física de São Carlos Universidade de São Paulo

O resfriamento e aprisionamento de átomos neutros é uma técnica que tem sido proposta como uma ferramenta poderosa para a espectroscopia de alta resolução. Entretanto, muito pouco tem sido feito nesse sentido. As técnicas convencionais que eliminam o efeito Doppler tem alcançado o seu limite máximo de resolução devido a efeitos como o alargamento por tempo de trânsito e efeito Doppler de segunda ordem. Estas limitações e algumas outras, como os efeitos colisionais, podem ser drasticamente reduzidas se utilizarmos uma amostra de átomos frios aprisionados. Além disso, a armadilha magneto-ótica (MOT) nos permite conseguir tais amostras com grande facilidade, simplificando bastante o processo experimental.

Neste trabalho apresentamos uma medida direta da separação dos níveis hiperfinos do estado $5S_{1/2}$ do átomo de sódio, usando uma amostra de átomos mantidos a uma temperatura da ordem de $300 \mu K$ em uma MOT. A determinação da separação pode ser feita através do decréscimo da fluorescência dos átomos aprisionados ou através da ionização do estado $5S$ por um único fóton. Como resultado, obtivemos $\Delta\nu(5S_{1/2}) = 156.7 \pm 0.9 MHz$ para a separação da estrutura hiperfina. Este valor está dentro dos limites de todas as medidas anteriores, mas com uma precisão muito maior. O desvio padrão de nossos dados foram obtidos através de várias medidas independentes. Comparação com resultados existentes serão apresentados.

Gostariamos de agradecer as proveitosas discussões com F.J. da Paixão, A. Scalabrín e D. Pereira da UNICAMP. Este trabalho possui suporte financeiro da FAPESP, CNPq e FINEP.

COLLISIONAL BROADENING OF SPECTRAL LINES FOR ULTRACOLD ATOMS

GREGORY SURDUTOVICH, RITTA VITLINA,
VANDERLEI BAGNATO
USP

Nowadays for conventional densities of cooled trapped atoms a radiative mechanism of spectral line broadening plays a predominant role. However, the dependence of the collisional broadening from a density presents a potential possibility to observe experimentally its contribution to the linewidth as well. New interesting feature of the cooled atoms collisional broadening is its expected asymmetry. Such asymmetry is connected with small kinetic energy of the colliding particles. The left side of the spectral line corresponds to the attractive interaction of an excited atom with the identical atom in a ground state. This interaction is accompanied by the acceleration of the particles. Thus the kinetic energy of atoms increases and so the negative frequency shift becomes possible. The right side of the spectral line corresponds to the process of the repulsive atomic interaction. Due to the energy conservation law only small blue-shift of the order of this energy may be realized. The intensity of the statistical wing for cooled atoms falls how $\Delta\omega^{-2/3}$, that is more slowly than the inversely proportional square law $\Delta\omega^{-2}$ for the thermal particles.

Garrafa Óptica para Átomos Neutros
PEDRO C. S. SEGUNDO, ENEIDA G. LIMA,
ORLANDO DI LORENZO FILHO, MARTINE
CHEVROLIER, MARCOS ORJÁ
Departamento de Física - UFPB

No processo de interação matéria-radiação os efeitos mecânicos podem tornar-se importantes e de fato, é possível manipular átomos neutros pela força da radiação [1]. Atualmente a obtenção de densidades elevadas de átomos extremamente lentos não apresenta grandes dificuldades, abrindo assim o caminho para diversas aplicações onde um número de átomos frios pode ser confinado em um pequeno volume. Particularmente as Armadilhas Magneto-Ópticas [2] permitem a obtenção, a partir de um vapor térmico em células, de densidades típicas de 10^{13} átomos/cm³. O diâmetro típico dessas armadilhas é da ordem de 1mm. Recentemente [3] foi proposto um sistema para alterar-se a curva de distribuição de velocidades de todo um vapor, privilegiando-se as classes de baixa velocidade. A idéia central desta proposta consiste em associar um mecanismo de dissipação, utilizando a força espontânea de radiação, com a presença de ondas evanescentes nas paredes da célula evitando-se assim a termalização dos átomos mais lentos. Essa técnica permite aumentar a densidade de átomos frios de forma delocalizada em todo o volume de uma célula à temperatura ambiente. Nesse trabalho apresentamos resultados de simulações que consideram, independentemente, a ação de uma radiação de frenagem do tipo melaço óptico e de ondas evanescentes nas

paredes da célula. Duas técnicas numéricas são utilizadas para simular a evolução da distribuição de velocidades dos átomos do vapor. O tratamento da interação dos átomos com a radiação é semiclássico. Discutimos generalizações em duas e três dimensões e condições realistas de realização experimental de uma garrafa para átomos neutros lentos. [1] J. Opt. Soc. Am. B6, 22 (1989) Special Issue on Laser Cooling and Trapping. [2] C. Monroe et al, Phys. Rev. Lett. 65, 1571 (1990). [3] M. Oriá, O. Di Lorenzo & U. de Freitas, XVII Enc. Nac. de Fís. Mat. Cond., Caxambu, MG, 1994.

APRISIONAMENTO ÓPTICO USANDO LUZ LINEARMENTE POLARIZADA

CARLOS WILLIAM DE ARAUJO PASCHOAL, DANIEL
VARELA MAGALHÃES, ILDE GUEDES
Universidade Federal do Ceará

Recentemente Emile e colaboradores⁽¹⁾ observaram uma nova armadilha para átomos neutros. A configuração utilizada constituía-se de três pares de feixes de lasers com polarizações lineares além de um campo magnético quadrupolar. Com este aparato os autores aprisionaram 10^8 átomos de Cs. Em 1994, Hope et al⁽²⁾ mostraram ser possível o aprisionamento dos átomos de Cs mesmo sem a presença do campo magnético. Assim a explicação para o processo de captura não mais baseia-se apenas na força espontânea. Segundo as Refs.[1] e [2] a interpretação deste efeito pode ser dada pelo aparecimento de uma nova força magneto-óptica, observada por Grimm e colaboradores⁽³⁾. Esta força é essencialmente a força de dipolo retificada ou pelo campo magnético ou pela dessintonia dos campos de radiação. Vários artigos, já presentes na literatura, usam diferentes modelos para o átomo interagindo com campos de radiação para tentar entender melhor a força de retificação. Neste trabalho iremos apresentar os resultados preliminares sobre o comportamento espacial da força de dipolo atuando sobre um sistema de três níveis tipo δ . Como iremos mostrar, o efeito do bombeamento óptico e dos deslocamentos em frequência induzidos pelos campos da radiação resultam em uma força de dipolo cuja média em relação ao comprimento de onda torna-se não zero. Mostraremos que a magnitude desta força retificada é comparável com a força de dipolo. Todo este estudo visa, após o entendimento desta nova força, a simulação numérica dos resultados obtidos nas Refs.[1] e [2]. [1] O. Emile et al, Europhys. Lett. 20, 687 (1992) [2] A. Hope et al, Europhys. Lett. 28, 8 (1994) [3] R. Grimm et al, J. Phys. II 2, 593 (1992).

UMA ANÁLISE TEÓRICA PARA A ARMADILHA MAGNETO-ÓPTICA COM FEIXES AUXILIARES

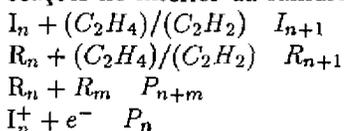
ASCÂNIO DIAS ARAÚJO, ILDE GUEDES
Universidade Federal do Ceará

Uma das áreas que mais se desenvolve no estudo do comportamento de átomos aprisionados em armadilhas magneto-ópticas (AMO), é a da investigação de processos colisionais que limitam o alcance de altas densidades de átomos e em consequência dificultam a observação de efeitos coletivos como a condensação de Bose-Einstein. Usualmente dois tipos de colisões podem ocorrer: (i) colisões entre átomos aprisionados e átomos da distribuição inicial que ocorre a uma taxa γ . (ii) colisões apenas entre átomos aprisionados que devido aos processos de transferência de energia entre si podem ser expelidos da armadilha. A taxa de perda neste caso é $\beta n^2(\vec{r}, t)$, onde β é o coeficiente de perdas por colisões entre átomos frios e $n(\vec{r}, t)$ é a distribuição de átomos confinados. A respectiva equação de taxa que governa o número de átomos pode ser analisada em dois limites. Primeiro, se o número N de átomos for menor que 10^7 as colisões entre átomos aprisionados podem ser negligenciadas e caso o número N seja maior que 10^7 , temos o limite do confinamento de radiação onde a densidade $n(\vec{r}, t)$ passa a ser constante e igual a n_c . Assim, como um primeiro estudo a se efetuar está em como aumentar o número N . Como conhecido na literatura o número estacionário N é proporcional a área de captura dos átomos dada pela cintura dos feixes de aprisionamento e a velocidade de captura dos átomos. Neste trabalho mostramos como aumentar o número de átomos aprisionados em função da variação da área de captura e do aumento da velocidade de captura devido a inclusão de feixes auxiliares na configuração usual de AMO.

Estudo do Envelhecimento de Câmaras Proporcionalistas Multifilares

DANILO DE PAIVA ALMEIDA, IVO MATTOS SOARES,
EDUARDO THAOCELITO
Universidade Federal Do Rio De Janeiro

O termo envelhecimento (aging) será aplicado para descrever todo processo em que resultar na degradação do sinal para o qual o detector foi construído. Estes efeitos são provenientes da degradação do anodo ou catodo que ocorrem frequentemente na forma de depósitos orgânicos sólidos, devido a formação de polímeros. Uma investigação experimental do uso de etano (C_2H_6) como gás quenched e do processo de polimerização deste gás são realizadas com uso de uma câmara multifilar. O gás no interior da câmara é bombardeado por um feixe de elétrons emitidos por um filamento de tungstênio aquecido. O produto das reações são analisadas por um espectrômetro de massa do tipo tempo de voo. As reações no interior da câmara são descritas por:



Pretende-se deste modo investigar qual o canal de

reação que mais contribui para a formação do polímero.

Formação de positronium em nitrogênio líquido em função de um campo elétrico

IURI PEPE

Instituto de Física - UFBA

DEREK PAUL, JULES DEUTSCH, RENÉ PRIEELS
*Institut de Physique - Université Catholique de Louvain -
Bélgica*

A intensidade da componente positronium, assim como seu tempo de vida Auto foram medidos em nitrogênio líquido em função de um campo elétrico estático. Enquanto o tempo de vida permanece constante em torno de 12.5ns, a fração de positronium formada, que a campo nulo é de 20 %, diminui de forma monotônica até um valor assintótico próximo de 6% a um campo elétrico de 32kV/cm. Tal diminuição não é quase exponencial com uma taxa de decaimento de 20kV/cm. Estes resultados indicam que o mecanismo de formação de positronium neste líquido é do tipo "SPUR", como proposto por Mogensen.

Parâmetros para um dispositivo de inserção de alto brilho para o LNLS

ALEXANDRE NAVES DE BRITO, ARNALDO NAVES DE BRITO
Departamento de Física, Universidade de Brasília

A contar com o atual ritmo de construção, desenvolvimento e obtenção de verbas dos financiadores, espera-se que o Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS) comece sua fase de testes no final de 1996. Destas análises e expectativas surge a necessidade de adiantar os estudos e projetos dos dispositivos de inserção. Nosso interesse é a construção de um ondulator plano que possibilite a produção de um feixe de radiação com alto brilho e intensidade. Esta é uma condição indispensável para que o LNLS esteja no mesmo patamar de laboratórios de última geração colocados em operação recentemente. Este dispositivo de inserção é constituído de dois conjuntos paralelos de pólos magnéticos contíguamente distribuídos em linha. A guia com feixe de elétrons é colocada entre os conjuntos. Para um ondulator há um grande número de parâmetros e configurações. Dentre os parâmetros temos, abertura entre os dois conjuntos (gap), campos produzidos pelos magnetos permanentes dos pólos, período do ondulator (λ_0), número de pólos (N), comprimento total do ondulator (L), material utilizado na produção dos magnetos permanentes dos pólos e energia do feixe de elétrons. Obtemos com um ajuste adequado destes parâmetros o brilho e o flux para uma energia dos fótons desejada. Apresentaremos o resultado de simulações computacionais com vários parâmetros relacionados com o LNLS. As energias dos fótons estão entre 50eV e 1500eV. Os espectros do ondulator a serem apresentados em simulan

as curvas obtidas para o espectro do Wiglers e Dipólos.

Hot Topics II (ATO) - 09/06/95

First Observation on the Photon Energy Dependence of Partial Auger Transition Rates in Xe

H. AKSELA, O. -P. SAIRANEN, A. KIVIMÄKI, J. JAUHAINEN, S. AKSELA

Oulu Univ. - Finland and Finnish Synchrotron Radiation Facility at Max-Lab

A. NAVES DE BRITO

Brasília University and Finnish Synchrotron Radiation Facility at Max-Lab

A. AUSMEES, S. J. OSBORNE, S. SVENSSON
Uppsala Univ. - Sweden

The Auger effect is usually treated as a two-step process with separates the photoionization and the subsequent nonradiative decay process. Within the two step formulation, the number of emitted Auger electrons is proportional to the result of multiplying the Auger component decay rate by the population of the intermediate state. The formulation excludes the possibility that the intensity ratios of the Auger transitions originating from the same initial state could vary as a function of exciting photon energy. In the present work we are going to show that certain relative Auger transitions rates depend significantly on the exciting photon energy. The intensity ratios are found to vary as much as 30% in both the $4d_{3/2}$ and $4d_{5/2}$ Auger groups when the photon energy is scanned above the $4d$ ionization threshold. The finding emphasizes the need to extend the treatment of the Auger transition rates beyond the two-step formulation.

ESPECTROSCOPIA DE EMISSÃO NO ULTRA-VIOLETA DE VÁCUO COM O RUBÍDIO

JOÃO VICTOR BOECHAT GOMIDE, FERNANDO R. TAMARIZ LUNA, ANTONIO GOMES TRIGUEIROS

Instituto de Física "Gleb Wataghin", Unicamp

GILDO DE HOLANDA CAVALCANTI

Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense

Este é o trabalho inicial do projeto de espectroscopia de emissão no ultra-violeta de vácuo com vapores metálicos altamente ionizados do Laboratório de Física Atômica do Grupo de Plasmas do IFGW. O interesse deste projeto está em fornecer espectros desses íons, com a respectiva análise dos diversos termos espectroscópicos, essenciais para a astrofísica, metalurgia, diagnóstico de plasmas e ciência dos materiais. Para o rubídio, por exemplo, existem pouquíssimos dados na

literatura.

O rubídio é introduzido como vapor em um theta-pinch através de uma fonte atômica. Usamos o hélio como gás tampão. Utilizamos uma fonte de alta tensão e um banco de capacitores, acoplados a uma chave spark-gap, para produzir os átomos altamente ionizados. A luz emitida é coletada pelo espectrógrafo de incidência normal, com 2 m de distância focal. Chega-se a uma pressão final da ordem de 10^{-6} Torr. Trabalhamos entre 300 e 2100 Å. A radiação é detectada, após passar por uma rede de difração, em placas fotográficas especiais.

Os dados obtidos, depois de determinados os comprimentos de onda com um microdensitômetro e o software "peak-finder", são analisados utilizando programas que extrapolam os números de onda através da sequência isoeletrônica e o código desenvolvido pelo Prof. R. Cowan, de Los Alamos. Estamos obtendo placas com o Rb em diversos graus de ionização e deveremos, para cada um desses íons, calcular a energia média 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.

Apoio financeiro: Fapesp, CNPq, Finep, Faep/Unicamp.

MEDICIONES ANELASTICAS A 1HZ DE LA TRANSICION DE PEIERLS EN $(TaSe_4)_2I$

H. SALVA, A. GUILARDUCCI

Centro Atômico Bariloche e Instituto Balseiro Comisión Nacional de Energía Atómica y Universidad Nacional de Cuyo S.C. Bariloche

F. LEVY

Ecole Polytechnique Lausanne, IPA CHH-1015 Lausanne, Suíza

P. MONCEAU

Centre des Recherches sur les Tres Basses Temperatures CNRS 38000 Grenoble Francia

El compuesto $(TaSe_4)_2I$ posee características unidimensionales y presenta una transición tipo Peierls a una temperatura $T_p = 260K$ o menor dependiendo del grado de pureza.

En un péndulo invertido forzado se realizan las mediciones de módulo elástico de corte y de fricción interna en un cristal de $1 \times 1,5 \times 10mm^3$ de este material orientado con las cadenas en el sentido del eje de torsión.

Mediante ciclados térmicos alrededor de T_p a $0.1K/min$ se estudia la reversibilidad de los efectos anelásticos, así como su dependencia con la amplitud de deformación ($2,7 \times 10^{-5} - 1,6 \times 10^{-4}$) y la frecuencia de medida (0,1 y 1Hz).

En la transición de Peierls (T_p aprox. $240K$) se detecta un pico de fricción interna asimétrico coincidente con un agudo ablandamiento del módulo elástico (12 - 17%).

Se determinan los exponentes críticos del módulo de corte para $T > T_p$ y $T < T_p$ en sucesivos calentamientos y enfriamientos de la muestra. Para $T > T_p$ se obtienen valores repetitivos de $\alpha_> = -0,3 \pm 0,02$. Para $T < T_p$ los valores de α son muy dispersos con promedio de $\alpha_< = -0,4 \pm 0,1$. La asimetría del módulo de corte en la transición es diferente a la del módulo de Young a $7kHz$ reportada en (1).

Se discuten los resultados en base a los modelos propuestos por Y. Nakane (2) y J. Aronovitz et al. (3).

(1) A. Suzuki et al. J.Phys.Soc.Japan, vol 57(12), 4322-4333(1988).

(2) Y. Nakane J. Phys.Soc.Japan, vol 55(7), 2235-2246 (1986).

(3) J.A. Aronovitz et al. Phys.Rev.Lett, vol 64(23), 2799 (1990).

Painéis III (ATO) - 09/06/95

Análise dos Estados Eletrônicos $X^1\Sigma_g^+$ e $(1)^1\Pi_g$ da Molécula de Na_2 na Região de Longo Alcance

GUACIARA MACÊDO DOS SANTOS, CARLOS
EDUARDO FELLOWS, CARLOS A. MASSONE
UFF

As curvas de energia potencial dos estados eletrônicos $X^1\Sigma_g^+$ e $(1)^1\Pi_g$ da molécula de Na_2 foram estudadas por um tratamento funcional com o auxílio da teoria de expansão multipolar, combinada com as funções de amortecimento $f_n(r)$ introduzidas no método devido a expansão $1/r^n$ divergir quando $r \rightarrow 0$. Os dados experimentais utilizados nesta análise são provenientes do artigo apresentado por Barrow et al ^a, obtidos pela técnica de espectroscopia por transformada de Fourier, associada a técnica de fluorescência induzida à laser. Tais dados foram usados em uma redução não-linear para as constantes de van der Waals (C_n), através de uma expansão multipolar do tipo $\sum_n C_n/r^n$. Como a distância internuclear encontrada com estes dados experimentais está fora da região de limite de LeRoy ^b, expressões para a energia de troca foram consideradas no tratamento. Nesta análise recalculamos os valores das constantes de van der Waals (C_n), da energia de troca (A) e (a), e da energia de dissociação (D_e) desses estados eletrônicos com maior precisão.

^aChem. Phys. Lett., 104, 179 (1984)

^bMolecular Spectroscopy, Specialist Periodical Reports (Chemical Society Burlington House, London) Vol.1 p.113 (1973)

NOVA CONFIGURAÇÃO DO ESPECTRÓGRAFO NO ULTRA-VIOLETA DE VÁCUO COM THETA-PINCH

JOÃO VICTOR BOECHAT GOMIDE, FERNANDO R.
TAMARIZ LUNA, ANTONIO GOMES TRIGUEIROS
Instituto de Física "Gleb Wataghin", Unicamp
GILDO DE HOLANDA CAVALCANTI
Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense

O Laboratório de Física Atômica do Grupo de Plasmas do IFGW já possui uma tradição em espectroscopia de emissão no ultra-violeta de vácuo com gases nobres altamente ionizados. Relatamos neste trabalho as modificações que estão sendo introduzidas no aparato experimental para aumentar a resolução dos espectros de gases nobres e iniciar experimentos com vapores metálicos.

Na configuração experimental, o gás de interesse é introduzido em um tubo de quartzo, no qual é feito um theta-pinch. Ele é composto essencialmente de uma fonte de alta tensão (60 kV e 100 mA) e de um banco de capacitores (capacitância total = 7,8 μ F), acoplados a uma chave spark-gap. Este sistema é conectado a uma placa de alumínio em torno do tubo de quartzo, que produz a descarga do tipo "pinch". O tubo é conectado a um espectrógrafo de incidência normal, com dois metros de distância focal, trabalhando entre 300 e 2100 Å. O vácuo no espectrógrafo era feito por uma bomba difusora e, atualmente, por uma turbomolecular. Isto melhorou o vácuo final e a limpeza do sistema. Com outras modificações dos componentes do sistema, a pressão ficou menor que 10^{-6} Torr.

Foi instalado um crow-bar para controlar a descarga. Ele permite cortar parte do ciclo do pulso de corrente, selecionando o grau de ionização do átomo em estudo. Sem o crow-bar, os espectros continham linhas de emissão de diversos graus de ionização, o que dificultava a análise dos dados.

Estamos substituindo a rede de difração de 1080 linhas/mm, com intervalo espectral de 300 a 2100 Å, por uma rede com 2400 linhas/mm e intervalo espectral de 300 a 1100 Å. Apesar de reduzirmos o intervalo espectral, a nova rede permitirá uma resolução maior numa região de grande interesse espectroscópico.

Apoio financeiro: Fapesp, CNPq, Finep, Faep/Unicamp.

Current Status of a New Multicoincidence Time of Flight Spectrometer

M. A. A. DE MORAIS, R. R. T. MARINHO, A.
OLIVEIRA, J. BARTOLOMEU, A. NAVES DE BRITO
Department of Physics, Brasilia University

A new time of flight spectrometer (TOF) under developed and construction in Brasilia university will be presented. This new TOF is intended to perform sophisticated multicoincidence measurements of the type PEPIICO (Photoelectron Photo Ion Photo Ion Coincidence). Calculations to determine a suitable geometry are under progress and will be discussed. This TOF will be able to work initially with gaseous samples but

in a latter stage we also plan to work with solid samples like polymers where the vacuum requirements are not too high as compared with surface science ultra high vacuum requirements. The programmed excitation source will be synchrotron radiation but testing will be done using a pulsed electron gun. One phenomena we want to address with this spectrometer is the study of the formation of multicharged ions upon core excitation or core ionization. PEPICO experiments have the advantage to permit the measurement of the branching ratio of different ionization channels. Details of reaction dynamics are also an important information that can be obtained in these experiments.

STUDY OF EXPANSION PROCESS IN PHOTOIONIZED PLASMAS

A. O. DE TOLEDO, V. H. BAGGIO SCHEID, A. C. DE OLIVEIRA, A. M. DOS SANTOS

Instituto de Estudos Avançados - Centro Técnico Aeroespacial, 12231-970 São José dos Campos - São Paulo - Brasil

Isotope separation by selective laser photoionization and extraction of the photoplasma from the neutral background is a process of significance for the enrichment of uranium fuel. Beside the difficulties inherent to the selective photoionization, the extraction and collection of the photoplasma shown to be a very complex problem. The extraction and collection of $^{235}\text{U}^+$ are close related to the formation and expansion of the photoplasma. As the involved processes are similar for plasmas of different atomic species, the uranium can be, in a first approach, replaced by other no contaminant elements.

In this work the results concerning the expansion of photoplasmas are presented. The expansion of the plasma roughly depend on the density distribution of the neutral atoms. Thus, it is more convenient to study the expansion in an experiment involving a static gas cell, where the particle density can be accurately calculated from measurements of pressure and temperature. In the present work a static gas cell filled with He, Ar or SF_6 used. The plasma was produced by a pulsed excimer laser ($\lambda = 309\text{nm}$, $E_L \sim 15\text{ mJ}$, $\tau \sim 10\text{ns}$), focused by a quartz lens in the middle of the cell. Two plane copper electrodes, separated by a fixed distance of 1 cm, were used to monitor the plasma expansion. They were placed in the center of the cell around the laser beam axis. During the collection the electrodes were biased with a voltage always below the ionization potential of the gas to avoid field induced ionization. The collected current was measured as a function of the filling gas pressure. The current was shown to be correlated with the diffusion

mechanism of the plasma. The results of these measurements will be presented and analyzed.

MEDIDAS DE ALCANCE DE ÍONS PESADOS IMPLANTADOS EM GaAs

MARCIA ROBERTA HERBERTS, M. BEHAR

Instituto de Física - UFRGS

P. F. P. FICHTNER

Departamento de Metalurgia - EE-UFRGS

O conhecimento detalhado do perfil de alcance e/ou de danos de íons implantados são importantes para várias aplicações em opto e micro-eletrônica. Além disso, parâmetros de implantação como o alcance projetado (R_p) e a largura do perfil (ΔR_p), também são relevantes para testar os modelos utilizados na descrição da interação de íons com a matéria (e.g. potencial interatômico e poder de freamento eletrônico). No caso de semicondutores do tipo III-V, medidas recentes de íons leves (A menor que 70) implantados em GaAs, GaP e InP mostram discrepâncias de até 30% em R_p e 50 a 100% em ΔR_p quando comparados com previsões teóricas. Por outro lado, estudos sistemáticos que possibilitam o teste de modelos de interação de íons com a matéria abrangendo íons pesados ainda não foram realizados. Para preencher esta lacuna nós iniciamos uma sistemática de medidas de alcance de Au, Cs, Bi, Hg, Pb, Sb e Sn implantados em GaAs, numa faixa de energia de 20-200 keV. As medidas foram feitas utilizando a técnica de retroespalhamento Rutherford (RBS), e os resultados experimentais comparados com os cálculos de Ziegler-Biersack-Littmark (ZBL). Nossos resultados mostram que existem um bom acordo entre os dados experimentais e teóricos para todos os elementos pesados. Este resultado contrasta com os casos de alvos de Si e Ge, onde se observa discrepâncias significativas em R_p , que tem sido discutidas na literatura como uma característica geral de alvos semicondutores.

MAPEAMENTO DA CONCENTRAÇÃO DO RADICAL CH_2 NA CHAMA DE $\text{C}_2\text{H}_2/\text{ar}$

CHRISTIAN ALEXANDRE VIEIRA, JOAO A. FACIN, MARCO A. F. SCARPARO, ANTONIO FERNANDO PENNA, ERNESTO Y. NAGAI, CARLOS ALBERTO

FERRARI

UNICAMP

ZHOU ZHIYAO

Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics - Chinese Academy of Science

O produto final do mecanismo de formação da fuligem, sendo um hidrocarboneto aromático policíclico (PAH), deixa evidência de que o radical CH_2 [Miller, J.A.;

Kee, R.J. and Westbrook, C. K. *Annu. Rev. Phys. Chem.* 1990.41:345-87] tenha papel importante no processo. Através da técnica da extinção do feixe de LASER [Gülder, Ö., L.; *Combustion and Flame*, 78:179,194 (1989)], sintonizado na linha de excitação do radical CH_2 , obtém-se o perfil de concentração deste radical, que é então comparado com o perfil de extinção de feixe LASER com frequência de radiação não absorvível por qualquer espécie na amostra, a não ser pela fuligem. Desta maneira, estabelece-se uma relação entre o mecanismo de formação de fuligem e o radical considerado. Evidenciando, assim, sua importância no aparecimento do precursor para o início do mecanismo de formação de fuligem até os produtos finais, os hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAH).

PROCESSO DE EXTINÇÃO DE FEIXE LASER (A^{+}) POR CHAMA DE ACETILENO/AR

CHRISTIAN ALEXANDRE VIEIRA, JOAO A. FACIN,
MARCO A. F. SCARPARO, CARLOS ALBERTO
FERRARI
UNICAMP
ZHOU ZHIYAO

Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics - Chinese Academy of Science

O levantamento do perfil da extinção de um feixe LASER (A^{+} p. ex.) não absorvível por qualquer espécie, a não ser pela fuligem, vista como um corpo negro, permite estudar o mecanismo de formação da fuligem a partir de seu precursor até a aglomeração dos particulados. A expressão do coeficiente de absorção espectral para a fuligem na região do visível é dada por: $K_{a,\lambda} \sim (1/\lambda)[1 + 5(2 + m^2/l^2)^2(\pi D/\lambda)^2]$, onde λ , m e D são o comprimento de onda da radiação, índice de refração complexo e diâmetro da partícula de fuligem, respectivamente; esta expressão contém correções sobre as anteriormente apresentadas para a fórmula de Beer [Grosshandler, W. L. and Vanterlon, J. P.; *Combustion Sci. and Tech.* 1985, vol. 44, pp. 125-141]. O coeficiente de absorção pode ser medido pelo coeficiente de extinção, pois é desprezível o de espalhamento, no limite de Rayleigh de pequenas partículas na teoria de Mie [Van der Hulst, H. C.; *Light Scattering by Small Particles* - Dover Publications, Inc., N. Y.]. Com base em resultados experimentais, vê-se que a determinada altura do feixe LASER acima do queimador, faz-se necessário considerar a coalescência de partículas no processo de extinção.

Preparação de Onda Evanescente Amplificada para Espectroscopia

SÉRGIO RICARDO MUNIZ, JULIO FLEMMING NETO,
ROBIN KAISER, VANDERLEI SALVADOR BAGNATO
Departamento de Física e Ciência dos Materiais Instituto

de Física de São Carlos Universidade de São Paulo

Recentemente as ondas evanescentes tem sido apontada como um importante instrumento para a ótica atômica. A idéia neste caso é a utiliza-las como uma espécie de espelho eletromagnético para átomos neutros. Isso se faz possível pelo grande gradiente de campo gerado por esse tipo de onda.

Um átomo que se movimenta nessa região sofre ação de uma força (força de gradiente de dipolo) capaz de reverter o sentido de sua componente de velocidade na direção do gradiente de campo. De modo que tal átomo sofre uma reflexão especular na região onde existe as ondas evanescentes.

Aliando-se essa técnica aos atuais métodos de resfriamento e aprisionamento de átomos, temos aberta uma interessante perspectiva para a física atômica, que é a construção de cavidades atômicas.

Uma maneira extremamente simples de se conseguir as ondas evanescente é através da reflexão total interna numa interface dielétrico-vácuo. Entretanto, para razoáveis intensidades de radiação incidente e para típicos valores das constantes atômicas consegue-se apenas refletir átomos com velocidades menores que 50 cm/s. Assim, a utilização dessa técnica para espectroscopia atômica exige que sejamos capazes de aumentar a intensidade das ondas evanescentes por várias ordens de grandeza.

Neste trabalho apresentamos um método simples e bastante eficiente de se conseguir a amplificação dessas ondas, através de uma estrutura de filmes dielétricos muito finos depositados sobre a face de um prisma. Os resultados obtidos mostram que é possível conseguir altos fatores de amplificação através dessa técnica. Além disso os resultados concordam muito bem com as previsões teóricas, o que é muito animador, uma vez que teoricamente é possível conseguir amplificações ainda maiores. Neste trabalho mostramos ainda a ocorrência de biestabilidade térmica quando filmes dopados são depositados sobre o prisma.

Este trabalho possui suporte financeiro da FAPES e CNPq.

ELECTRONIC STRUCTURE CALCULATIONS OF COMMON IDEAL AND DISTORTED OCTAHEDRAL CLUSTERS OCCURING IN SILICATE MINERALS.

JOICE TERRA
CBPF
DENIS RANCOURT
University of Ottawa

Layer silicates exhibit many non-destructive reactions such as oxidation, dehydroxylation, intercalation and ion-exchange, that are of fundamental importance in clay and soil science, in environmental and economic

geology, and in petrology, sedimentology, etc.... Recently, these reactions have also been demonstrated to lead to new tailored materials with important applications as micro-sieves, selective ion traps, selective catalysis supports, which are widely used in petroleum refining, in the chemical and petrochemical industries and in decontamination of the environment after accidental releases of nuclear materials (Komarneni et al., Science 239 (1988) 1286; Nature 57 (1992) 572; Nature 351 (1991) 555). In the present work, we have calculated the electronic structure of common ideal and distorted octahedral clusters occurring in these systems: FeO_6 , $FeO_4(OH)_2$ cis, $FeO_4(OH)_2$ trans, FeO_5F , $FeO_4(OH)F$, FeO_4F_2 cis and FeO_4F_2 trans. They are investigated in terms of Mössbauer parameters: Isomer shift, quadrupole splitting and hyperfine magnetic field.

**CÁLCULO DE FREQUÊNCIAS DE
MOLÉCULAS DO TIPO Ph_2X ($X = S, Se$)
COM O EMPREGO DO MÉTODO
COMPUTACIONAL MM-2.**

KUMIKO KOIBUCHI SAKANE, DARWIN BASSI
Universidade do Vale do Paraíba (UNIVAP)
YOSHIYUKI HASE
UNICAMP

O modelamento de moléculas do tipo Ph_2X ($X = S, Se$) com substituintes NO_2 na posição para, pertencentes à simetria C_2 foi realizado com o emprego do método computacional MM-2 modificado. 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. O campo de força utilizado foi o de valência e as constantes de força iniciais foram obtidas do nitrobenzeno e de compostos semelhantes, com a mesma configuração. O modelo foi montado a partir das coordenadas cartesianas, previamente calculadas, seguindo-se as coordenadas internas e de simetria e a introdução do campo de força selecionado. O método utilizado para o cálculo de frequências foi o da matriz GF de Wilson. Foram comparadas as frequências calculadas com as experimentais, previamente obtidas, refinando-se os valores das constantes de força na parte final do programa NCA. As frequências dos espectros infravermelho na região de $4000 - 400 \text{ cm}^{-1}$ e de Raman na região de $400 - 20 \text{ cm}^{-1}$ foram usadas para o ajuste das constantes de força. O objetivo do modelamento é a sua utilização na discussão do polimorfismo com vistas à obtenção de maiores informações sobre esse fenômeno.

**ESPECTROS VIBRACIONAIS DAS
FORMAS α e β DA BENZOFENONA
DEUTERADA**

FLÁVIO AMARAL GURGEL KISS, DARWIN BASSI

Universidade do Vale do Paraíba - UNIVAP

A benzofenona é uma molécula orgânica polimórfica, constituída por dois anéis benzênicos ligados por uma carbonila, representada pela fórmula $(C_6H_5)_2CO$. Em trabalho anterior deste grupo foi reportada a obtenção da forma β (metaestável) do produto e os espectros no infravermelho das formas α e β . Na presente comunicação relatamos a síntese da benzofenona deuterada, $(C_6D_5)_2CO$, e a indução da forma metaestável β . São comparados os espectros no infravermelho dos sólidos na região de $4000 - 400 \text{ cm}^{-1}$, das formas α e β da benzofenona deuterada com os correspondentes da não deuterada. Mostra-se que na transição da forma α para a β e vice-versa, as bandas mais afetadas são as que representam vibrações dos átomos de H (ou D) fora do plano dos anéis benzênicos e deformação do esqueleto dos anéis. O fato justifica a interpretação de que as diferenças entre as duas formas polimórficas reside no tipo de empacotamento das moléculas na forma cristalina.

**ESTUDO EXPERIMENTAL DE UMA
DESCARGA ELÉTRICA LUMINESCENTE
EM MISTURAS $N_2 - O_2$.**

JACIMAR NAHORNY
UFSC

DANIEL PAGNON, MICHEL TOUZEAU
Univ. Paris-Sud, Orsay - France

Descargas elétricas em misturas $N_2 - O_2$ apresenta um grande interesse devido ao grande numero de aplicações em que são envolvidas, como por exemplo os processos de tratamento de superfícies, na compreensão dos fenômenos de oxidação da estrutura externa de veículos espaciais, assim como em vários processos físico-químicos ligados à atmosfera terrestre.

Desenvolvemos um estudo experimental utilizando várias técnicas de medidas para caracterizar os principais parâmetros de funcionamento de uma descarga elétrica d.c., bem como para determinar a concentração de várias espécies ativas formadas no meio. Foram medidos: Campo elétrico (\vec{E}), densidade eletrônica (n_e), temperatura do gás (T_g), temperatura vibracional (T_v), concentrações de átomos de nitrogênio e oxigênio e de monóxido de nitrogênio (NO) para várias condições de misturas, pressão, fluxo e corrente.

Para gerar a descarga elétrica, utilizamos um tubo de pyrex de 16 mm de diâmetro interno e dois eletrodos em ferro. Duas sondas eletrostáticas implantadas na região da coluna positiva, foram utilizadas para medir o campo \vec{E} de manutenção da descarga. A densidade eletrônica (n_e) é medida por meio da técnica do deslocamento da frequência de ressonância de uma cavidade. As temperaturas T_g e T_v são determinadas a partir da espectroscopia de emissão de bandas ro-vibracionais do estado eletrônico excitado $N_2(C)$. A concentração dos átomos de oxigênio e de azoto é determinada por actinometria e fluorescência induzida por "laser" respectivamente.

O conjunto de resultados assim obtido é interpretado à partir de um modelo cinético uni-dimensional que inclui a solução da equação de Boltzmann para os elétrons acoplados a cinética das partículas pesadas presentes na coluna positiva da descarga. Este modelo fornece um bom acordo entre os resultados experimentais e teóricos.

Concluimos também que o campo elétrico de manutenção da descarga é controlado, no caso de fracas concentrações de O_2 , pelo processo de ionização associativa envolvendo moléculas de nitrogênio em estados eletrônicos metaestáveis.

BIOFÍSICA

Biofísica Molecular I (BIO) – 07/06/95

RECONSTITUIÇÃO DE FILMES LIPÍDICOS EM SUPORTES LÍQUIDOS E SÓLIDOS: BIOSENSORES

GILBERTO WEISSMÜLLER

Technische Universität München - Physik Department - Biophysik E22, Instituto de Biofísica - UFRJ

A bicamada lipídica se constitui no principal elemento estrutural da membrana biológica, na qual se inserem unidades proteicas funcionais, tais como canais e receptores, reponsáveis pela comunicação e sinalização celular. A reconstituição de filmes lipídicos e a incorporação seletiva de algumas unidades funcionais tem permitido a elucidação de várias propriedades físicas e físico-químicas correlacionadas com suas funções biológicas. O modelo mais simples de reconstituição do filme lipídico é a deposição de uma monocamada na superfície de uma solução aquosa. Nesta configuração pode-se estudar as interações moleculares através de medidas da pressão lateral, ou ainda, com a utilização de marcadores fluorescentes, a formação de domínios moleculares. A transferência sucessiva destas monocamadas sobre um suporte sólido, devidamente tratado, pode levar a formação de bicamadas, que por sua vez podem ser estudadas com outras técnicas. Bicamadas depositadas sobre um suporte metálico permitem medidas elétricas de impedância, podendo-se deduzir a resistividade e a capacitância do filme lipídico, extraindo-se informações sobre a espessura e a interação de outras moléculas com a bicamada [1]. Quando se utiliza como suporte sólido um filme extremamente fino de metal depositado sobre um prisma ótico, pode-se utilizar a técnica de espectroscopia plasmon, na qual uma excitação eletônica é obtida na superfície metálica através de um feixe de laser, a excitação induzida e conseqüentemente a refração do feixe de laser é extremamente dependente da camada lipídica depositada sobre a superfície metálica. A espectroscopia plasmon é capaz de detectar a formação do filme lipídico e sua espessura, assim como modificações causadas pela presença de outras moléculas, permitindo a detecção de moléculas que eventualmente venham a interagir ou se integrar ao filme, mimetizando, por exemplo, o acoplamento entre um ligante e seu receptor [2]. Neste sentido, com a escolha do receptor adequado, esta montagem, incluindo as medidas de impedância, pode funcionar como um biosensor, detectando e transduzindo sinais específicos codificados nas moléculas biológicas.

[1] M.Stelzle and E.Sackmann, Sensitive Detection of Protein Adsorption to Supported Lipid Bilayers by Frequency-dependent Capacity Measurements and Microelectrophoresis, *Biochim.Biophys.Acta* 981, 135-142 (1989)

[2] M.Stelzle, G.Weissmüller and E.Sackmann, On the Application of Supported Bilayers as Receptive Layers for Biosensors with Electrical Detection, *J.Phys.Chem.* 97, 2974-2981 (1993)

TRANSPORTE ATRAVÉS DE MEMBRANAS POR UM MODELO BIOFÍSICO DE DEMÔNIO DE MAXWELL. SIMULAÇÃO NUMÉRICA.

NIELS FONTES LIMA

CEFET-Ba/IFUSP

Estamos desenvolvendo um modelo de transportador genérico (carga elétrica ou espécie química) através de membranas celulares, baseado no Modelo do Acesso Alternado (MAA) (1), o qual funciona como um "demônio de Maxwell", reconhecendo flutuações favoráveis ao transporte no sentido oposto ao espontâneo, e agindo em função desse conhecimento. Em trabalhos apresentados na última edição deste Encontro, (2) discutimos os aspectos Termodinâmicos da operação cíclica do modelo, mostrando que dentro do esquema de Bennet & Landauer (3) seu funcionamento não contraria a segunda lei, já que exige o acoplamento a uma fonte externa de neguentropia, e (4) definimos um circuito RC chaveado análogo ao MAA, cujas propriedades elétricas podem ser modeladas em função das propriedades conhecidas das membranas celulares. O estado da chave é comandado pela posição de um sensor de campo elétrico, o qual interage com a carga no capacitor e está sujeito a um potencial de perfil conveniente cujos mínimos correspondem aos estados da chave. A influência do meio sobre o sensor é tratada de acordo com o método de Langevin, por termos aditivos de ruído e dissipação. A carga no capacitor também é descrita por um

equação de Langevin, acoplada à equação de sensor por termos derivados da energia de interação eletrostática entre a carga no capacitor e a carga do sensor. No presente trabalho resolvemos numericamente essas equações acopladas de Langevin, de forma a obter as propriedades médias do transporte em função dos parâmetros do modelo e sob diversas formas de acoplamento com a fonte exterior de nequentropia. O programa está pronto e testado e já temos resultados sobre o transporte espontâneo, na ausência da fonte externa. Pretendemos apresentar a este Encontro resultados obtidos submetendo-se o sensor a campos elétricos externos variáveis, deterministas ou aleatórios (ruído fora do equilíbrio), como os que se encontra nas membranas celulares.

REF: (1) Lauger, P. *Phys. Rev.* 67, 1296 (1987); (2) Lima, N.F. et al. "Transporte iônico e processamento de informação num Demônio de Maxwell de interesse biológico" XVII ENFMC; (3) Landauer, R. *Sci. Am.* 253, 48 (jul 85); Lima, N.F. "Modelo de Sensor", XVII ENFMC.

A MOLECULAR MECHANISM FOR METABOLIC CYTOCHROME P-450 (LM2)-DRIVEN DENITRATION (MD) OF NITROHETEROCYCLIC DRUGS (NHCD): AN ESR STUDY.

IGOR ANATOLIEVICH DEGTEREV

Institute of Chemical Physics, Russian Acad. Sci., Moscow, RF

MARCEL TABAK

Departamento de Química, IFQSC, USP, Sao Carlos, SP.

NILCE CORREA MEIRELLES

Departamento de Bioquímica, IB, UNICAMP, 13084-100 Campinas, SP.

Metabolic denitration (MD) of NHCD by hepatic tissues consists of the loss of the nitro group from the NHCD molecule thereby releasing NO which forms a nitrosyl complex with heme(iron)-containing proteins (HICP). This mechanism is important since NHCD toxicity arises from the metabolic reduction of the nitro group while the drug's therapeutic activity is attributable to NO which possesses multiple regulatory and immunoeffector functions. ESR spectra of the nitrosyl complexes obtained by incubating NHCD with liver homogenates were treated using soft- and hardware designed by Dr. Iliasova and were observed to superpose with those of the NO-Hb complex ($g=1.987$) and the complex of NO with other HICP (presumably cytochromes) ($g=2.001$). The yield of the complex increased with the length of NHCD incubation with the liver tissues as well as following treatment of the animals with cytochrome P-450 (LM2) inducers. There was a decrease in yield in the presence of metyrapone. The yield was influenced by the NHCD structure such that it was 4.5 greater for 1-nitroacridine drug (nitracrine) than for a 5-nitrofuranyl derivative (quinifuril). MD involves a two-electron nitroreduction specifically catalyzed by the LM2 isozyme of cytochrome P-450. Oxygen inhibits MD by competing with HNCd for the active site of cytochrome. This fact explains the specific toxicity of HNCd for anaerobic cells such as some bacteria and tumor cells. Supported by FAPESP and CNPq.

INCORPORATION OF DIPYRIDAMOLE DERIVATIVES INTO PHOSPHOLIPID LANGMUIR MONOLAYERS.

GALINA BORISSEVITCH, MARCEL TABAK

Instituto de Química de São Carlos, USP

OSVALDO N. OLIVEIRA JR

Instituto de Física de São Carlos, USP

Dipyridamole derivatives (DIPD), differing by the nature (RA25) or the position of the side substituents in the molecule (RA14), form stable Langmuir monolayers on the air-water interface, when mixed with the lipids: dipalmitoylphosphatidyl choline (DPPC) and dipalmitoylphosphatidyl glycerol (DPPG) in chloroform solutions. Their incorporation into the monolayer is confirmed by surface pressure and surface potential measurements. Their location in the monolayer depends both on the nature and the position of the side groups, state of their protonation and the charge of the lipid. Protonated DIPD tend to locate close to the polar layer of the film and even be pulled into it as in the case of the negatively charged DPPG and protonated RA25. Nonprotonated DIPD are less sensitive to the

charge of the lipid polar head and tend to be located farther from the polar layer than protonated ones. The effects of DIP and RA14, having the same side groups in the cross-changed position in the molecule, upon DPPC monolayers in both protonated and nonprotonated states in dependence on their concentrations are of cholesterol-like nature. In small concentrations (up to the relative content of the drug 0.02) they induce expansion of the film while in higher ones the condensation is observed, the effect due to changes in packing density and ordering of the lipid molecules around the drugs. RA25, which has $-NH-CH_3$ side groups in all positions, condenses the monolayers, the effect most pronounced when it is protonated and for negatively charged DPPG. Support: FAPESP, CNPq and FINEP.

Biofísica Molecular II (BIO) - 07/06/95

IS FLUORESCENCE QUENCHING OR EPR BETTER TO STUDY DYNAMICS AND STATISTICS IN MICELLES?

BARNEY L. BALES

Instituto de Física de São Carlos USP

Time-resolved fluorescence quenching (TRFQ) has been used to study dynamics in micelles for many years, while EPR has only recently been employed for this purpose. Both techniques employ an indicator (fluorescent molecule with a long life time for TRFQ - nitroxide free radical for EPR) and both rely upon measuring the effect of added molecules (quenchers or paramagnetic broadeners). Since nitroxide free radicals and some other paramagnetic molecules effectively quench fluorescence, it is relatively easy to design experiments to study essentially the same system using both techniques, substantially increasing the information available. The two techniques are compared within the context of one such system: sodium dodecyl sulfate (SDS) in the concentration range 25 - 200 mM with Cu^{++} as the quencher/broadener. The indicator is pyrene for TRFQ and a hydrophobic nitroxide free radical for EPR. Invoking a small electrostatic repulsion between Cu^{++} ions residing upon the same micelle, improves the agreement between theory and experiment for both experiments. The aggregation numbers increase linearly as the one-fourth power of the SDS concentration with a coefficient of correlation, $r = 0.999$. The fluorescence quenching rates and the spin exchange rates are quantitatively similar leading to the conclusion that the quenching rate is nearly diffusion controlled with a diffusion coefficient near that of Cu^{++} in water. The quenching rate follows an inverse square dependence upon the micelle radius with $r = 0.994$. EPR measurements show that the polarity and the microviscosity of the environment of the indicator vary linearly with micelle size and that the addition of Cu^{++} causes the micelles to grow less than about one molecule. It is concluded that TRFQ and EPR are an excellent complementary pair to study micelles. A point by point discussion of the strengths and weaknesses of the two methods will be presented.

Microscopic Studies of the Magnetic Properties of Magnetotactic Bacteria

RICHARD B. FRANKEL

Department of Physics, California Polytechnic State University, San Luis Obispo, CA 93407 USA

Pulsed magnetic field remanence measurements have been made on individual, formalin-fixed, magnetotactic bacterial cells in suspension. A cell is aligned in a dc field of several gauss, and subjected to 1 ms, magnetic field pulses of variable amplitude up to 600 G, oriented opposite to the direction of the alignment field. By microscopically observing the cell during the pulse, and by observing the response of the cell to reversals of the alignment field following each pulse, it is possible to construct a hysteresis loop and determine the coercive force of the bacterial magnetic dipole. Measurements on three bacterial strains with different magnetosome particle configurations will be discussed. The application of magnetic force microscopy to determine the magnetic dipole moment of a single cell will also be described.

USO DA TÉCNICA DE HISTOGRAMAS NO ESTUDO DE POLIELETRÓLITOS

JORGE CHAHINE

IBILCE - UNESP - São José do Rio Preto

Recentemente¹, Rickman e Phillpot introduziram um método, baseado numa expansão em série, para investigar propriedades termodinâmicas de sólidos clássicos. Demonstram que a simulação do sistema numa única temperatura, permite a obtenção dos valores de energia livre e entalpia, numa larga região de temperaturas. Argumentam que o método é adequado em regiões distantes das transições de fase e que deve ser visto como complementar à técnica de histogramas², apropriada para o estudo de transições de fase. Num trabalho recente³ empregamos a técnica de Rickman e Phillpot para investigar propriedades conformacionais de polieletrólitos. A cadeia polieletrólítica é construída usando um self-avoiding walk de $N-1$ passos, onde N é o número de monômeros dispostos nos sítios de uma rede cúbica que interagem via potencial de Coulomb. Naquele trabalho mostramos que o método ainda é útil para estudar transições conformacionais induzidas por temperatura. A presente comunicação retoma o estudo dessas transições, agora utilizando a técnica de histogramas. O objetivo é comparar a eficiência das duas técnicas na região em que a temperatura induz mudança conformacional.

(1) J. M. Rickman and S. R. Phillpot; *Phys. Rev. Lett.* 66, 349 (1991)

(2) A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen; *Phys. Rev. Lett.* 61, 2635 (1988)

(3) J. Chahine, M. A. Guimarães and F. R. Cavichioli; *J. Phys. Chem.* 98, 9845 (1994)

Física Médica e Biologia (BIO) - 07/06/95

Biossorção de ferro em folhas do cerrado

REGINA PINTO DE CARVALHO, OTAVIO EDUARDO PRADO
UFMG

Nosso estudo tem como objetivo estabelecer a utilidade da biossorção na construção de filtros para águas industriais e na recuperação de metais a partir de rejeitos. Estudou-se a sorção de Fe em biomassa constituída de folhas secas de chá (*Thea sinensis*) e de algumas plantas nativas do cerrado mineiro. A análise por fluorescência de raios-X das plantas colhidas na região de Belo Horizonte mostrou que há acumulação de Fe na planta viva. É estudada a desorção desse metal e o comportamento sortivo da folha seca (isotermas de sorção). Medidas de espectroscopia por ressonância paramagnética eletrônica (EPR) tentam esclarecer a forma de ligação do íon metálico à parede celular da biomassa.

Sistema de Aquisição e Digitalização de Imagens

DARCI MOTTA ESQUIVEL, MARCELO PORTES DE ALBUQUERQUE, ANNA PAULA GARCIA ROCHA, SILVIA MARA DA COSTA CAMPOS
CBPF/RJ - CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

Este projeto tem como objetivo a aquisição de imagens, em tempo real, da trajetória de microorganismos magnetotáticos, que será digitalizada e analisada através de um software desenvolvido especialmente para esta

aplicação. A imagem, neste caso específico, mostra o movimento de bactérias magnetotáticas que contêm em seu interior cadeia de cristais de magnetita, material magnético que faz com que sejam orientados pelo campo magnético terrestre. No laboratório este comportamento é estudado pela aplicação de um campo magnético obtido pela construção de bobinas Helmholtz ao redor do microscópio, permitindo o controle da intensidade e direção deste campo. Uma câmera de alta resolução filma a imagem obtida através de um microscópio óptico, fornecendo um sinal NTSC à placa de aquisição instalada no computador. A placa de aquisição digitaliza e processa imagens em tempo real para o armazenamento em memória da trajetória das bactérias em estudo. campo magnético é controlado por uma interface composta por um conversor digital-analógico e uma saída digital de 8 bits. O conversor é utilizado para programar uma fonte de corrente que alimenta a bobina de Helmholtz e a saída digital permite definir o sentido do campo através do circuito de chaveamento de relés. O software, desenvolvido em linguagem C, é responsável pelo controle do sistema de medida, i.e. a aquisição e o processamento de imagens; o controle do campo magnético e cálculos afim de fornecer parâmetros relativos ao movimento.

Estudio del Coeficiente de Atenuación en Similes de Tejidos Biológicos (Geles)

H. KORENKO, S. CUITINHO
Instituto de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de la República Montevideo, Uruguay

En este trabajo se realiza un estudio de la medición del coeficiente de atenuación en geles con concentra-

cion de polvo de grafito, los cuales modelan tejidos biológicos. Para este fin, previamente se ajustaron métodos de medición de la atenuación mediante técnicas de ecografía y transmisión en una placa de metacrilato de metilo, obteniéndose el coeficiente de atenuación global mediante la resta de espectros. Para los geles, además del método anterior, se utilizan el ajuste de la envolvente de la señal ecográfica mediante una curva exponencial y el método del corrimiento del centroide espectral.

NORMALIZANDO UM MODELO DE OSCILADORES CARDÍACOS

ANTÔNIO CARLOS DA SILVA FILHO
USP

O uso de modelos em biologia ainda é um procedimento relativamente raro. Mostramos anteriormente, usando um modelo encontrado por Leon Glass e outros para prever os efeitos de um conjunto de estímulos periódicos sobre agregados de células de corações de embriões de galinha que disparam espontaneamente, que é possível regularizar o comportamento de alguns destes agregados. O que fazemos, neste trabalho, é exibir um método com o qual podemos não só regularizar como, também, normalizar o comportamento resultante para alguns destes agregados. O método proposto baseia-se na aplicação de séries periódicas de estímulos adequadamente escolhidas.

ESTUDO DO TRÂNSITO ESOFAGIANO ATRAVÉS DOS MÉTODOS CINTILOGRÁFICO E BIOMAGNÉTICO (UTILIZANDO UM GRADIÔMETRO AC) .

NASSER ALI DAGHASTANLI
FFCLRP - DGFM - FAMB - USP
FRANCISCO JOSÉ HOSSRI NOGUEIRA BRAGA
HCRP - FMRP

O método biomagnético baseia-se na medição da variação do fluxo magnético, medida através de um Gradiômetro de 1ª ordem AC (constituído de dois pares de bobinas astáticas) associado a um Lock - In, produzida pela variação da quantidade de material ferromagnético. Este material ferromagnético é colocado na forma de um alimento-teste feito de uma quantidade adequada (aproximadamente 5g) de pó de ferrita de magnésio ($MgFeO_4$), de diâmetro menor que $200\mu m$, uniformemente misturada a uma pequena quantidade de iogurte (aproximadamente 10 ml) e que é ingerida pelo paciente. O objetivo deste trabalho é estudar a passagem do alimento - teste através do esôfago (Tempo de Trânsito) fazendo uma comparação com o Método Cintilográfico, onde o alimento-teste é marcado com uma pequena atividade (aproximadamente 185 MBq) de um Radioisótopo (^{99m}Tc).

Este método Cintilográfico já vem sendo utilizado para estudos dinâmicos esofágicos regularmente.

SINAIS CARDÍACOS: REVERSÃO DE TAQUICARDIA E BRADICARDIA. ESTUDOS FISIOLÓGICOS .

CARLOS EDUARDO FORMIGONI, CARLOS ALBERTO PELÁ
FFCLRP - CIDRA - USP - RIBEIRÃO PRETO-SP
ANTONIO VITOR DE MORAES JUNIOR
FACULDADE DE MEDICINA DA USP RIBEIRÃO PRETO-SP

O estudo pormenorizado do sinal cardíaco, sua funcionalidade e fenômenos biológicos associados tem grande utilização nos testes fisiológicos realizados em pacientes com implante de marca-passo bem como fornece parâmetros para desenvolvimento de instrumentação que associada a dispositivos comerciais ou não possibilitem a reverção de quadros de taquicardia e bradicardia. Testes efetuados em pacientes com sistemas de excitação comerciais onde os eletrodos são posicionados no esôfago - estimulação trans-esofágica - mostraram que devido a baixa resistência oferecida pelo tecido da parede do esôfago e outras estruturas até o músculo cardíaco é necessário um baixo potencial para excitação ventricular, da ordem de 35 volts porém o pulso de excitação não é "sincronizado" com o vetor cardíaco, o que aumenta o risco de excitar o ventrículo durante a despolarização causando a fibrilação. Assim o desenvolvimento de um software de FFT com características definidas para esse tipo de aplicação associado a uma eletrônica de digitalização propicia boas condições experimentais para o estudo fisiológico das funções cardíacas visto que o processamento das componentes de frequência definidas durante a despolarização ventricular, níveis de tensão, relação sinal / ruído são processados e podem acionar dispositivos de excitação trans-esofágicos ou não invasivos sem risco de fibrilação e com baixo nível de desconforto ao paciente .

ANÁLISE DA REDUÇÃO DOS EFEITOS BIOLÓGICOS DAS RADIAÇÕES IONIZANTES DEVIDO A CONCENTRAÇÃO DE COMPOSTOS SULFÍDRICOS NO MEIO INTRAMOLECULAR

RICARDO ANTÔNIO DE SIMONE ZANON, ANDRÉ LUÍZ DE OLIVEIRA
Departamento de Física, CCT/FEJ/UEDESC

Um dano biológico gerado pela exposição a radiação ionizante se dá diretamente por dano ao DNA da célula, ou indiretamente pela radiólise das moléculas de água presente nos fluidos corpóreos. Como mais de 90% do corpo humano é composto por água, é razoável dizer

que a maior parte do dano celular se dará pela ionização das moléculas de água presentes no interior das células. Esta ionização provoca o aumento de radicais livres que são tóxicos a célula, provocando um dano celular, ou até mesmo a sua morte. A radiação ionizante não é o único agente produtor de radicais livres no meio celular. Desta forma o próprio organismo produz uma enzima chamada Glutation Peroxidase que neutraliza tais agentes. Para o caso de um dano biológico, onde radicais livres são gerados em grandes quantidades, pretende-se relacionar a concentração de Glutation com a dose de radiação ionizante em função do dano celular, estabelecendo um patamar de radio-resistência. Para tal, a metodologia consiste na comparação de três grupos de células bacterianas (*E. Colli*), onde um dos grupos seria um grupo de controle, e os outros dois seriam irradiados com e sem Glutation, fazendo-se contagens de colônias e, comparando-as com o grupo de controle.

EFEITOS DO ÁLCOOL SOBRE OS NEURÔNIOS: UMA ANÁLISE VIA DIMENSÃO FRACTAL

SIDINEY GERALDO ALVES, MARCELO LOBATO MARTINS

Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa
PAULA ÁVILA FERNANDES, JOSÉ EYMARD HOMEM PITTELLA

Departamento de Anatomia Patológica e Medicina Legal, Universidade Federal de Minas Gerais

A Síndrome de Dependência ao Álcool acomete cerca de 16 milhões de brasileiros (10% da nossa população) gerando malefícios diretos e indiretos cujos custos estão estimados em aproximadamente 5% do PIB nacional. Ensaio conduzidos em ratos apontam os efeitos tóxicos do etanol como responsáveis, diretos ou indiretos, por várias patologias digestivas, neuropsiquiátricas, endocrinológicas e cardiovasculares. Neste trabalho estamos interessados em caracterizar as alterações morfológicas provocadas no cérebro de ratos que ingeriram álcool misturado na água em relação a um grupo de controle não submetido ao etanol. Para isso analisamos, via geometria fractal, amostras de preparados histológicos de neurônios (células de Purkinje) e terminais axônicos-colinérgicos, fotografados e digitalizados com um scanner de mão numa resolução de 200 DPI. As dimensões fractais dos padrões digitalizados foram calculadas pelos tradicionais métodos de *box counting* e da função de correlação, mostrando uma lei de escala fractal sobre pelo menos uma década na escala de comprimentos. Nossos resultados preliminares sugerem que o álcool afeta a dimensão fractal dos neurônios e inervações colinérgicas em determinados níveis do hemisfério cerebral dos animais tratados com etanol e que, portanto, a dimensão fractal pode ser um índice útil para determinar quantitativamente o grau das lesões provocadas no cérebro e sua relação com a quantidade

de álcool consumida.

RADIOPROTECTION BY VENOM OF APIS MELLIFERA BEES

JOSÉ E. RODAS DURAN, JOAQUIM C. S. CARDOSO
FFCLRP- Univ. de São Paulo

"In vitro" experiments were performed to study the effects on the venom compounds structure of Co-60 gamma radiation. Diphrametric, spectrometric and chromatographic analysis of samples were performed. The collected venom was separated into two fractions, one exposed to radiation and other utilized as a standard. For the diphrametric analysis, the venom was deposited on the glass plates which were placed in a dryer for six hours. After drying the samples were packed in samples cases which permitted analysis. The emission spectrum was obtained through analysis of samples dissolved in distilled water. These samples were placed in the electrode cavity. For gas-chromatographic analysis, the samples were dissolved in sodium sulphate and methylene chloride solution. The diffraction spectrum obtained for the standard sample exhibited amorphous compound spectrum characteristics, so that the examination of changes in the irradiated sample was not possible. The emission spectrometry analysis, exhibited indications of irradiated sample ionization, although venom component changes were not verified. The chromatographic analysis permitted the observation of venom's volatile portion behavior face to radiation and it showed that the obtained spectrum didn't exhibit considerable variations in the standard and irradiated samples comparison. This results largely reflect low dosage, and it indicates that the radioprotective action of the venom is owing to any medium's change caused for presence this compound before the irradiation.

EVALUATION OF FUNCTIONAL IMAGES USING MAGNETIC TRACERS.

MURTA L. O, MOREIRA M, O. BAFFA
Departamento de Física, FFCLRP-USP.

The use of magnetic tracers (MT) and magnetic markers (MM) to study the gastrointestinal (GI) function has proved to be an interesting alternative to some of the present methods. The instrumentation in use to detect and measure these markers and tracers along the GI tract has been based on SQUID and fluxgate sensors and on induction coils. SQUID multichannel systems have been used in these measurements showing the advantage of simultaneous measurements in a large area. These measurements would allow the generation of function images based on magnetic field intensity. Since the GI tract has a slow dynamics measurements at different points could also be obtained with a scanning system with one or few sensors. The use of an AC

Biosusceptometer (ACB) was further investigate for the use as detector in a scanning system designed primarily to obtain measurements on the GI tract. Images of planar phantoms made of sprayed ferrite powder in a flat surface is shown before and after the imaging processing based on Wiener filtering technique. There are several aspects still to investigated. The system must be tested in phantoms with different depths to ascertain the effect of this dimension on the quality of imaging. The resolution, signal/noise and base line of the gradiometer detector should also be assessed for different sensors.

Financial support CNPq, FAPESP, CAPES e TWAS

DEVELOPMENT OF A DC-SQUID BASED BIOGRADIOMETER.

E. R. MORAES, L. O. MURTA, O. BAFFA
Departamento de Física, FFCLRP-USP.

J. R. A. MIRANDA
FFCLRP-USP, IFSC-USP e UNESP-Botucatu

The detection of magnetic fields produced by biological systems requires very sensitive detectors. The magnetic fields in the human beings are due to ionic currents, paramagnetic components and ferromagnetic contaminants. These fields can vary from a few nanoTesla for the ferromagnetic contaminants to a few tens of femtoTesla for the field produced by ionic currents. After some experience with a RF-SQUID based biogradiometer we decide to improve the sensitivity of our system by using a DC-SQUID sensor (BTi, San Diego, USA). A new second order gradiometer with a larger area for the detecting coils (2.5 cm diameter) and longer base line (6 cm) is being constructed. At present tests were made with a gradiometer wound in a fiberglass substrate that gave a poor common mode rejection ($CMR \leq 10^{-3}$) and balance power. The substrate has been changed to Macor and a new run of experiments will be performed. This, with other improvements in filtering should produce the expected sensitivity with noise floor of at least $20 \text{ fT}/(\text{Hz})^{1/2}$ in an unshielded environment. DC-SQUIDS are typically an order of magnitude more sensitive than the RF-SQUID and this should improve our capability for the detection of fields produced in the brain, heart, stomach and intestine, in ongoing research projects.

Financial support CNPq, FAPESP, CAPES e TWAS

SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE GERAÇÃO DE IMAGENS EM RADIODIAGNÓSTICO

VÍTOR CHEMELLO, ADELAIDE DE ALMEIDA, JOSÉ ROBERTO DRUGOWICH DE FELÍCIO
DGFM - FFCLRP - USP

O sistema de geração de imagens por raio-x diagnóstico baseia-se em obter inicialmente uma imagem bidimensional de uma região anatômica de um paciente. Esta imagem pode ser obtida tanto pelo método tradicional, utilizando um sistema tela-filme, quanto por métodos mais modernos utilizando um sistema digital de imagens. Para conseguir uma nitidez e um bom contraste, e mesmo melhorar a qualidade da imagem, é necessário que o radiologista conheça o aparelho com o qual esteja trabalhando e os processos básicos de interação da radiação com a matéria. Visando treinar novos profissionais nesse campo é conveniente construir "simuladores" de raios-x, consistindo de fantoms matemáticos com as mesmas propriedades dos tecidos a serem expostos. O programa em desenvolvimento calcula a interação dos componentes do fantom com as diversas energias do feixe de raio-x usando a técnica de Monte Carlo. Deformações, regiões de densidades e coeficientes de atenuação diferentes e outras anomalias, bem como efeitos de contraste e nitidez podem ser exibidos nesse processo de simulação de forma a conseguir um entendimento dos processos básicos da interação da radiação com a matéria. Conseqüentemente, pode-se realizar um treinamento mais eficaz desses profissionais sem utilizar o aparelho de raio-x, o que torna o aprendizado oneroso e demorado. Esse simulador deve contribuir de maneira significativa em programas de controle de qualidade e qualidade total em radiodiagnóstico desenvolvidos nos hospitais do Brasil.

ESTUDO DA FORMAÇÃO DE ESTRUTURAS DISSIPATIVAS EM CÉLULAS DE DIÁLISE

FRANCISCO JOSÉ PEREIRA LOPES
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas
PAULO MASCARELLO BISCH
Instituto de Biofísica Carlos Chagas Filho

As estruturas são obtidas em experimentos de osmo-centrifugação, realizados em células de diálise, que possuem dois compartimentos separados por uma membrana semipermeável. Na presença de um campo centrífugo sugem dois gradientes de densidade. A colocação adicional de uma amostra concentrada de proteína em um dos compartimentos leva à formação das estruturas, que são caracterizadas por estrias horizontais ocupando toda a extensão da célula. Baseados na termodinâmica de não-equilíbrio obtivemos o termo fonte de entropia geral do sistema. Com o intuito de caracterizar o gradiente observado, considerando o equilíbrio mecânico, obtivemos as equações do sistema para o equilíbrio termodinâmico. Atualmente estamos desenvolvendo as equações do sistema para um estado estacionário de não-equilíbrio, com fluxos e forças termodinâmicas não nulos. A partir desta formulação e considerando a pressão osmótica como condição de

contorno, pretendemos obter equações que possam descrever a hidrodinâmica do sistema de uma forma a explicar as estrias, que imaginamos ser resultado de vórtices que se formem durante a centrifugação.

**Avaliação de dose em diferentes órgãos
utilizando dosimetria com eletreto**

NIVALDO CARLOS DA SILVA, ADELAIDE DE ALMEIDA
DGFM - FFCLRP - USP

JOÃO SINÉZIO DE CARVALHO CAMPOS
UNESP - Rio Claro

A radioterapia é uma modalidade de tratamento que faz uso das radiações ionizantes contra tumores malignos. Diversos tipos de detectores tem sido utilizados para auxiliar na calibração das máquinas ou fontes de radiação, aferição do planejamento do paciente, monitoração de área e das pessoas envolvida com esta terapia. Os detectores utilizados são em geral câmaras de ionização, dosímetros termoluminescentes, cristais cintiladores e etc. O eletreto, que consiste de um material que tem a capacidade de reter cargas por um longo período, pode ser utilizado como um dosímetro para a radiação ionizante porque as cargas armazenadas podem ser compensadas diretamente por íons produzidos pela radiação num meio que envolve o eletreto e o número de cargas compensadas é proporcional a quantidade de radiação incidente. Neste trabalho utilizamos o eletreto para uma aplicação na área de radioterapia com vistas a auxiliar a visualização da distribuição da dose em um órgão de interesse contribuindo para a confirmação do planejamento radioterápico e também da dose a ser dada ao órgão em questão. Para tanto, utilizamos um filme plano de eletreto (teflon -FEP) e a após a irradiação, mede-se a distribuição de potencial de superfície do eletreto, relacionando-o com a distribuição de dose no órgão. Apoio financeiro: CAPES

**MODELO EXPERIMENTAL PARA O
ESTUDO DO MECANISMO DA TERAPIA
FOTODINÂMICA EM TUMORES:
RESULTADOS PRELIMINARES COM O
TUMOR DE WALKER.**

V. C. COLUSSI

Bolsista FAPESP - FCM/UNICAMP.

E. M. D. NICOLA

Núcleo de Medicina e Cirurgia Experimental
FCM/UNICAMP.

O. RETTORI

CAISM/UNICAMP.

J. H. NICOLA

Instituto de Física "Gleb Wataghin"/UNICAMP.

Uma questão importante no tratamento do câncer é a seletividade (capacidade da terapia em afetar somente células tumorais). Clinicamente a Terapia Fotodinâmica (PDT) tem-se mostrado bastante eficiente

neste aspecto, além de poder ser administrada alternativamente em conjunto com outras terapias. A PDT consiste basicamente na introdução intravenosa de um sensibilizador, onde este, após algumas horas, é retido preferencialmente nos tecidos tumorais. Nesta "janela de tempo" podemos realizar o diagnóstico a olho nú dos tecidos, e/ou aplicar o tratamento através da excitação do oxigênio presente no meio celular. Fisicamente, a produção de oxigênio excitado (singleto) é possível através da transferência de energia não radiativa do sensibilizador para o oxigênio, devido a uma inversão de spin (Cruzamento Inter-Sistemas). Biologicamente, estes resultados podem ser reproduzidos em tumores experimentais de ratos, possibilitando análise. Nossa proposta é monitorar a eficiência do processo PDT através da fluorescência induzida. Os animais experimentais são ratos Wistar, com idade entre 8-10 semanas. O tumor utilizado é o Tumor de Walker, com inoculação multi-focal dorsal. A excitação das moléculas é feita através de uma lâmpada fluorescente UV ($\lambda=365\text{nm}$ -Sanyo), e o tratamento através de lâmpada de projetor de slide adaptada com um filtro apropriado. A fluorescência induzida foi analisada por um espectrofotômetro (Spex 1704, grade 1200 linhas/mm, Blaze 5000). O Tumor de Walker, se mostrou um excelente modelo experimental, apresentado, nas metastases, um alto Rendimento Quântico Fluorescente. Neste trabalho serão discutidas

propostas de experimentos que viabilizam um melhor entendimento do mecanismo fotodinâmico. Os resultados ainda estão em fase de análise, e serão discutidos detalhadamente no encontro. [APOIO: FAPESP]

**OBSERVAÇÃO A OLHO NÚ DA
FLUORESCÊNCIA ENDÓGENA INDUZIDA
DE UM DERIVADO DE PORFIRINA EM
TECIDO TUMORAL E NORMAL DE RATO.**

V. C. COLUSSI

Bolsista FAPESP - FCM/UNICAMP.

E. M. D. NICOLA

Núcleo de Medicina e Cirurgia Experimental
FCM/UNICAMP.

J. H. NICOLA

Instituto de Física "Gleb Wataghin"/UNICAMP.

A Terapia Fotodinâmica em Tumores consiste na injeção intravenosa, retenção e manipulação do efeito de um sensibilizador no tecido tumoral. Quando o sensibilizador utilizado é um Derivado de Hematoporfirina (DHE), este apresenta uma Fluorescência característica visível a olho nú que pode ser utilizada no Diagnóstico e detecção de tumores, devido a sua seletividade. Trabalho recente do nosso grupo mostrou

que a DHE em Tecido Normal de Rato (ENFMC/94) possui drenagem sistemática e relativamente rápida (< 24 horas). Contudo, o tecido normal pode apresentar Fluorescência Endógena, ou seja, fluorescência de substâncias que compõem o próprio organismo. Visivelmente a Fluorescência é bastante próxima da observada com DHE. Este fato pode induzir a conclusões errôneas sobre o tecido em questão, e confundir o especialista no momento em que este utiliza a Fluorescência como marcador do tecido maligno. Nossa proposta foi quantificar esta Fluorescência característica, afim de evitar, futuramente, diagnósticos duvidosos sobre a natureza do tecido estudado. A excitação dos cromóforos foi feita através de uma lâmpada fluorescente ($\lambda=3657\text{m-Sanyo}$), e foi observada diretamente a olho nú em local escuro. Para o registro utilizou-se uma câmera NIKON, modelo FM2, com objetiva macro 55mm, filme EKTACHROME (ASA 100). A quantificação foi feita através de um arranjo experimental simples e a emissão Fluorescente foi coletada por um espectrofotômetro (Spex 1704, 1200 linhas/mm Blaze 5000). Neste trabalho mostramos que os cromóforos estão presentes no muco intestinal e não no tecido,

como acontece na PDT. A coloração amarela (Icterícia) traduz uma grande quantidade de bilirrubina. Os picos obtidos,

$$\lambda_1 = 637\eta\text{m}$$

e

$$\lambda_2 = 559\eta\text{m},$$

representam a possível degradação da bilirrubina em urobilinogênio, rico em porfirina III, devido a ação de bactérias hemolíticas. Este efeito pode ser eliminado com ingestão de água + glicose. [APOIO: FAPESP]

Workshop: Hemoproteínas e Porphirinas I (BIO) - 08/06/95

HEMEPROTEÍNAS: Do transporte de oxigênio à detoxificação de xenobióticos.

NILCE CORREIA MEIRELLES

Depto. de Bioquímica, Instituto de Biologia - UNICAMP

As hemeproteínas podem desempenhar funções diversas, como: a) transporte de oxigênio (hemoglobinas e mioglobinas); b) transporte de elétrons (citocromo); c) ativação de oxigênio (citocromo oxidase, triptofano pirrolase, citocromo P₄₅₀); d) ativação de peróxido de hidrogênio (peroxidase); e) decomposição de peróxido de oxigênio (catalase).

Hemoglobina tem sido utilizada como um protótipo de proteína para elucidação de um mecanismo fundamental em bioquímica: o de alosterismo, ou seja, como as diferentes partes de uma proteína se comunicam com as outras para exercer uma função regulatória. A descoberta sensacional das estruturas oxi e deoxi da hemoglobina, em 1960 por Perutz, despertou o interesse de vários pesquisadores na tentativa de explicar a natureza cooperativa da ligação com o oxigênio, em função dessas estruturas (T e R).

Trabalhos recentes com hemoglobina humana tem provido novos conhecimentos na energética dessa ligação e sobre os requisitos para a mudança da estrutura quaternária do estado R. Estudos com mioglobina por mutagênese sítio dirigida tem demonstrado a importância da interação com a água no sítio da heme, como controle da entrada do ligante. Por outro lado, estudos estruturais com hemoglobina de invertebrados têm demonstrado que a interação entre as subunidades e os mecanismos cooperativos é totalmente diferente da que ocorre com a hemoglobina humana. Esse fato é promissor para o entendimento da origem da evolução dessa proteína.

Outro aspecto de interesse na área de pesquisa com hemeproteínas tem sido a superfamília do citocromo P₄₅₀. Essa superfamília de monoxigenases desempenha um papel exclusivo na medição de muitos xenobióticos, como também na síntese e metabolismo de compostos endógenos (hormônios esteróides). Atualmente os citocromos P₄₅₀ podem ser considerados não só como iniciadores da detoxificação, como também estão envolvidos na ativação de procarcinogênicos. Tem sido demonstrado que, em algumas situações, a hemoglobina humana pode exercer o mesmo papel do citocromo P₄₅₀.

Alguns Aspectos da Síntese e Caracterização de Porfirinas e Metaloporfirinas

MARILDA DAS DORES ASSIS

Departamento de Química- FFCLRP-USP

Moléculas pequenas e industrialmente importantes como oxigênio, monóxido de carbono, hidrogênio, nitrogênio e água são também substratos ou produtos naturais de reações biológicas efetuadas por metaloenzimas. Metaloenzimas funcionam sob condições brandas e com alta velocidade, especificidade e seletividade, características estas buscadas mas ainda não encontradas nos sistemas químicos. Os pesquisadores buscam imitar a natureza com sistemas modelos mais simples que mimetizem os sistemas biológicos, mas que sejam mais facilmente estudados. Por outro lado, os estudos com sistemas biomiméticos ajudam a elucidar o mecanismo de ação das enzimas. A classe mais importante de metaloenzimas é talvez aquela que envolve complexos entre íons metálicos e ligantes porfirinas. A porfirina sintética mais comum é a tetrafenilporfirina, TPP, com 4 substituintes fenis nas posições meso aril do anel. Atualmente há um esforço em se sintetizar porfirinas com grande número de substituintes, tanto nas posições meso- aril como nos pirróis, a fim conferir maior estabilidade à molécula. O método clássico de síntese de porfirinas é o método de Rothmund(1) o qual envolve a reação de condensação do pirrol com o benzaldeído. Muitas modificações desse método têm surgido visando maiores rendimentos e facilidades de purificação. Dos métodos mais recentes, dois têm se destacado, Lindsey(2) e Gonçalves(3), que consistem na obtenção inicial do porfirinogênio seguida da oxidação deste à porfirina correspondente. O método de Lindsey, por utilizar condições mais brandas de reação, permite que benzaldeídos com grupos funcionais menos estáveis possam ser usados. Assim, porfirinas com estruturas bastante elaboradas podem ser sintetizadas incentivando sua utilização como sistemas supramoleculares. A inserção do metal nas porfirinas geralmente é feita pelo método de Adler(4) o qual consiste na reação da porfirina com um sal do metal. O monitoramento da reação é feito por espectroscopia de absorção eletrônica. Tanto as porfirinas como as metaloporfirinas são purificadas por cromatografia em coluna. As porfirinas e metaloporfirinas são mais comumente caracterizadas por cromatografia em camada delgada, espectroscopia de absorção eletrônica, RMN, EPR e eletroforese (porfirinas carregadas). Serão apresentados alguns exemplos de síntese e caracterização de porfirinas e metaloporfirinas substituídas utilizadas em catálise oxidativa.

Referências

1. P. Rothmund and A. R. Manotti, J. Am. Chem. Soc. 63, 267 (1941).
 2. J. S. Lindsey and R. W. Wagner, J. Org. Chem. 52, 827 (1987).
 3. A. M. d'A. R. Gonçalves; J. M. T. B. Varejão and M. M. Pereira, J. Heteroc. Chem. 6, 635 (1991).
 4. A. D. Adler; F. R. Longo; F. Kampas and J. Kim, J. Inorg. Nucl. Chem. 32, 2443 (1970).
- CAPES, CNPq, FAPESP.

METALOPORFIRINAS COMO SISTEMAS BIOMIMÉTICOS DE PROCESSOS OXIDATIVOS

YASSUKO IAMAMOTO

Departamento de Química, FFCLRP/USP

Oxidações difíceis como as hidroxilações seletivas da ligação inerte C-H de hidro carbonetos são frequentemente catalisadas em organismos vivos pelo citocromo P-450, uma monooxigenase. Muitos grupos nos últimos anos têm perseguido o objetivo de encontrar catalisadores novos e eficientes, capazes de reproduzir a química do P-450, que seriam úteis para as oxidações seletivas em química fina e prever o metabolismo oxidativo de drogas e xenobióticos. Estratégias de desenvolver sistemas modelo associando ferro ou manganês porfirinas (FeP ou MnP) com um doador de oxigênio no caso o iodosobenzeno (ΦIO) foram desenvolvidos nos últimos anos. Intermediários gerados de reações de FeP com ΦIO detectados por EPR e UV/Vis tem sido objeto de nossos estudos recentes [1]. Espécie intermediária dimérica ativa do tipo $\text{PFeIV-O-FeIV(O)P}^+$ tem sido proposta em sistemas de FeP mononitro-substituídas e não substituídas [1]. Metaloporfirinas (MP) com substituintes nos grupos mesoaril, como catalisadores nas oxidações de cicloexano usando ΦIO como o doador de oxigênio em sistemas homogêneos e heterogeneizados em imidazol propil gel (IPG) e em sílica gel (SG) têm sido estudados. Dos sistemas homogêneos, podemos destacar a FeP alquil (de cadeia longa) piridil substituída de caráter anfífilico, que se constitui num sistema biomimético eficiente [2]. Sistemas heterogeneizados do tipo Fe(III)P-IPG, Mn(III)P-IPG, Fe(III)-SG, Mn(III)-SG têm sido tema de nossos estudos

atualmente. Estes sistemas apresentam grandes vantagens como: possibilidades de reciclagens, grande estabilidade, e em alguns casos a seletividade é favorecida. Fatores que inibem tais sistemas têm chamado a nossa atenção. Foi constatada uma redução do ferro III no sistema Fe(III)P- IPG (onde P possui substituintes eletronegativos nos grupos meso-aril). O alto teor de imidazol no IPG induz a redução do ferro III, num sistema bis-imidazol [3]. IPG com menor teor de imidazol tem se revelado um suporte promissor. Estudo cuidadoso das condições de otimização são essenciais.

Referências

1. a) M. D. Assis, O. A. Serra, Y. Iamamoto e O. R. Nascimento, *Inorg. Chim. Acta*, 187, 107 (1991). b) S. Nakagaki, Y. Iamamoto, O. Baffa, O. R. Nascimento, *Inorg. Chim. Acta*, 186, 39 (1991). c) Y. Iamamoto, M. D. Assis, O. Baffa, S. Nakagaki e O. R. Nascimento. *J. Inorg. Biochem.*, 52, 191 (1993).
2. Y. Iamamoto, O. A. Serra e Y. M. Idemori. *J. Inorg. Biochem.*, 54, 55-66 (1994).
3. Y. Iamamoto, K. J. Ciuffi, H. C. Sacco, C. M. C. Prado, M. Moraes e O. R. Nascimento. *J. Mol. Catal.* 88, 167 (1994)

Apoio financeiro: CNPq, CAPES e FAPESP

Workshop: Hemoproteínas e Porfirinas II
(BIO) - 08/06/95

Mossbauer, EPR and Magnetic Susceptibility Studies of Iron in Bioinorganic Molecules - High Valence States and Exchange Interactions

E. BILL

Max-Planck-Institut fuer Strahlenchemie, Stiftstr. 34 - 36, D-45470 Muelheim/Ruhr, Germany

For the understanding of structure-function relationships in metalloproteins both structural and spectroscopic investigations have been essential, e.g. in deciphering the geometry at the metal ion centers, determining of metal valence states and the nature of metal ligand bonds or energies of excited electronic states. As the possibilities of manipulations with proteins are limited, the efforts of bioinorganic chemistry to provide systematic varieties of biomimetic analogues are indispensable and the main part of this contribution will deal with comparative studies of metalloenzymes and model compounds. Iron-containing molecules have attracted the special attention of spectroscopists active in the field because they allowed the application of Mossbauer spectroscopy in combination with other techniques. Mossbauer spectroscopy as a "microscopic" technique has the advantage that it selectively yields information about spin, valence state and symmetry of the metal site. Combined together, the three methods Mossbauer spectroscopy, electron paramagnetic resonance (EPR) spectroscopy and magnetic susceptibility in conjunction with spin-Hamiltonian analyses, provide a powerful set of tools for detailed studies of various aspects of molecular electronic structure. Compound I and Compound II are intermediates in the reaction cycle of hemeperoxidases, which are enzymes with iron porphyrins as active centers. Both compound I and II represent high-valent iron complexes which contain the ferryl (Fe(IV)=O) $^{2+}$ unit. In compound I, the porphyrin is also oxidized, comprising an oxoferryl porphyrin pi-cation radical. Compound I and its synthetic analogues are spin-coupled systems with exchange interaction between ferryl iron ($S=1$) and porphyrin radical ($S^{\cdot}=1/2$). Despite general similarities in physicochemical properties the strength of exchange in different complexes varies considerably, generating spin coupling schemes, which range from antiferromagnetic to ferromagnetic coupling. The coupling constant J appears to represent a key parameter of the electronic structure. In this contribution, spectroscopic studies and theoretical results of several synthetic model compounds, also non-porphyrin Fe(IV) compounds, will be presented. The experimental analyses will be demonstrated together with the ambiguities that arise from the competition of zero-field and exchange interaction. Correlations of spin-Hamiltonian parameters and structural specificities, as well as exchange pathways will be delineated. As additional example, the typical effects of exchange interaction in iron-sulfur clusters, as determined by the three experimental methods, will be recalled. Studies of exchange interaction and charge transfer in the Fe(II)-Fe(III) pair of a synthetic mixed-valence complex (Fe $_2$ -S $_2$ -dimethylmethanebenzimidazole) $_3$ revealed hyperfine parameters of the spin ground state ($S=1/2$) intermediate between values for a localized mixed-valence $F_e^{2+} - F_e^{3+}$ and a fully delocalized $F_e^{2.5+} - F_e^{2.5+}$ system. A spin-Hamiltonian analysis, including Heisenberg- and double-exchange explains partial electron delocalization within the asymmetric iron pair.

This work was supported by the Schwerpunktprogramm "Bioorganische Chemie" of the Deutsche Forschungsgemeinschaft and by the European Union Human Capital and Mobility grant to the MASIMO network.

¹H NMR AND ELECTRONIC ABSORPTION SPECTROSCOPY OF PARAMAGNETIC WATER-SOLUBLE MESO-TETRAARYLSUBSTITUTED METALLOPORPHYRINS.

VICTOR E. YUSHMANOV, HIDETAKE IMASATO, TANIA T. TOMINAGA, MARCEL TABAK

Instituto de Química de São Carlos, USP

The ionization, μ -oxo-dimerization and axial ligation equilibria of free bases, iron(III) and manganese(III) derivatives of meso-tetrakis(p-sulfonatophenyl)porphyrin (TPPS) and meso-tetrakis(4-N-methyl-pyridiniumyl)porphyrin (TMPyP) in aqueous solution were studied by ¹H NMR and electronic absorption spectroscopy. At physiological pH, Fe(III) complexes of TMPyP and TPPS exist predominantly as dimers and may undergo transition to low spin species upon binding to biomolecules, whereas Mn(III) complexes are essentially monomeric. Dicyano and bis-imidazole complexes of FeTMPyP and FeTPPS are low spin monomer adducts in the pH range 2.0 to 11.2. No low spin dimeric complexes were found. The low spin monocyano and high spin monoimidazole complexes of FeTMPyP are formed in acidic and alkaline media, respectively. T_1 -relaxation enhancement of water protons at 200 MHz induced by FeTPPS falls dramatically in the sequence high spin \gg dimeric $>$ low spin form. The relevance of data presented here for drug design and assay of metalloporphyrins as potential contrast agents for magnetic resonance imaging is discussed.

Biofísica Molecular Experimental (BIO) - 08/06/95

PEPTIDE-LIPID BILAYER INTERACTION: A COMPARISON OF THE NATIVE MELANOTROPIC HORMONE α -MSH TO A BIOLOGICALLY MORE POTENT ANALOG

M. H. BIAGGI, K. A. RISKE, M. T. LAMY-FREUND

Instituto de Física - USP - SP

O. R. NASCIMENTO

Instituto de Física de São Carlos - USP - SC

The interaction of two melanotropic peptides with anionic DMPG vesicles was studied by spin label ESR spectroscopy and circular dichroism (CD). The native cationic linear tridecapeptide α -MSH (α -Melanocyte stimulating hormone) and the biologically more active analog [Nle⁴,Dphe⁷]- α -MSH were used. Peptide-induced changes in the lipid organization were evaluated by ESR studies of spin labels located at different depths of the bilayer. The membrane-partition coefficient for the analog was found to be about four times larger than that of the native hormone. It was shown that both α -MSH and [Nle⁴,Dphe⁷]- α -MSH increase the packing of the DMPG bilayer. Apparent order parameters were calculated from the spin labels ESR spectra. The results indicate that the incorporation of both peptides increases the order of the lipid acyl chains but the analog causes a larger effect. A comparison of the variations caused by the peptides on the above parameters of the different probes used, with those caused by other molecules, like small ions, cholesterol, carotenoids, integral and surface proteins, suggests that [Nle⁴,Dphe⁷]- α -MSH penetrates deeper in the bilayer than α -MSH. Those results are in agreement with the variation of the tryptophan fluorescent

intensity and peak position (Ito A. S., A.M. de L. Castrucci; V.J. Hruby; Mac E. Hadley, D.T. Krajcarski & A.G. Szabo, 1993, *Biochemistry*, 32, 12264 - 12272). Variations on the CD spectra of the two peptides upon interaction with DMPG bilayers evince then interaction of the peptides with lipid membranes and allow a better understanding of the different structural changes on each of them. Financial support: CNPq, FAPESP and FINEP.

MELATONIN PENETRATION INTO LIPID VESICLES: A STEADY-STATE FLUORESCENCE STUDY

E. X. COSTA, A. S. ITO, M. T. LAMY-FREUND

Instituto de Física, Universidade de São Paulo - SP

Melatonin, a tryptophan-derived hormone, has been reported to interact with a variety of different cells, playing a number of distinct physiological functions, including many photoperiod-dependent responses. Recently, melatonin was shown to behave as a very potent oxygen radical scavenger and to present DNA antioxidant protective effects. It was suggested that melatonin could easily cross the cell lipid barrier, though there is also evidence of melatonin membrane protein receptors. We showed (Shida, C.S., Castrucci, A.M.L. & Lamy-Freund, M.T. 1994, *J. Pineal Res.* 16, 198-201) that despite its apparent hydrophobic character, melatonin is highly soluble in aqueous medium. By spin label ESR we found that melatonin interacts with lipid membranes, altering mainly the surface structure of the bilayers (Shida, C.S., Costa, E.X., Ito, A.S. & Lamy-Freund, M.T. 1994, *Biophys. J.* 66, A57). With a simple dialysis experiment it is shown here that melatonin can cross lipid bilayers. Through the variation of the melatonin steady-state fluorescence signal, due to the

interaction of the hormone with lipid vesicles, it was possible to calculate melatonin-membrane association constant. Similar to the ESR results, small variations of both the fluorescence intensity and the fluorescence peak position indicate that the hormone interacts principally at the membrane interface region, though it can cross the bilayer. Those results are corroborated by measurements of the melatonin fluorescence quenching by nitroxides placed at different positions of the lipid acyl chain. (Financial support: FAPESP, FINEP and CNPq)

ESTUDOS ESPECTROSCÓPICOS DA INTERAÇÃO DE DERIVADOS DE DIPIRIDAMOL COM MICELAS IÔNICAS

CHRISTIANE PHILIPPINI FERREIRA BORGES

Universidade Estadual de Ponta Grossa - PR

IOURII BORISSEVITCH, MARCEL TABAK

Instituto de Química de São Carlos - USP

A interação de dipiridamol(DIP) e os derivados, RA14, RA47, e RA25 com micelas de CTAC, SDS e HPS foi analisada utilizando-se absorção ótica, fluorescência e RMN. Os compostos estudados tem em comum o anel pirimido[5,4-d]pirimidina e possuem diferentes substituintes. Nesse estudo observou-se que os pKs dos compostos baixam, com relação aos obtidos em água, em presença de CTAC e HPS, e aumentam quando em presença de SDS para todos os compostos estudados. A análise das mudanças da fluorescência nas titulações de soluções dos derivados com micelas permitiu estimar as constantes aparentes de ligação (K_b) para as formas protonada e neutra dos compostos. Comparando-se os valores obtidos para as constantes de ligação, os deslocamentos do pK (ΔpK) e as constantes de supressão (K_{SV}) para os compostos estudados observa-se que os valores obtidos são semelhantes para DIP e RA14. Para RA25, os valores diferem bastante com relação aos obtidos para DIP e, no caso de RA47, obteve-se valores intermediários. A comparação dos resultados obtidos para fluorescência e RMN em solução homogênea (água, etanol e CCl_4) e na presença de micelas mostra que a localização dos derivados nas micelas é dependente da natureza dos substituintes. Observou-se que a localização de moléculas de RA14 nas micelas é similar a do DIP, isto é, na interface da micela, próximo ao início da região hidrofóbica, as moléculas de RA25 localizam-se na superfície das micelas, e as moléculas de RA47 estão numa posição intermediária. Esses resultados correlacionam bem com os dados de atividade biológica desses compostos, indicando que a localização dessas drogas nas membranas é essencial para sua ação biológica. Apoio: FAPESP, CNPq e FINEP.

DISTÂNCIAS ENTRE EXTREMIDADES EM METORFAMIDAS

ANDRÉ T. OTA

Universidade Estadual de Londrina

PEDRO G. PASCUTTI

Inst. Física-USP/Inst. Biofísica-UFRJ

AMANDO S. ITO

Inst. Física - USP

Uma série de peptídeos derivados da metorfamida, cuja seqüência básica é Gly-Gly-Phe-Leu-Arg-Arg-Val tem sido estudada através da espectroscopia de fluorescência, pelo fenômeno da transferência de energia fluorescente. A transferência ocorre entre o grupo doador aminobenzoil(Abz), ligado ao terminal amina do peptídeo, e o grupo aceitador etilenodiaminodinitrofenil(EDDnp), ligado ao terminal carboxila. Fazendo-se uso do método de Förster para transferência de energia, pode-se determinar a distância entre doador e aceitador, representativa neste caso, da separação entre os extremos do peptídeo. Para análise dos resultados experimentais efetuamos a simulação da estrutura dos peptídeos por dinâmica molecular, usando o programa THOR desenvolvido em nosso grupo. A representação explícita dos grupos Abz e EDDnp foi obtida através do programa MND0(MOPAC) que nos forneceu os parâmetros específicos para a geometria e a distribuição de cargas dos mesmos. Colocamos os peptídeos nas mais variadas conformações iniciais possíveis(em hélice, em "trans" (máxima distância possível), etc.) com a temperatura inicial de 0K e temperatura final de 300K. Esperamos com isto que a energia recebida pelos peptídeos seja suficiente para que eles ultrapassem as barreiras de potencial, e que na situação final, a configuração atingida seja a mais estável. Dada a discrepância entre os resultados experimentais e os cálculos de dinâmica molecular, iniciamos a simulação a 900K, baixando a temperatura até 300K. Com isso foi possível a construção do gráfico de Ramachandran para verificar as conformações prováveis a partir da estatística das várias conformações possíveis.

Studies of magnetism in ants

DARCI MOTTA ESQUIVEL, ELIANE WAJNBERG

CBPF/RJ - Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

MARILIA PAIXÃO LINHARES

UFRJ

Living beings are able to perceive the geomagnetic field. Magnetic bacteria and honey bees are some well known examples. More recently, experiments with fire ant demonstrated that fire ant has a magnetic sense and that change in the magnetic field direction disrupts the initial homing ability of workers. In order to verify the presence of magnetite in ants we have carried out EPR

experiments of selected parts of ants. Preliminary measurements showed that a ≈ 6600 Gauss width signal, characteristic of ferromagnetic material, was present in ant thorax samples. Samples from abdomen did not exhibit this large EPR signal. The result seemed to indicate that magnetic crystals are present mainly in the ant thorax. More EPR experiments and complementary techniques are being planned to get additional information.

EPR STUDIES OF REDUCED RAT LIVER MITOCHONDRIA INCUBATED WITH NITRIC OXIDE

MARÍLIA PAIXÃO LINHARES

UFRJ

RICHARD CAMMACK

King's College London

Nitric oxide (NO), produced by macrophages, can damage cells. A proposed mechanism is binding to enzymes that are involved in cellular respiration. We have carried out EPR spectroscopic measurements of rat liver submitochondrial particles, reduced with specific substrates of Complexes I, II and IV, treated with 1mM NO as a saturated buffer. A signal at $g \approx 1.96$ observed in the presence of ascorbate + TMPD was attributed to the presence of nitric oxide; it remained during 10 min incubation with ascorbate, but disappeared in the presence of NADH or succinate. Other EPR signals appeared, which were assigned to nitrosyl-haem proteins and to mononuclear dinitrosyl iron-sulphur clusters, probably derived from nonhaem iron. However the iron-sulphur clusters of the respiratory chain were relatively unaffected by the NO treatment.

CARACTERIZAÇÃO DE ALGUMAS PORFIRINAS MODELOS ATRAVÉS DA TÉCNICA DE RPE A BAIXAS TEMPERATURAS.

OTACIRO RANGEL NASCIMENTO

Instituto de Física de São Carlos - USP

MARILDA DAS DORES ASSÍS, YASSUKO IAMAMOTO,

OSWALDO BAFFA

Depto. de Química-FFCLRP-USP, Ribeirão Preto

Porfirinas modelos derivadas do cloreto de tetrafenilporfirina férrica Fe(TPP)Cl foram sintetizadas e purificadas por cromatografia em coluna. As amostras foram diluídas em solvente orgânico e estudadas através de espectroscopia UV-vis e também por ressonância paramagnética eletrônica em banda X à temperatura próxima ao hélio líquido. Os espectros de RPE se mostram bastante sensíveis às modificações introduzidas principalmente através do desdobramento super-hiperfino do spin nuclear do íon de cloro coordenado na quinta coordenação do íon de ferro. Estas porfirinas tem sido utilizadas para tentar mimetizar o fun-

cionamento catalítico do citocromo p450 e os intermediários produzidos na reação com iodobenzeno tem mostrado claramente a existência de espécies como o radical ferril- π cátion e dímeros contendo Fe(IV) [1-4]. Neste trabalho busca-se entender aspectos em detalhes de como mudanças no grupo fenil pode modificar o tipo de ligação do íon ferro com o cloro e como consequência ligantes reacionais com o ferro nos processos catalíticos. Simulação dos espectros de RPE permitem medir os parâmetros do fator \tilde{g} bem como os valores da interação com o cloro e estimar a delocalização dos orbitais que contém os elétrons responsáveis pelo sinal de RPE.

[1] Nakagaki, S.; Iamamoto, Y.; Baffa, O.; Nascimento, O. R., Inorg. Chim. Acta, 186 (1991) 39-43.

[2] Assís, M. D.; Serra, O. A.; Iamamoto, Y.; Nascimento, O. R., Inorg. Chim. Acta, 187 (1991) 107-114.

[3] Iamamoto, Y.; Assís, M. D.; Baffa, O.; Nakagaki, S.; Nascimento, O. R., J. Inorg. Biochem., 52 (1993) 191-200.

[4] Iamamoto, Y.; Ciuffi, K. J.; Sacco, H. C.; Prado, C. M. C.; Moraes, M.; Nascimento, O. R., J. Mol. Catal. 88 (1994) 167-176.

Estudo conformacional de Peptídeo através de CD e EPR

ROSÂNGELA GIRALDI SOILA, OTACIRO RANGEL

NASCIMENTO, LEILA MARIA BELTRAMINI

Instituto de Física de São Carlos - USP

A albumina é uma das proteínas mais abundantes nos animais, possuindo diversas funções, porém nenhuma delas pode ser qualificada como a principal. Com sua seqüência e estrutura cristalográfica já determinadas, sabe-se que ela possui um alto conteúdo de cisteínas e hélices- α , com um tempo de vida médio muito curto. A alta homologia entre a albumina humana, bovina e de rato é outra característica que chama a atenção nesta proteína.

O objeto de nossos estudos é um peptídeo, denominado Pentadeca-peptídeo por possuir apenas quinze aminoácidos, cuja seqüência corresponde a um pequeno trecho da albumina de rato. Sua estrutura primária é conhecida, permitindo-nos usar um peptídeo de seqüência idêntica ao natural, porém sintetizado em laboratório, o que reduz muito seu custo.

O interesse em estudar este peptídeo surgiu depois que foi descoberta sua atividade biológica: inibir a agregação de plaquetas sanguíneas. A partir daí passou-se a acreditar que ele seja de fundamental importância para evitar a formação de micro coágulos.

O objetivo deste trabalho é observar alterações em sua estrutura secundária e atividade biológica através de técnicas como Dicroísmo Circular e EPR, diante de variações física e químicas (temperatura, pH, reagentes,...). Utilizaremos também simulação com-

putacional com programas de previsão de estrutura secundária para compararmos com nossos resultados experimentais.

SPECTROPOLARIMETRIC ANALYSIS OF SECONDARY STRUCTURE CHANGES IN HUMAN SERUM ALBUMIN (HSA)

NORMA BIANCA SAES CRETELLI, WANDA DRAGHETTA PERUSSI DE JESUS, YVONNE PRIMERANO MASCARENHAS

Instituto de Física de São Carlos. USP.

The folding of a protein in solution is influenced by many parameters, as temperature, pH, ionic strength, the presence of co-solvents, etc. in a way not completely understood. In this work we analysed the influence of pH and methanol as co-solvent in the secondary structure of human albumin, an α - helix rich protein, using spectropolarimetry. The observed secondary structural changes with pH in the absence of methanol are in good agreement with the ones reported in the literature (Foster, J. S. "Albumin structure, function and uses", Pergamon Press, Oxford, 1977). The co-solvent acts as a structure stabilizer especially at the low pH range (extended conformation) and higher methanol concentration.

ESTUDO DE HEMOGLOBINA NITROSILADA POR ESPECTROSCOPIA MÖSSBAUER

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

UFMG

E. WAJNBURG

CBPF

Amostras de hemoglobina nitrosilada (HbNO) foram preparadas por redução de oxihemoglobina (HbO₂) adicionando-se alternadamente ditionita e pequenas quantidades de NaNO₂. Outras amostras foram preparadas a partir de hemoglobina fresca borbulhando NO sob condições anaeróbicas. Utilizou-se HbO₂ de rato, natural e enriquecida in vivo com ⁵⁷Fe. Imediatamente após a preparação as amostras foram resfriadas e guardadas a 77 K até o momento das medidas. Espectros Mössbauer foram medidos na faixa de temperaturas 4,2...230K e com campos aplicados de zero e 40mT perpendicular a direção da radiação- γ . Simulamos espectros estáticos usando o formalismo do Hamiltoniano de Spin. A relaxação eletrônica foi levada em consideração usando o formalismo de superoperadores e um modelo estocástico (Clauser e Blume). Os resultados obtidos apresentam dependência no tipo de preparação das amostras. Observa-se nestes espectros, além da HbNO, outros componentes identificados como deoxihemoglobina e compostos Fe(III) baixo e alto spin. Os resultados da relaxação Mössbauer são comparados a medidas com EPR em mioglobina nitrosilada.

Estudo das interações do íon Cu(II), com os dipep- tídeos Glicil-Fenilalanina e Glicil-Tirosina através das técnicas de RPE, DC e Absorção Ótica.

MARIA CRISTINA FIGUEIREDO LIMA E LARA
UnB

OTACIRO RANGEL NASCIMENTO, TANIA TOYOMI TOMINAGA
IFQSC

Com o auxílio das técnicas de Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE), Dicroísmo Circular (DC) e Absorção Ótica, estamos fazendo um estudo sobre a influência de resíduos pesados em dipeptídeos complexados com o íon cobre II, em diferentes pH's. Particularmente, neste trabalho, estamos analisando os complexos de cobre Glicil-Fenilalanina e Glicil-tirosina. A influência do resíduo pesado do triptofano, no complexo Glicil-Triptofano:Cu(II) já foi estudado por nós. Estamos verificando agora, no estudo dos complexos Gly-Fen:Cu(II) e Gly-Tyr:Cu(II) uma grande semelhança com o Gly-Trp:Cu(II) no que se refere as propriedades espectros - cópias obtidas nas técnicas RPE, DC e Absorção Ótica. Os espectros de RPE nas bandas X e Q nos mostra um abaixamento de simetria em pH's altos, em torno de 12 nos complexos estudados. Verificamos nos espectros de absorção uma intensa banda na região de 650nm e um forte dicroísmo circular associado a esta banda. Tais comportamentos experimentais, nos levou a propor modelos teóricos para os complexos com suas respectivas funções de onda. Tais modelos nos permitirá verificar a influência dos resíduos pesados na simetria dos complexos formados, mudanças estereoquímicas e a intensa banda de absorção na região de 650nm. Tais propriedades sugerem uma semelhança com uma classe de proteínas naturalmente complexadas, as proteínas azuis. Como as técnicas utilizadas por nós são complementares, pudemos através dos modelos, entender o caráter das ligações cobre ligantes uma vez que os nossos métodos são semi teóricos.

UTILIZAÇÃO DA TÉCNICA DE MARCADORES DE SPIN NO ESTUDOS DE BIOMEMBRANAS RECONSTITUÍDAS

GILZA MARIA PIEDADE PRAZERES

Instituto de Biofísica - UFRJ

MARÍLIA PAIXÃO LINHARES

Instituto de Física - UFRJ

PAULO MASCARELLO BISCH

Instituto de Biofísica - UFRJ

Lipossomas e vesículas de fosfolipídios são modelos simplificados para estudos da membrana biológica, pois permitem a reconstituição da bicamada lipídica e a incorporação de unidades proteicas funcionais,

como canais e receptores, responsáveis pela comunicação e sinalização celular. Neste trabalho investigamos proteínas formadoras de canais em membranas biológicas, através da técnica de marcadores de spin. A metodologia utilizada consta de: extração e purificação da proteína, reconstituição em vesículas de fosfolipídio (sintético ou extraído) e espectroscopia de ressonância paramagnética eletrônica utilizando marcadores de spins. Para o filme lipídico os marcadores utilizados são radicais nitróxidos derivados de ácidos graxos ou de fosfolipídios e para a proteína os marcadores são radicais nitróxidos derivados de maleimida. Desse modo é possível obter informações sobre o comportamento do filme lipídico, seu grau de fluidez, a formação de domínios lipídicos em torno das proteínas, a identificação de sítios ativos e das mudanças estruturais associadas ao funcionamento biológico.

INFLUÊNCIA DOS GRADIENTES DE DENSIDADE NA FORMAÇÃO DE ESTRUTURAS DISSIPATIVAS EM CÉLULA DE DIÁLISE

KATYA MARIA OLIVEIRA DE SOUSA

Instituto de Biofísica - UFRJ

MARIA CÉLIA PIRES COSTA

Departamento de Química - UFMA

PAULO MASCARELLO BISCH

Instituto de Biofísica - UFRJ

Estruturas dissipativas são observadas em experimentos de osmocentrifugação em célula de diálise, realizados de acordo com as seguintes etapas: 1) obtenção de gradiente de densidade (Ficoll-Sacarose); 2) osmocentrifugação de amostras de hemoglobina humana. A formação de estruturas espaço-temporais depende da concentração de hemoglobina e do gradiente de densidade. Neste trabalho, o perfil dos gradientes de densidade utilizados foi determinado através de medidas de densidade e de índice de refração para várias concentrações de Ficoll e sacarose. Mostramos que o comportamento dos gradientes de densidade formado em ambos os compartimentos da célula de diálise depende da concentração de sacarose e provavelmente está relacionado com diferentes tipos de estruturas observadas nos experimentos.

STUDIES OF DNA COMPLEXES INVESTIGATED BY PHOTOACOUSTIC SPECTROSCOPY

M. L. CORNELIO

Depto. Physics - UNESP São José do Rio Preto

Polycyclic aromatic hydrocarbon carcinogens and some, structurally related, pharmacological drugs are known to present these biological activities due to their ability to binding to DNA in aqueous solutions. In general this interactions is done by insertion their planar aromatic

rings between adjacent base pairs in the DNA. This mechanism of intercalation imposes new photophysical properties to the molecules that bind to DNA and the characterization of such properties is the goal of this present work. The use of photoacoustic technique as a new tool to determine quantum yields of fluorescence and non-radiative lifetime decays is investigated at this important biological macro-molecule. Supported: FUNDUNESP.

STRUCTURAL DISTURBANCE OF MEMBRANE BILAYERS BY NEUTRAL AND POSITIVELY CHARGED CHLORPROMAZINE AT SUBLYTIC CONCENTRATIONS

ELIANE WAJNBERG, CELIA ANTENEODO

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

SÔNIA RENAUX WANDERLEY LOURO

Departamento de Física - PUC-RIO

Effects of sublytic concentrations of the phenothiazine tranquilizer chlorpromazine on the organization of lipid bilayers are investigated by the ESR technique using stearic acid spin labels with the nitroxide groups at six different positions of the fatty acyl chain. Protonated molecules of chlorpromazine strongly interact with spin labels near the membrane surface, and the interaction decreases with increasing penetration of the label in the hydrophobic region of the membrane. The dependence of the degree of disturbance on drug concentration suggests that the molecules of the drug form a ring around negatively charged lipid headgroups in membrane bilayers. On the other hand, neutral molecules of chlorpromazine have little effect on the membrane surface, and the disturbing potency of the drug increases with increasing depth of the nitroxide probe. These results are important to emphasize the difference between the two forms of the drug coexisting at pH values in the physiological range, and to improve the understanding of mechanisms of action of phenothiazine drugs in numerous biological systems.

DONNAN EQUILIBRIUM APPLIED TO CATIONIC VESICLES

CARLOS ROBERTO BENATTI, ELOI FEITOSA

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

JOAQUIM PROCÓPIO

Instituto de Ciências Biológicas - USP - São Paulo

Dialysis equilibrium is a classical method suitable to investigate the binding of molecular species to macromolecules. For ionizable compounds the method referred to as Donnan equilibrium may furnish the association degree and the electrostatic potential of the macroion. We have applied the Donnan equilibrium to small unilamellar vesicles (ca. 25nm radius) prepared by ultrasonic irradiation of an aqueous solution

of the cationic surfactant dioctadecyldimethylammonium bromide (DODAB), and a semipermeable membrane has been used for this purpose. We dialysed salt-free DODAB vesicles against pure water and NaCl solutions. In the first case we found that after the equilibrium was attained about 0.2mM of DODAB molecules (probably in the form of small bilayer fragments) have left the dialysed solution volume independently on the total DODAB concentration up to 15mM. In the other case we dialysed 10mM of vesicles against NaCl solutions at concentrations 2, 4 and 6mM and obtained decreasing values of the Donnan potential with increasing the salt concentration. The results are in agreement with that expected from the Poisson-Boltzmann theory which supports electrostatic screening effects, and show that a vesicle model consisting of an electrically neutral internal compartment seems to be reasonable for many applications. Supported by: FAPESP (CRB and EF) and CNPq (EF) Acknowledgement: Laboratório Central (Hospital de Base)

**THE INTERACTION OF
TETRAPHENYLPORPHYRINSULFONATE
(TPPS) AND
TETRAMETHYLPYRIDILPORPHYRIN
(TMPP) WITH BOVINE SERUM ALBUMIN
(BSA) IN AQUEOUS SOLUTION.
FORMATION OF AGGREGATES.**

TANIA T. TOMINAGA, IOURI E. BORISSEVITCH,
HIDETAKE IMASATO, MARCEL TABAK
*Instituto de Química de São Carlos, USP, C.P. 369,
13560-970, São Carlos, SP*

Interaction with biological structures can change spectral and energetic characteristics of porphyrins (PPh), for example, reduce the quantum yield of the triplet state, and thus change their photodynamic activity. In the present work we have studied the interaction of TPPS and TMPP with transport protein BSA in aqueous solutions at different pH by means of the absorption and fluorescence spectroscopy. PPhs added into the BSA solution reduce the BSA fluorescence, and the concentration of BSA molecules, which are quenched, is higher than that of the quencher (PPh). BSA added into the TPPS solution changes its absorption and fluorescence spectra and reduces the fluorescence intensity. For TMPP solution these characteristics practically do not depend on the presence or absence of BSA. Analysis of our data allow us to suggest that the behavior of this system can not be explained by a simple equilibrium equation $PPh + BSA \rightleftharpoons [PPh...BSA]$ It is necessary to take into account the possibility of PPh and BSA aggregation. At low PPh concentrations BSA forms aggregates around PPh molecule $nBSA + PPh \rightleftharpoons [PPh...nBSA]$ Using the step kinetic model we have derived the formula to calculate the aggregation order n $n = \frac{F}{F_{max}} \frac{[PPh]}{[BSA]}$ The following n values

were found: TMPP at pH5.0 $n=10$ and at pH8.5 $n=22$; TPPS at pH5.0 $n=23$ and at pH8.5 $n=10$. At high concentrations TPPS forms aggregates on the surface of the BSA molecule $BSA + mPPh \rightleftharpoons [mPPh...BSA]$ The values for m are: at pH5.0 $m=9$ and at pH8.5 $m=2$. Support: CNPq and FINEP.

**THE ROLE OF AGGREGATION IN THE
PROCESS OF TRIPLET STATE
DEACTIVATION OF PORPHYRINS IN
AQUEOUS SOLUTIONS AT THEIR
INTERACTION WITH HUMAN SERUM
ALBUMIN. FLASH-PHOTOLYSIS AND
FLUORESCENCE STUDY.**

IOURI E. BORISSEVITCH, TANIA T. TOMINAGA,
HIDETAKE IMASATO, MARCEL TABAK
Instituto de Química de São Carlos, USP

The porphyrin (PPh) photodynamic activity is explained by a high quantum yield of triplet state (T-state), which produces the active singlet state of the molecular oxygen. So the question of the influence of the PPh interaction with biological structures on the characteristics of PPh T-states and, especially, their reaction ability is of great interest. We have studied the influence of the interaction of some porphyrins in aqueous solutions with human serum albumin (HSA) on the yield (ϕ_T) and kinetics of their triplet states in the presence and absence of quenchers. Fluorescence measurements allowed us to study the aggregation of both HSA and PPh due to their interaction. In the presence of HSA the deactivation kinetics of porphyrin T-state transforms from mono- to biexponential form and its average lifetime (τ_T) increases; ϕ_T at first reduces and then increases at [HSA] increase. The triplet quenching constants (k_q) by different quenchers, including oxygen, reduce by several orders upon binding. PPh fluorescence is quenched upon HSA addition and HSA fluorescence is quenched upon PPh addition as well. To explain these effects one has to assume the formation of two types of aggregates: at a ratio $[PPh]/[HSA] > 1$ PPh molecules form aggregates on the surface of the HSA molecule $HSA + mPPh \rightleftharpoons [mPPh...HSA]$, at $[PPh]/[HSA] < 1$ the formation of HSA aggregates around PPh molecules takes place $nHSA + PPh \rightleftharpoons [PPh...nHSA]$. The HSA aggregation around a PPh molecules induces reduction of the quenching constant due to sterical obstacles to the contact between PPh molecule and the quencher and increases ϕ_T and τ_T . The PPh aggregation quenches the PPh fluorescence and reduces τ_T and ϕ_T . Support: CNPq and FINEP.

INTERACTION OF DIPYRIDAMOLE WITH PHOSPHOLIPIDS IN MIXED LANGMUIR MONOLAYERS.

MARCEL TABAK, GALINA BORISSEVITCH
Instituto de Química de São Carlos, USP
 OSVALDO N. OLIVEIRA JR
Instituto de Física de São Carlos, USP

Dipyridamole (DIP) itself is not able to form a monolayer at the air-water interface. We have obtained stable monolayers from DIP mixed with a lipid in the chloroform solution. DIP changes both the mechanical characteristics and electrical properties of the lipid monolayers as it was shown using surface pressure and surface potential measurements. The details of the effect depend both on the nature of the lipid, the protonation state of it and DIP and the DIP concentration. For dipalmitoylphosphatidyl choline (DPPC) which is zwitterionic in a wide range of pH both protonated and nonprotonated DIP induced expansion of the surface pressure-area per molecule ($\pi-A$) isotherm in low concentrations (up to DIP/DPPC=0.02). Above this DIP concentration the monolayer again became more condensed, probably because a new packing arrangement of DPPC molecules around DIP molecules has been made possible. This is an evidence of the presence of the bound DIP molecules in the monolayer, which is also corroborated by the surface potential (SP) results. DIP changes the normal component of the dipole moment of the film-forming molecules. The possible contribution from the double-layer formed at the air-water interface seems overruled by this packing effect. DIP molecules seem to be located close to the border of the polar head region of the film and that of the hydrophobic tails, the protonated ones closer than nonprotonated. For dipalmitoylphosphatidyl glycerol (DPPG), which can be either negative or neutral depending on pH, DIP appears to be located directly at the border of the polar and nonpolar regions of the film and in protonated state even pulled into the polar layer. Its incorporation induced a gradual expansion of the $\pi-A$ isotherm and increase of the SP as the protonated DIP affects the contribution from the double-layer. Support: FAPESP, CNPq and FINEP.

ESTUDO POR EPR DE NITROXIDO DE HEMOGLOBINA

MARCO ANTONIO FLORES RIVERA, GEORGE BEMSKI, ELIANE WAJNBERG
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

A medida por EPR de oxi-hemoglobina (HbO_2) não pode ser feita, já que esta molécula é diamagnética. O nitróxido de hemoglobina ($HbNO$) por ser paramagnético se presta a estudos por EPR, e a sua estrutura eletrônica é muito parecida com a estrutura eletrônica da oxi-hemoglobina. Neste trabalho se estuda as componentes do espectro de EPR de $HbNO$ em baixas

temperaturas (7K-40K). Este espectro corresponde a duas conformações (axial e rômica). O objetivo deste trabalho é estudar estas componentes em banda X e em banda Q, por deconvolução é possível separar essas componentes.

Biofísica Molecular: Teoria e Modelagem (BIO) - 09/06/95

INFLUENCE OF THE AMINO ACID DISTRIBUTION ON THE LONGITUDINAL VIBRATIONAL SPECTRUM OF THE α HELIX.

JOSÉ ANTONIO FORNÉS
UFG

We analyze the influence of the primary structure (sequence of amino acid residues) on the longitudinal vibrational modes of the α helix using Dean's method, which considers the different masses of the amino acids involved. The actual spectrum stays between the corresponding to an order (equal masses) and random distributions of amino acids spectra, being the three quite similar. The frequency range extends up to $f = 350cm^{-1}$ for the α portion of several proteins within the range of experimental results.

FLUCTUATION-DISSIPATION THEOREM IMPOSES HIGH-VOLTAGE FLUCTUATIONS IN BIOLOGICAL IONIC CHANNELS.

JOAQUIM PROCOPIO
USP
 JOSÉ ANTONIO FORNÉS
UFG

In order to determine the voltage-fluctuations across cell membranes, the theory of generalized susceptibility was applied to a system consisting of a capacitor and a resistor in parallel, resembling a fragment of biological cell membrane harboring an ionic channel. We found, in accordance with others, that the mean square voltage fluctuation is given by $\langle V^2 \rangle = kT/C$ where C is the electrical capacitance of the membrane. When the above equation is applied to different combinations of membrane patch areas and corresponding channels it is possible to identify a range of membrane areas and channel conductivities where voltage fluctuations may influence the behaviour of a putative gate. It appears that for lower channel conductivities high amplitude voltage fluctuations fall in the range of typical gating

response times. It is proposed that voltage fluctuations may be included among the many mechanisms influencing gating behaviour.

UM MODELO PARA SEQUÊNCIAS DE NUCLEOTÍDEOS

CELIA ANTENEODO
CBPF

ANDRÉ M. C. DE SOUZA
Instituto de Física - UFS

O estudo das características do material genético de organismos modernos pode esclarecer a compreensão dos processos pelos quais esse material genético evoluiu. Para estudar as propriedades estatísticas das sequências de nucleotídeos, foi proposto recentemente o método de "caminhadas de DNA"¹, que consiste basicamente em associar uma caminhada aleatória a uma dada sequência. Neste trabalho, propomos um modelo para gerar artificialmente sequências de nucleotídeos e, mediante o método de mapear estas sequências numa "caminhada de DNA", analisamos a existência de correlação entre nucleotídeos. Mostramos que a presença de correlações de curto alcance entre primeiros vizinhos não é suficiente para gerar as correlações de longo alcance observadas nas sequências reais. Mostramos também que as correlações de longo alcance podem ser favorecidas pela ocorrência de interações entre vizinhos distantes dentro de uma mesma cadeia, que nas sequências reais teriam lugar a partir da formação de "loops", o que incorpora uma característica não linear à sequência.

¹ Peng, C.-K. et al., (1992). *Nature* 356, 168-170.

Um Estudo Quantitativo das Redes Genéticas Aleatoriamente Conectadas.

JOÃO DA COSTA CHAVES JÚNIOR
UNESP - FCL de Assis, IFUSP

CLAUDIO SABURO SHIDA, AMANDO SIUITI ITO
IFUSP

As redes genéticas aleatoriamente conectadas foram concebidas para mimetizar a dinâmica da expressão dos genes de uma célula [Kauffman, S. A. (1969) *J. Theor. Biol.* 22, 437]. Elas podem ser representadas por certos autômatos celulares aleatórios que denominamos Autômatos de Kauffman (AK). Foi desenvolvido um algoritmo de simulação computacional dos AK que explora deterministicamente todas as combinações de estados iniciais, de funções booleanas e dos conjuntos de variáveis que lhes são atribuídas. Isto permitiu a determinação das probabilidades exatas de ocorrência de ciclos estáveis gerados em redes com pequeno número de genes. Para as redes com maior número de genes, a simulação determinística é impraticável, e foram realizadas simulações com um algoritmo de varredura aleatória. Um dos resultados obtidos foi a avaliação da saturação

da população de ciclos estáveis distintos de tamanho fixo que mais ocorrem na rede. Com os resultados dos dois algoritmos, podemos avaliar, por extrapolação, o número de ciclos distintos estáveis gerados por redes maiores. Os resultados indicam que a medida que aumentamos o número de genes, diminui o número de ciclos estáveis repetidos, de modo que esperamos uma distribuição equiprovável deles para redes com muitos genes.

UM MODELO DE REDES NEURONAIS PARA MAPAS CORTICAIS TOPOGRÁFICOS.

ANTÔNIO CARLOS ROQUE DA SILVA FILHO
USP - Ribeirão Preto

Evidências experimentais obtidas em mamíferos indicam que as regiões externas do corpo são mapeadas em regiões bem específicas do córtex cerebral. Os assim chamados mapas corticais apresentam a propriedade de ser topográficos, isto é, regiões vizinhas do corpo são projetadas em regiões vizinhas do córtex. Observa-se ainda nos mapas somatosensoriais a chamada regra da sobreposição percentual, segundo a qual o grau de sobreposição entre os campos receptivos de dois neurônios corticais é inversamente proporcional à distância separando os dois neurônios. O presente trabalho apresenta um modelo matemático de redes neuronais com o intuito de reproduzir tais observações experimentais. O modelo considera duas camadas neuronais: uma de entrada, representando uma região sensorial, e outra de saída, representando uma região do córtex. O comportamento dinâmico dos neurônios e suas sinapses é descrito por equações diferenciais. Porém, como o interesse do trabalho é em modelar propriedades estáticas dos mapas corticais, considera-se as equações no regime de equilíbrio. Em particular, a equação de equilíbrio para os pesos das sinapses recorrentes da camada de saída é escrita com o uso da *averaged learning approximation* de Amari. Esta equação estabelece uma relação entre a sobreposição de dois campos receptivos e o peso da sinapse entre os dois respectivos neurônios corticais, de maneira que pode-se estudar as condições para que as evidências experimentais sejam reproduzidas, com particular ênfase sobre o caso somatosensorial.

Monte Carlo simulation of Dill's model for proteins - effect of different bead movements on correlations.

RAFAEL I. N. SZEINFELD, JORGE L. DELYRA, VERA B. HENRIQUES
IFUSP

Proteins are chain molecules composed of amino acids linked through covalent bonds, presenting (in contrast to homopolymers) a well-defined equilibrium structure

called native, without which they wouldn't be biologically useful. Two questions compose the protein folding problem [1]: how proteins fold so fast to the native state and what's the basis for the stability of this state.

Dill proposed a model [2] based on a heteropolymer composed of hydrophobic and polar monomers on two or three dimensional square lattices where the only favorable interaction is an attraction between hydrophobic residues to account for the hydrophobic effect. Although the model of Dill gives qualitative results in agreement with protein experimental studies it lacks a well-established thermodynamic basis. For example, Dill supposes that the internal energy is equal to the free energy because there's no contact entropy [private communication].

We performed a Metropolis Monte Carlo simulation of Dill's model, in which we have used some additional movements to generate the structures. Besides the non-terminal-one-bead (NTOB) and the crankshaft movements, Dill uses a third movement that changes the orientation of the last bond (LBO) while we rotate all bonds from an arbitrary chosen bond up to the last one keeping fixed the relative orientations among them (RBO).

Since the Monte Carlo kinetics doesn't need to be identical to the real kinetics we are free to choose the movement types. Initial results suggest that the correlation between consecutive configurations falls far more rapidly when the RBO is used instead of the LBO movement. Due to the large size of the phase space it would not be feasible to use a movement which generates highly correlated structures.

In this communication we analyse the differences that may appear in using the RBO movement to compute equilibrium quantities as a first step to enable us to study the free energy question in Dill's model.

[1] "Protein Folding", T.E. Creighton, Ed., W.H. Freeman & Co., NY, 1992.

[2] Dill, K.A. Principles of protein folding- Perspective from simple exact models. Submitted to Protein Science.

ESTUDO DA ESTRUTURA ELETRÔNICA DE DÍMEROS DAS EUMELANINAS

LUZ ELENA BOLIVAR MARINEZ, DOUGLAS SOARES GALVÃO

Universidade Estadual de Campinas - IFGW

MARILIA JUNQUEIRA CALDAS

Universidade de São Paulo - Instituto de Física

As eumelaninas, que geralmente são pretas, ocorrem no reino animal, são derivados da tirosina, 3,4,dihidroxifenilalanina (Dopa) e talvez da 3,4,dihidrofeniletilamina (Dopamina). Exemplos destes pigmentos se encontram na pele, cabelos humanos e em alguns tumores malignos de pele. Tem-se especulado que as melaninas hu-

manas (eumelaninas) poderiam funcionar como desativadores de radicais livres, altamente tóxicos, através de um mecanismo de captura eletrônico [1-2]. Estamos investigando, através de cálculos semi-empíricos, as propriedades geométricas e espectroscópicas de dímeros da molécula 5,6,Indolquinona e de suas formas reduzidas. Nossos resultados mostram que essas moléculas são aceitadoras de elétrons e tem um comportamento eletrônico compatível com um semicondutor orgânico. Um modelo para as funções biológicas das eumelaninas além de fotoproteção é proposto.

[1] D.S. Galvão & M.J. Caldas J. Chem. Phys. **88**, 4088(1988) [2] D.S. Galvão & M.J. Caldas J. Chem. Phys. **92**, 2630(1990)

Suporte Financeiro : CAPES

Simulação Computacional do Folding de Proteínas: Uma abordagem Termodinâmica

LUCILA MARQUES DOS REIS†

F.F.C.L.R.P.-USP-Depto de Física

ANTONIO CALIRI

F.C.F.R.P.-USP-Depto de Física e Química

O *folding* de uma proteína, é um mecanismo complexo em que vários elementos desempenham intrincado papéis. Entender e prever este processo, nos levaria a decifrar a estrutura nativa a partir de sua seqüência de amino ácidos. O modelo de proteína que consideramos aqui consiste de uma cadeia de 27 monômeros, confinados em uma rede cúbica. As complexas interações entre os monômeros, em um meio fluido, são representadas por interações energéticas randômicas:

$$E = \sum_{\{i,j\}} \epsilon_{i,j} (A_{i,j} + A_0),$$

onde $\{i,j\}$ varre todos os pares de monômeros; $\epsilon_{i,j} = 1$ se os monômeros i e j , não consecutivos na cadeia, são primeiros vizinhos na rede; do contrário $\epsilon_{i,j} = 0$. Cada $A_{i,j}$, escolhido de uma distribuição normal, representa a interação entre o par i e j . A_0 representa uma atração média.

Através de Simulação Monte Carlo (*Algoritmo de Metropolis*), discutimos características das seqüências bem sucedidas em relação ao "folding", através de critérios termodinâmicos de estabilidade. Especificamente, verificamos que a maior parte das seqüências, geradas aleatoriamente, não alcança a estabilidade conformacional, requerida no estado "folded". Também calculamos a *atividade configuracional* de cada monômero na cadeia, em função do tempo (Monte-Carlo). No estado nativo, poucos monômeros apresentam atividades configuracionais significativas.

† Endereço Atual: Departamento de Física Aplicada - IFGW - UNICAMP

DINÂMICA MOLECULAR NA INTERFACE ÁGUA/MEMBRANA

PEDRO G. PASCUTTI

Inst. Física-USP/Inst. Biofísica-UFRJ

KLEBER C. MUNDIN

Instituto de Física-UFBA

AMANDO S. ITO

Instituto de Física-USP

PAULO M. BISCH

Instituto de Biofísica-UFRJ

MARÍLIA JUNQUEIRA CALDAS
IFUSP

DOUGLAS SOARES GALVÃO
IFGW-UNICAMP

A dinâmica de peptídeos na interface água/membrana biológica vem sendo simulada através de um "software" em desenvolvimento para esta finalidade. A interface entre esses dois meios é tratada como uma superfície de descontinuidade dielétrica, na presença da qual as interações eletrostáticas intra-moleculares são renormalizadas. Faz-se uso do método das imagens, corrigindo-se o termo coulombiano para levar em conta a contribuição das cargas-imagens, que representam a polarização da superfície entre os dois meios. A energia potencial para uma molécula é calculada para diversas distâncias entre o seu centro de massa e a superfície de descontinuidade. Dependendo da hidrofobicidade da molécula em estudo, sua energia potencial cresce ou diminui quando se vai do meio de alta para o meio de baixa constante dielétrica. Para macromoléculas de caráter anfipático tem-se observado um poço de potencial na região da interface. O perfil de potencial assim obtido depende fortemente do estado de carga e da conformação da macromolécula. Durante a dinâmica molecular a trajetória seguida pela molécula é definida por este perfil de potencial, o qual não se altera significativamente com as pequenas mudanças conformacionais da molécula no decorrer da dinâmica ou na passagem pela interface. A conformação inicial na dinâmica molecular pode então ser considerada como um fator determinante para a migração de uma macromolécula com relação a interface água/membrana. Em outras palavras, a conformação de uma macromolécula tem grande relevância para a sua hidrofobicidade. Uma busca por informações estruturais tem sido efetuada no sentido de obter geometrias iniciais para a dinâmica. Tem se empregado conformações propostas na literatura a partir de dados obtidos por cristalografia, por NMR, por homologia e por cálculos teóricos. Cálculos estatísticos para conformações de pequenos peptídeos tem sido efetuado a partir do método "quenching dynamics". São apresentados resultados para o triptofano, peptídeos anfipáticos e melanotropinas.

DETERMINAÇÃO TEÓRICA DA ESTRUTURA DA MELANINA DE CATECOL

DAVID GREGORIO PACHECO SALAZAR

Departamento de Física, Universidad Nacional de San Agustín, Peru

As melaninas são pigmentos biológicos espalhados por todas as estruturas orgânicas, desde as mais simples como os fungos, até as mais complexas como o Homem. São aparentemente encontrados em todos os níveis filogenéticos. Estão classificadas em três grandes grupos; as eumelaninas, feomelaninas e as alomelaninas. As duas primeiras estão presentes nos organismos animais e a última no reino vegetal, e é mais simples, contendo C, H, O e N, é também conhecida como a *Melanina de Catecol*. Pesquisas mostram que a ortobenzoquinona participa ativamente no processo de formação da melanina de catecol. Nós investigamos o processo de crescimento, tendo como monômero a ortobenzoquinona usando os métodos semi-empíricos MNDO, AM1 e PM3, considerando que a polimerização e feita diretamente sobre os átomos de carbono. Resultados obtidos para os dímeros não mostram uma tendência ao crescimento bem definida, devido as pequenas diferenças na energia total. O dímero não é planar mas com uma barreira de torção muito baixa. O caráter aceitador também foi investigado para o monômero e dímero. O monômero pode aceitar até um elétron enquanto que o dímero pode aceitar até dois elétrons. Não mostram tendência a ser doadores. Cálculos feitos para os dímeros de catecol mostram também que o dímero não é planar, apresentando também barreira de torção muito baixa. O caráter de aceitador está sendo investigada.

Interfaces Bioeletrônicas: Redes Neurais Biológicas Artificiais em Meio Estruturado.

VERA MAURA FERNANDES DE LIMA

Departamento de Engenharia Biomédica/FEE/UNICAMP

MARCO FERRARI, CRISTIANA SCHMIDT DE

MAGALHÃES, MARCOS ANTONIO SCHREINER, LUIZ

ALBERTO CASTRO DE ALMEIDA, ALAÍDE

PELLEGRINI MAMMANA, CARLOS IGNÁCIO ZAMITTI

MAMMANA

Fundação Centro Tecnológico para Informática - Instituto de Microeletrônica - Laboratório de Mostradores de Informação

O propósito desta pesquisa é o desenvolvimento de redes neurais artificiais a partir de neurônios de invertebrados (*Hirudo sp*) mantidos em cultura em veios hidrofílicos sobre matriz hidrofóbica e meio nutritivo, em temperatura controlada. Foram desenvolvidas as primeiras estruturas de teste na forma de canais e poços, de diferentes dimensões e profundidades (na faixa de 50 micra). Para tanto foram desenvolvidas as máscaras e o processo fotolitográfico por via úmida para diferentes substratos, tais como vidro sódio-cálcico e boro-silicato

e silício. Realizada a coleta e a manutenção de sanguesugas, bem como a dissecação dos gânglios e neurônios, foi inicialmente estudada a aderência das células a substratos de vidro sódio-cálcico e boro-silicato, bem como foi observado o crescimento de processos neurais (neuritos), tendo o tempo de observação sido limitado a uma semana. O objetivo final da pesquisa é a criação de redes biológicas artificiais em placas de cultura estruturadas onde elementos biológicos e componentes de microcircuitos poderão interagir e apresentar propriedades emergentes.

DINÂMICA E RUPTURA DE FILMES DE LIPÍDIOS

ELIAS RAMOS DE SOUZA
CEFET-BA

NICE MARIA AMERICANO DA C. COSTA PINTO
UFBA

A dinâmica e a ruptura de um filme de lipídios eletricamente carregado são estudadas através de uma análise não-linear, usada para resolver as equações que governam o movimento de um filme submetido a perturbações de amplitude finita. O modelo do filme adotado é o de uma bicamada lipídica fina imersa num meio eletrolítico. Através de uma abordagem eletrohidrodinâmica, na qual são consideradas as interações de van der Waals, elétrica e estérica como forças volumétricas atuando no sistema, é obtida a equação de evolução das interfaces lipídicas para o modo squeezing. Usando um método perturbativo, no qual se considera que o filme evolui a partir de um estado estacionário espacialmente não-homogêneo - estado de referência - é buscada a solução analítica para um filme com interfaces tangencialmente imóveis. É analisada a influência das não-linearidades no tempo de ruptura do filme para os casos de um filme carregado com densidade superficial de carga constante e potenciais elétricos variáveis. Os resultados mostram que as não-linearidades alteram o comportamento dinâmico e o tempo de ruptura do filme relativamente aos resultados obtidos via a análise de estabilidade linear. A ruptura do filme pode ser acelerada ou retardada, dependendo das intensidades das forças volumétricas e da amplitude inicial da perturbação.

ANÁLISE CONFORMACIONAL DE MSH E DE SEU ANALOGO MSH1

SAUL JACCHIERI
Instituto Butantan
AMANDO S. ITO
Inst. Física-USP

A cadeia polipeptídica de MSH participa da iniciação do processo de pigmentação. Esta relacionada com esta atividade a associação a membranas lipídicas. O análogo estrutural MSH1, que não ocorre naturalmente,

apresenta uma maior afinidade por membranas e uma potenciação da atividade biológica. Resultados de espectroscopia de fluorescência mostram que MSH1 é uma molécula mais rígida do que MSH. Nós determinamos as famílias conformacionais acessíveis aos dois peptídeos e fizemos cálculos de densidade de estados. Os nossos resultados mostram que em uma faixa de 10 Kcal/mol MSH apresenta uma maior densidade de estados do que MSH1, o que está de acordo com a sua maior flexibilidade. Três famílias conformacionais foram determinadas para MSH nesta faixa de energia, sendo que de acordo com os cálculos de densidade de estados as barreiras cinéticas que separam estas famílias são muito pequenas. Os resultados preliminares obtidos para MSH1 mostram a existência de barreiras cinéticas. A maior afinidade de MSH1 por membranas lipídicas estaria associada a estabilização de uma família conformacional, pela presença de uma barreira cinética.

INFLUÊNCIA DA MODIFICAÇÃO ENZIMÁTICA DO GLICOCALIX SOBRE O PERFIL DE POTENCIAL ELÉTRICO DA MEMBRANA DO ERITRÓCITO. Um estudo teórico.

ANDRÉ CALVET, CÉLIA CORTEZ-MAGHELLY
UERJ

Dados experimentais de medidas de mobilidade eletroforética em células tratadas com diferentes concentrações de pronase e neuraminidase (J. Baker et al. Eur. Biophys. 1993, 22:53-62) foram utilizados para o cálculo das cargas superficiais externas da membrana do eritrócito. Esses resultados foram aplicados para a determinação dos potenciais elétricos dependentes do espaço de membranas de eritrócito levando em conta as cargas superficiais da espectrina além daquelas associadas à bicamada lipídica, calculada a partir de dados da literatura. Os cálculos foram feitos pela integração da equação de Poisson-Boltzmann não-linear. Os resultados serão discutidos e comparados com resultados prévios obtidos para modelo mais simples de membrana (Bioelectroch. Bioenerg. 1993, 32:305-315).

ESTUDO DA COMPONENTE MECÂNICA DA TENSÃO SUPERFICIAL DA MEMBRANA DO ERITRÓCITO DO ATRAVÉS DA ANÁLISE HIDRODINÂMICA LINEAR.

KAROL MAIA SOARES, CÉLIA CORTEZ-MAGHELLY
UERJ
PAULO M. BISCH
UFRRJ

A influência da componente mecânica da tensão superficial sobre a estabilidade da membrana foi estudada a partir da equação de dispersão oriunda da análise

hidrodinâmica linear em modos normais, desenvolvida para um modelo que simulava a membrana do eritrócito (C.Cortez-Maghelly e P.Bisch-Bioelectroch. Bienerg. 1993, 32:305-315). Os valores resultantes foram aplicados no cálculo da tensão superficial total (soma das componentes mecânica e elétrica) do eritrócito e este resultado foi comparado com valores apontados

pela literatura para este parâmetro. Verificou-se que os valores sugeridos pela análise hidrodinâmica como valores prováveis para tensão superficial mecânica se mostraram dentro de uma escala compatível com resultados da literatura.

CRESCIMENTO, CARACTERIZAÇÃO E PROPRIEDADES DOS MATERIAIS

Workshop: Propriedades Ópticas de Materiais
(CCP) - 07/06/95

HIGH TEMPERATURE APPROACH OF THE OPTICAL PROPERTIES

PATRICK ECHEGUT, SÉVERINE BLEUX, SYLVAIN CHERMANNE, FRANCOIS GERVAIS

CRPHT-CNRS - Orleans, FRANCE

The technological and research domains which concern the study and the measurement of the thermal-optical properties were quite discarded and often limited to temperature around 1200°C. The reasons are essentially tied to the experimental difficulties to reach high temperatures with reliable conditions, and measure temperature accurately.

The improvement, the elaboration and the application of high temperature materials depend strongly on the knowledge of the microscopic mechanisms which govern the optical properties at high temperature. The best approach consist of the measurement, thus, of the understanding of the spectral data, such as reflectance, transmittance, absorptance and emittance.

Emittance is the only way to reach the optical properties at high temperature (between 1500 e 2000°C). This technique allows to deduce the optical parameters from all type of samples, homogeneous (crystal or glass) or inhomogeneous (ceramics). Nevertheless, for the later ones, the spectral emissivity is no more an intrinsic value, because it depends strongly on the texture of the sample (surface or bulk), particularly for all semi-transparent materials. A good explanation of the emittance spectra involves a good knowledge of the influence of the sample porosity and/or of the thermal gradient.

The different experimental methods, depending on the compound type, are described. The temperature dependence of the dielectric function of oxides, glasses, single crystals or ceramics, deduced from emittance measurements has been investigated in their solid and liquid phases. The mechanisms of the solid-liquid transition are discussed.

ESPECTROSCOPIA MICRO-RAMAN APLICADA AO ESTUDO DE MATERIAIS

MARCOS A. PIMENTA

Departamento de Física - UFMG - Belo Horizonte

GLAURA GOULART

Departamento de Química - UFMG - Belo Horizonte

KAZUO FUZIKAWA

CDTN/CNEN - Belo Horizonte

A espectroscopia Raman vem sendo utilizada no estudo e caracterização de diversos tipos de materiais desde 1928. No início eram usadas fontes de luz convencional como a lâmpada de mercúrio e, devido a fraca intensidade do sinal de luz espalhada, esta técnica era pouco competitiva com relação a espectroscopia de absorção de infravermelho. A invenção do laser no início dos anos 60 alterou profundamente esta situação. A partir daí a espectroscopia Raman passou a ser utilizada correntemente em vários laboratórios de pesquisa. Recentemente, duas novas sofisticacões aumentaram ainda mais as possibilidades de aplicação da técnica; os detetores multi-canais que possibilitam a aquisição simultânea do espectro de luz espalhada e o uso de microscópios ópticos acoplados ao espectrômetro, permitindo uma investigação puntual com resolução lateral e de profundidade da ordem de $1\mu\text{m}$. Apresentaremos e discutiremos alguns resultados obtidos recentemente em diferentes tipos de materiais utilizando o triplo espectrômetro micro-Raman DILOR XY com detetor multicanal GOLD do Departamento de Física da UFMG. Mostraremos resultados do estudo de inclusões fluidas no interior de minerais, uma análise da presença de protons em cristais mistos do tipo $\text{Li}_{(1-x)}\text{H}_x\text{IO}_3$ em função da profundidade na amostra e da direção cristalográfica bem como resultados de investigações da interação ion-ion e ion-matriz polimérica em alguns polímeros condutores iônicos.

ESTUDOS DE TRANSIÇÕES DE FASE ESTRUTURAIS POR ESPALHAMENTO DE LUZ

ROBERTO LUIZ MOREIRA, MARCOS ASSUNÇÃO PIMENTA

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais

JEAN-YVES GESLAND

Université du Maine, UMC, Le Mans, França

As técnicas de espectroscopia óptica, em particular Raman e Infra-vermelho, constituem ferramentas poderosas, elegantes e bastante acessíveis na caracterização das fases cristalinas dos materiais. No presente trabalho nós procuraremos exemplificar a aplicação dos métodos utilizados pelo espectroscopista Raman nos estudos de transições de fase estruturais. O sistema cristalino a ser abordado será o Li_3ThF_7 e os dados apresentados constituem pesquisa original que visa contribuir para o debate acerca de uma transição de fase que lhe é atribuída a 341K. Através de uma análise dos espectros obtidos em geometria de retro-espalhamento Raman, nós mostraremos que a evolução térmica dos espectros é coerente com uma transição de fase tetragonal-ortorrômbica, como recentemente proposto via análise por difração de neutrons, mas que várias divergências aparecem em relação à literatura. Em particular, amostras crescidas pela técnica de Czochralski apresentam temperatura de transição bem mais elevada, e encontramos evidências de outra transição de fase abaixo da temperatura ambiente. Nossos dados são complementados por medidas de birrefringência (in-situ) e de calorimetria (DSC).

Financiamento: FAPEMIG, CNPq e FINEP.

CARACTERIZAÇÃO ESPECTROSCÓPICA DE CRISTAIS DE $BaLiF_3 : Co^{2+}$

MARCOS DUARTE, EVELY MARTINS, SONIA LÍCIA BALDOCHI, NILSON DIAS VIEIRA JR, MARTHA MARQUES FERREIRA VIEIRA

IPEN - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares

Foi feito um estudo do cristal iônico $BaLiF_3$ dopado com duas concentrações do íon de metal de transição Co^{2+} : 0,05 e 0,44 mol%, à temperatura ambiente (300 K) e a 10 K. Ambos os cristais apresentam propriedades espectroscópicas típicas do Co^{2+} em simetria octaédrica pura. A importância desses cristais está no fato de apresentarem emissão na região do infravermelho próximo, sendo então um potencial meio laser ativo, na categoria dos lasers vibrônicos. O $BaLiF_3:Co^{2+}$ possui duas bandas intensas de absorção, na região de 20000 cm^{-1} (500 nm), correspondente à transição ${}^4T_1({}^4F) \rightarrow {}^4T_1({}^4P)$ e na região de 8264 cm^{-1} (1210 nm), correspondente à transição ${}^4T_1({}^4F) \rightarrow {}^4T_2({}^4F)$, com larguras de banda da ordem de 20%, e uma banda mais fraca em 16667 cm^{-1} (600 nm), correspondente à transição ${}^4T_1({}^4F) \rightarrow {}^4A_2({}^4F)$. Este sistema possui uma única emissão na região de 6297 cm^{-1} (1588 nm), correspondente à transição ${}^4T_2({}^4F) \rightarrow {}^4T_1({}^4F)$, com largura espectral (FWHM) de 426 nm, à temperatura ambiente (Apoio financeiro: FAPESP e CNPq/RHAE).

Propriedades e Caracterização I (CCP) - 07/06/95

DINÂMICA DE REDE EM CRISTAIS DO TIPO $Li_{(1-x)}H_xIO_3$.

MARCELO A. S. OLIVEIRA, MARCOS A. PIMENTA, PATRICE BOURSON

Departamento de Física - UFMG Caixa Postal 702 - Belo Horizonte

O cristal $LiIO_3$ tem sido intensamente estudado nos últimos anos, devido a propriedades de óptica não linear e efeitos piezelétricos nele existentes. Os processos de síntese bem como estudos feitos com o ob-

jetivo de aumentar a condutividade em cristais de $LiIO_3$ originaram o estudo de cristais mistos do tipo $Li_{(1-x)}H_xIO_3$, que é uma composição de $\alpha-LiIO_3$ e $\alpha-HIO_3$. O cristal misto $Li_{(1-x)}H_xIO_3$, tem um particular interesse, uma vez que o próton é parte da rede, gerando uma alta condutividade iônica, bem como propriedades ferroelétricas e um grande número de transições de fase. O estudo da dinâmica de rede foi realizado à temperatura ambiente. Medidas de espalhamento de luz usando a técnica micro-raman foram obtidas para alguns valores de concentração x . Para valores entre 0.22 e 0.36, os resultados apontam no sentido de uma estrutura desordenada com simetria média hexagonal. Verificamos ainda a diminuição do caráter anisotrópico com o aumento da concentraç ao

de hidrogênio.

PROPRIEDADES DIELÉTRICAS DO PLZT 9/65/35 SOB AÇÃO DE CAMPO ELÉTRICO d.c.

EVERALDO NASSAR MOREIRA, JOSÉ ANTONIO EIRAS

Universidade Federal de São Carlos

Titanato zirconato de chumbo modificado com lantânio (PLZT), com La entre 5 e 12% e com razão Zr/Ti de 65/35 são relaxores. Relaxores são ferroelétricos que apresentam transição de fase ferro-paraelétrica difusa (TFD), alta dependência da temperatura de máximo da permissividade dielétrica relativa com a frequência, e cuja polarização macroscópica não é mantida, mesmo em temperaturas muito abaixo da temperatura de máximo da permissividade dielétrica. Através do estudo do comportamento da permissividade dielétrica em função da temperatura e da frequência podemos observar como a aplicação de um campo elétrico d.c. influencia nos mecanismos do processo de relaxação da permissividade dielétrica do PLZT 9/65/35. Amostras com composição nominal $Pb_{1-x}La_x(Zr_{.65},Ti_{.35})O_3$, com $x = 0.09$, foram sintetizadas pelo método convencional de mistura dos óxidos. A permissividade dielétrica foi medida em função da frequência e temperatura, aplicando um campo elétrico de: 0, 1, 3, 5, 7 e 10 kV/cm. As frequências medidas foram 100, 200, 300, 500, 700 Hz e seus múltiplos de 10 até 10 MHz. O analisador de impedâncias utilizado, HP 4194A, foi protegido contra a alta tensão e de possíveis quebras dielétricas da amostra, com um circuito contendo capacitores de bloqueio e resistores de limitação de corrente. Os resultados obtidos mostram que a aplicação do campo elétrico reduz a dispersão em frequência, sem alterar o caráter da transição de fase.

EFEITOS LINEARES E NÃO LINEARES NO ADP E SAL DE ROCHELLE

S. G. C. MOREIRA, L. S. G. CANCELA, C. A. ALVES
UFPA

Recentemente, S. G. C. Moreira et al descobriram que cristais de KDP cortados na forma de uma placa usando um sistema de 3 eletrodos são capazes de gerar harmônicos e subharmônicos quando a experiência é feita próxima da temperatura de transição ferroelétrica $T = 122K$. Procuramos investigar se outros materiais ferroelétricos e ou piezoelétricos apresentavam o mesmo efeito. Escolhemos um ferroelétrico já bastante conhecido, o Sal de Rochelle e um piezoelétrico também clássico, o ADP. Na montagem experimental temos um oscilador capaz de gerar sinais senoidais com frequência de até 1 MHz, um osciloscópio e o próprio cristal. Varrendo-se a frequência e mantendo-se as

outras variáveis constantes, percebemos já na temperatura ambiente 22°C os cristais tanto de ADP como de Sal de Rochelle apresentam efeitos lineares do tipo ressonâncias piezoelétricas bem como efeitos não lineares do tipo geração de harmônicos e subharmônicos acústicos. Os sinais foram fotografados e analisados através da FFT. Desta análise foi possível mostrar a presença de harmônicos de ordem 2, 5, 7, 11 etc. A vantagem deste sistema está na simplicidade na obtenção de efeitos complexos. Uma possível explicação está baseada no grande valor das constantes piezoelétricas d_{ijk} que esses cristais possuem. A velocidade do som pode também ser medida a partir da diferença de fase entre os sinais de entrada e saída na amostra.

Propriedades não-lineares em monocristais ferroelétricos

J. F. ARAÚJO

UFPI

J. M. FILHO, F. E. A. MELO, J. E. MOREIRE

UFC

Neste trabalho trataremos do estudo das propriedades lineares e não-lineares em monocristais ferroelétricos tais como KDP e Sal de Rochelle em função do campo elétrico e da temperatura. As medidas foram realizadas através de um sistema composto de um osciloscópio da Tektronix acoplada uma placa GPIB, que transfere os dados medidos para o microcomputador e este os armazena. Com esses dados armazenados podemos analisar nossos resultados através do microcálculo ORIGIN. Um SOFT foi desenvolvido para realizar as transferências dos dados observados no osciloscópio. Através deste SOFT criamos um arquivo de dados dos canais 1 e 2 do osciloscópio, o canal 1 mede os valores do sinal do gerador que joga na amostra e, o canal 2 é a resposta do meu sinal. Com isto criamos um banco de dados armazenados no microcomputador. Este sistema permite de uma maneira rápida e eficiente realizar medidas tais como ressonância piezoelétricas, dobramento de período, geração de harmônicos e sub-harmônicos e caos em cristais ferroelétricos. Mostraremos alguns resultados por nós obtidos em KDP e Sal de Rochelle, na faixa de frequência de 20KHz à 1000KHz.

METODO PARA A DETERMINAÇÃO DA DIFUSIVIDADE TÉRMICA

WASHINGTON LUIZ DE BARROS MELO

UNESP - Ilha Solteira

ROBERTO MENDONÇA FARIA

IFSC - S. Carlos

Este método possibilita obter a difusividade térmica a partir dos sinais fototérmicos versus frequência de modulação. Os sinais fototérmicos são gerados quando a luz modulada incide sobre uma amostra absorvedora

que converte a energia luminosa em energia térmica. A maneira como o calor se propaga, dá informações sobre a amostra, as quais são obtidas com auxílio de um detector. Os sinais detectados podem ser constituídos, basicamente, de três fenômenos: expansão térmica, difusão térmica e flexão termo-elástica. Supomos que a condução de calor na amostra ocorra, predominantemente, através do fenômeno de difusão térmica, e que a detecção do sinal é obtida com o detector em contato direto com a amostra. Assim, uma simples expressão que descreve o fenômeno é obtida e depende da frequência de modulação da luz e da difusividade térmica da amostra, $y(f) = (A/f) \cdot \exp(B \cdot \sqrt{f})$, onde A é a amplitude, B é um parâmetro que depende da difusividade térmica e da espessura da amostra. Considerando uma frequência, f_s , que chamamos de frequência singular, obtemos $y(f_s)$. Normalizando, $Y(f) = y(f)/y(f_s)$, e aplicando o logaritmo natural duas vezes, $\ln(\ln(Y(f)))$, obtemos uma expressão, $Z(f)$, no espaço complexo. Quando $f < f_s$, $Z(f)$ é real e para $f > f_s$, $Z(f)$ é complexo.

Para obtermos a difusividade térmica devemos ajustar esta expressão aos dados experimentais. Com ela só há um parâmetro a ajustar, a própria difusividade térmica. Para isto, aplicamos também $\ln(\ln(\text{Dados experimentais}))$ e obtivemos os ajustes. Com esse método também é possível identificar os outros fenômenos e a região de frequência onde ocorrem, isto possibilita obter com mais precisão a difusividade térmica. Este método foi aplicado com sucesso na obtenção da difusividade térmica de polímeros condutores e de outros materiais. Apoio financeiro: CAPES/FAPESP

Crescimento e Caracterização (CCP) - 08/06/95

DEFECTS IN EPITAXIAL LAYERS

S. MAHAJAN

Department of Materials Science and Engineering, Carnegie Mellon University

Defects in epitaxial layers can be broadly classified in two different categories: (i) growth-process-independent, and (ii) growth-process-dependent; the respective examples are (i) threading dislocations, misfit dislocations, contamination-induced stacking faults and (ii) melt-carry-over pipes, hillocks and oval shaped defects. Mechanistic details will be presented regarding the replication of dislocations whose Burgers vector is either parallel or inclined to the growth surface, the formation of misfit dislocations and the origin of contamination-induced stacking faults. The evolution of hillocks and oval shaped defects during VPE and MBE, respectively, will also be discussed. Results on the influence of defects on device behavior will be presented.

Be incorporation in InP homoepitaxial films

MÔNICA A. COTTA, MAURO M. G. DE CARVALHO,
MÁRCIO A. A. PUDENZI, KIMIE M. ITO-LANDERS,
RICHARD LANDERS, OMAR TESCHKE
*Instituto de Física Gleb Wataghin, UNICAMP, 13083-970,
Campinas, SP*

CHRISTINA F. DE SOUZA
CPqD - Telebras, 13085, Campinas, SP

We present a study on Be incorporation in homoepitaxial InP films grown by Chemical Beam Epitaxy (CBE). Be-doped InP films were characterized by Hall electrical measurements, X-Ray diffraction, secondary ion mass spectrometry (SIMS) and atomic force microscopy (AFM). A saturation in carrier concentration is reached for samples grown at higher temperatures and larger Be fluxes. This behavior is related both to the simultaneous Be incorporation as acceptor and in complex-like forms and to Be rejection to the surface. These two processes lead to alterations in the film morphology, respectively through the formation of oval defects or by oxidation - and the consequent formation of grain-like structures - of superficial Be in films grown with no cap

layer.

HOMOGENEIDADE DOS PARÂMETROS TERMOELÉTRICOS EM CRISTAIS DE Bi_2Te_3 CRESCIDOS PELA TÉCNICA DE BRIDGMAN.

MARIA CLÁUDIA CERCHIARI CUSTÓDIO, SAID R. RABBANI
IF-USP

ANTÔNIO CARLOS HERNANDES, JOSÉ PEDRO ANDREETA
IFSC-USP

Compostos binários como Bi_2Te_3 , semicondutores de gap pequeno e estrutura cristalina em camadas, tem tido suas propriedades muito estudadas devido ao grande potencial desses materiais como dispositivos termoeletrônicos eficientes, para utilização em temperatura próxima à ambiente. Atualmente, estes materiais têm aplicações como precisos controladores de temperatura de lasers de diodo, dispositivos eletromecânicos e sistemas ópticos. A eficiência destes materiais é função

da resistividade elétrica, potência termoelétrica e condutividade térmica. Foram crescidos vários cristais de Bi_2Te_3 tipo-p pela técnica de Bridgman, utilizando-se composições próximas ao ponto de congruência, conforme o diagrama de fase do composto. Fizemos análise axial: de composição química, potência termoelétrica e condutividade térmica. Estamos atualmente, concluindo as medidas de resistividade elétrica. Os resultados obtidos revelam materiais axialmente homogêneos, com valores dos parâmetros muito próximos aos da literatura, o que indica, que nossos cristais devem ser elementos termoelétricos eficientes.

GROWTH OF L-ALANINE CRYSTALS BY CONTROLLED SOLVENT EVAPORATION

J. J. RODRIGUES JÚNIOR
DF-UFC

J. F. CARVALHO, A. C. HERNANDES, F. D. NUNES,
V. S. BAGNATO, S. C. ZILIO
IFSC-USP

J. MENDES FILHO, F. E. DE A. MELO
DF-UFC

Many organic crystals are becoming an important option for practical application for manufacturing waveguides, modulators, filters and others. The majority of these crystals exhibit promising linear, as well as, non-linear properties for example, low refractive index, high electro-optic coefficient and high efficiency on second harmonic generation. However, some problems like as the growing of large single crystals with good optical quality, free of scattering and structural fluctuation and weakness must be overcome. Our groups are studying the growth of many aminoacids (alanine, threonine, lysine, arginine, etc.) and searching how to aggregate convenient radicals ($[\text{PO}_4]^{-3}$) or elements (deuterium) in order to improve the mechanical, thermal and optical quality of the crystals. This work reports on the growth of L-alanine single crystals. This material crystallizes as an orthorhombic, non-centric crystal showing non-linear properties as the second harmonic generation. Organic crystals have low thermal conductivity (order of 10^{-1}W/mK) and high linear thermal expansion coefficient (order of $10^{-5} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$) making them highly sensible to temperature variation and thermal gradient. For these reasons, crystal growth techniques using constant temperature should be preferentially chosen. In this work the L-alanine crystals were grown using the technique of controlled solvent evaporation recently developed in the Group of Crystal Growth of the IFSC/USP. The crystals were grown at constant temperature and accurate rates of solvent evaporation and so, with precise control of growth velocity. The crystals grown under these conditions are transparent, free of macroscopic defects and have well defined morphology. However, cracks have appeared during crystal processing indicating internal stress. To improve the

mechanical performance of the crystal, two procedures are now in course. In the first, crystals are being grown with lower growing rate. The second one is to submit the crystals to thermal treatment at optimized cycles of temperature and time. These results will be reported in another work.

Difração de raios-X no estudo do perfil de tensões em semicondutores implantados

MARCELO ASSAOKA HAYASHI, CÍCERO CAMPOS,
LISANDRO PAVIE CARDOSO

Instituto de Física "Gleb Wataghin" - UNICAMP CP
6165, 13083-970 Campinas-SP

JOSÉ MARCOS SASAKI, LUIZ CARLOS KRETLY
CCS/LED/FEE/UNICAMP Campinas-SP

A simulação de varreduras ω (rocking-curves) utilizando a teoria dinâmica de raios-X, no caso Bragg, permite a análise do perfil de tensões em amostras semicondutoras, submetidas à implantação iônica. No modelo considerado, a amostra é tomada como uma sequência de camadas com tensão constante dentro de cada camada, e a distribuição de tensões variando com a penetração dos íons na amostra. O programa TRIM89 fornece o perfil inicial da distribuição de tensões, que é usado como valor de partida na simulação. O acordo muito bom, obtido na reprodução de resultados presentes na literatura, confirma a validade do modelo considerado. A partir daí, o programa foi utilizado na análise de amostras de GaAs (001) implantadas com íons de Se e Si e permite obter a distribuição de tensões nessas amostras.

Propriedades de Materiais - Modelagem e Simulação (CCP) - 08/06/95

COMPUTER MODELLING OF MOLECULAR IONIC MATERIALS

ROBERT A. JACKSON

Department of Chemistry Keele University, Staffs ST5
5BG, UK

This lecture will describe recent work on computer modelling of molecular ionic materials. These materials, which include carbonates, phosphates, chlorates etc, present particular problems in modelling because their bonding is a mix of ionic and covalent, and any potential model must account for both types of interaction. However, a potential model must be derived before any kind of calculation can be carried out. The model derived uses different functional forms to describe covalent and ionic interactions. The potential parameters are obtained, for each type of material, by empirical fitting to a representative member of each material type. Having derived a suitable potential model,

it can be applied to the calculation of crystal properties. This has been done for calcium carbonate, and a range of phosphates and perchlorates. As well as calculating the lattice properties, predictions have been made of crystal morphology, which is useful in the understanding of crystal growth.

DEFEITOS PRODUZIDOS POR IMPUREZAS DIVALENTES NO $BaLiF_3$

MÁRIO ERNESTO GIROLDO VALERIO, JOSÉ FERNANDES DE LIMA
UFS

ROBERT A. JACKSON
Chemical Department - University of Keele

No presente trabalho estamos investigando as propriedades dos defeitos intrínsecos e dos defeitos gerados pela dissolução de Pb^{2+} e Ni^{2+} na matriz cristalina do $BaLiF_3$ através de técnicas de Simulações Computacionais Estáticas. O $BaLiF_3$ é uma fluorperovskita cúbica invertida com cátions ocupando posições trocadas em relação as perovskitas normais. As simulações computacionais empregadas neste trabalho se baseiam na estratégia de Mott-Littleton através do programa HADES II. Foram consideradas apenas interações entre pares de íons divididas em dois termos: o termo coulombiano de longo alcance e um termo associado às interações de curto alcance da forma de um potencial de Buckingham. Os parâmetros dos termos de curto alcance para as interações envolvendo somente os íons da matriz cristalina do $BaLiF_3$ foram extraídos da literatura de sistemas similares e os parâmetros para as interações que envolvem íons de impureza foram determinados a partir de um método semi-empírico. A polarizabilidade dos íons é incluída via "shell model" nas simulações. Os resultados indicaram que o defeito intrínseco predominante na matriz cristalina do $BaLiF_3$ deve ser o par de Schottky de Li^+ e F^- e o menos provável é o defeito Frenkel do bário. Em relação as impurezas divalentes, os valores das energias de formação indicam uma preferência pela substituição no sítio do lítio mais acentuada para o Ni^{2+} do que para o Pb^{2+} . O mecanismo predominante de compensação de cargas nos dois casos é via F^- intersticiais. No caso do chumbo o flúor intersticial entraria nas proximidades da aresta do cubo enquanto que no caso do níquel, tanto o flúor na aresta do cubo quanto na aresta do octaedro são possíveis. Estes resultados indicam a formação de complexos dipolares com duas possíveis simetrias.

Modelo estatístico para determinação das eficiências de transferência de energia para $(TR^{3+}):YLF$

LUIZ VICENTE GOMES TARELHO, GREGORIO PEREZ PEIRO, LAÉRCIO GOMES, SPERO PENHA MORATO
Supervisão de Materiais Optoeletrônicos - MMO Instituto

de Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN

Um modelo estatístico de distribuição binomial de íons de TR^{3+} no cristal de YLF foi desenvolvido, permitindo a determinação do raio de difusão da energia do nível doador para íons de mesma espécie. A energia migrante se deve a um processo de relaxação cruzada ressonante envolvendo íons de $Er \rightarrow Er$ e $Tm \rightarrow Tm$. Para determinar a eficiência de transferência de energia $Er \rightarrow Ho$ desenvolveu-se um modelo de transferência de energia incluindo primeiramente a rápida difusão entre doadores com posterior transferência para o aceitador Ho. Para isto utilizou-se o raio de difusão entre íons de Er na presença de íons aceitadores (Ho) e o raio crítico de interação doador-aceitador pelo modelo de Förster-Dexter assumindo a interação dipolo-dipolo. Para determinar a eficiência de transferência de energia $Tm \rightarrow Ho$ deve-se levar em conta o processo de retro-transferência $Ho \rightarrow Tm$ para tratamento análogo ao realizado com a transferência $Er \rightarrow Ho$. Utilizando-se a probabilidade efetiva de transferência de energia $Tm \rightarrow Ho$, o sistema comporta-se semelhante ao sistema $Er \rightarrow Ho$. A eficiência de transferência $Er \rightarrow Ho$ obtida do modelo está de acordo com os valores encontrados na literatura. Apoio Financeiro : FAPESP, FINEP.

Modelo para difusão de Titânio em Niobato de Lítio

H. F. SILVA FILHO, F. D. NUNES, J. MENDES FILHO
UFG
 S. C. ZÍLIO
USP de São Carlos

Niobato de Lítio é um material eletroótico de grande interesse na fabricação de dispositivos para guiamento de luz, tais como moduladores e guia de onda. Entretanto a difusão observada em fibras canais apresentam um efeito maior na direção lateral(1) do que na de profundidade. Em um trabalho anterior(2), foi mostrado que no enfoque da troca iônica, usando a equação de Nerst-Plank para descrever a difusão, não surgiu nenhuma anisotropia. Neste trabalho apresentamos os resultados de uma nova abordagem do problema que consiste em supor que a energia de ativação nas duas direções paralelas e perpendicular ao filme de Ti depositado sobre o substrato, são diferentes. Os resultados mostram que o aumento da difusão lateral próxima a região da superfície é causada pela alta concentração de vacâncias provocadas pela saída de Li na forma de Li_2O bem como a entrada de Hidrogênio no sistema pela injeção de água no ambiente do forno durante o processo de difusão. As simulações mostram a existência de anisotropia que é ampliada quando cresce a razão entre as energias de ativação na direção paralela e perpendicular. (1) R. J. Holmes, D.M.Smyth, J. Appl. Phys., 55,pp 3531-3535,1984 (2) Anais do XVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada.

Propriedades e Caracterização (CCP) - 08/06/95

**MEDIDAS DE EFEITO HALL
DEPENDENTE COM A TEMPERATURA
EM CAMADAS EPITAXIAIS**

PbTe/BaF₂/CaF₂/Si

CELSE FERREIRA MASTRELLA

ITA - CTA

LUIZ CARLOS RUSSO, MANOEL FRANCISCO RIBEIRO

E EDUARDO ABRAMOF

LAS - INPE

O interesse no crescimento de compostos semicondutores IV-VI sobre substrato de silício tem aumentado ultimamente devido a possibilidade de se fabricar arranjos de detectores infravermelho integrados monoliticamente ao substrato de Si. Devido a grande diferença nas constantes de rede e nos coeficientes de expansão térmica entre compostos IV-VI e o Si, utilizam-se camadas "buffer" de fluoretos (CaF₂ e BaF₂) para se fazer o casamento destes parâmetros. As camadas de PbTe foram crescidas pela técnica "Hot Wall Epitaxy" - HWE em um câmara de vácuo (10⁻⁷ Torr) contendo reatores HWE para os compostos IV-VI e cadinhos de grafite para evaporação dos fluoretos. A determinação das propriedades elétricas das camadas de PbTe são extremamente importantes para o processo de fabricação do dispositivo infravermelho final. Neste trabalho vamos reportar sobre a implementação de um sistema para medidas de efeito Hall dependente com a temperatura completamente automatizado e a determinação da resistividade, concentração de portadores e mobilidade Hall das camadas de PbTe crescidas. São feitas comparações das características elétricas das camadas de PbTe crescidas diretamente sobre substratos de BaF₂ com aquelas crescidas sobre substratos de Si com camadas intermediárias de fluoretos. Informações obtidas através das curvas de mobilidade em função da temperatura permitem avaliar a qualidade das camadas de PbTe crescidas.

Estudo do Processo de Relaxação Cruzada do Nível ⁵S₂ com a Concentração de Ho³⁺ no YLF

L. C. COURROL, L. V. G. TARELHO, L. GOMES, I.

M. RANIERI, S. P. MORATO

IPEN - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares

A formação de pares de íons de Hólmio em cristais de YLiF₄ altamente dopados, propicia o aparecimento de processos de relaxação cruzada que levam a um "quenching" da luminescência de alguns níveis fluorescentes do Ho³⁺: ⁵S₂, ⁵F₅ e ⁵I₄. Medindo-se o tempo

de vida desses estados excitados para várias concentrações de Ho, pode-se obter informações sobre o comportamento de alguns parâmetros espectroscópicos importantes, como a taxa de desexcitação não radiativa por multifônon (W_i) e a probabilidade de relaxação cruzada P_i. O objetivo deste trabalho foi o estudo do comportamento da probabilidade do processo de relaxação cruzada do nível ⁵S₂ com a concentração de Ho obtido a partir das medidas dos tempos de vida radiativos do nível ⁵F₅ e ⁵S₂ para várias concentrações de Ho e a determinação da probabilidade de decaimento não-radiativo (W_{nr}) em sistemas mais concentrados. Um modelo teórico foi aplicado para interpretar os resultados experimentais.

Estudo dos Processos de Transferência de Energia entre íons de Érbio e Impurezas Moleculares de Oxigênio em Cristais de (LiYF₄) YLF

L. C. COURROL, L. GOMES, I. M. RANIERI, S. P. MORATO

IPEN - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares

A emissão laser em 2067 nm do íon de Ho³⁺ é particularmente interessante. Ela está situada numa região de transparência da atmosfera e possibilita aplicações em telemetria, comunicações, LIDAR e área médica¹. Os íons de Er em concentrações altas (de 35 à 40%) são excelentes íons sensitizadores do Hólmio, transferindo energia de excitação do nível ⁵I_{13/2} (Er) para o nível ⁵I₇ (Ho) e propiciando condições de inversão de população e ação laser eficiente a 300 K em 2067 nm. No entanto essa transferência de energia pode sofrer competição da transferência de energia do Er para impurezas moleculares de oxigênio. Esse tipo de transferência de energia está sendo investigada em detalhes.

¹Q. WANG, S.ZHANG, X. DONG, Journal of Luminescence, 40-41, p 181-182, (1988).

**CARACTERIZAÇÃO DE FERRITAS NiZn
OBTIDAS POR COPRECIPITAÇÃO**

ADRIANA C. PASSOS, ANA CATARINA L. SILVA,

GISELA C. VALENTE, NELCY DELLA SANTINA

MOHALLEM

UFMG

Ferritas são cerâmicas magnéticas, importantes na fabricação de componentes eletrônicos, que requerem alta densidade, baixa porosidade e microestrutura controlada. Na tentativa de se obter materiais com características cada vez melhores, vários processos vem sendo

desenvolvidos, com variações nos tipos de precursores e nas rotas utilizadas, a fim de substituir com vantagens o método convencional. Neste trabalho, partículas ultrafinas e puras de ferritas NiZn, foram obtidas através da coprecipitação de sulfatos metálicos em meio aquoso, por causa da adição de amônia na solução precursora. Os pós cerâmicos foram tratados termicamente e caracterizados através de técnicas de Difração e Fluorescência de Raios X, Absorção Atômica, Espectroscopia Vibracional na Região do Infravermelho e medidas de Magnetização. Foram estudadas as influências da quantidade de amônia adicionada na solução precursora e temperatura de tratamento térmico na estrutura e nas propriedades magnéticas dos pós.

PROPRIEDADES DOS CARVÕES DE TURFA DO ESPÍRITO SANTO EM FUNÇÃO DA TTT

JAIR CARLOS CHECON DE FREITAS, ALFREDO GONÇALVES CUNHA, FRANCISCO GUILHERME EMMERICH
UFES

A turfa é um material carbonoso orgânico parcialmente decomposto, encontrado em locais de alta umidade e baixa salinidade, que se constitui numa excelente matéria-prima energética. O Brasil apresenta uma grande quantidade de turfeiras espalhadas ao longo do território nacional, sendo que o Estado do Espírito Santo detém cerca de 20% das reservas nacionais. Este trabalho reporta as propriedades do carvão de turfa como função da sua Temperatura de Tratamento Térmico (TTT); as carbonizações foram realizadas com taxa de aquecimento, temperatura e atmosfera controladas. As amostras foram caracterizadas com várias técnicas de análises físicas e químicas, objetivando um conhecimento aprofundado das propriedades do carvão de turfa, as quais são fundamentais em termos de sua possível utilização futura. Algumas das vantagens do carvão de turfa são o seu alto rendimento em massa e sua alta densidade aparente (respectivamente 54% e $0,9g/cm^3$ para a TTT de $500^\circ C$), esta última obtida em amostras compactadas sem a utilização de qualquer tipo de ligante. Este trabalho foi financiado pela CVRD (Companhia Vale do Rio Doce).

OBSERVAÇÃO DIRETA EM VARREDURAS $\omega : \phi$ DO EFEITO DA TENSÃO PELO CRESCIMENTO DE CAMADAS InP SOBRE SUBSTRATOS GaAs (100)

LUIS HUMBERTO AVANCI, SÉRGIO LUIZ MORELHÃO,
LISANDRO PAVIE CARDOSO
Instituto de Física 'Gleb Wataghin', Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP
FERENC RIESZ
Research Institute for Technical Physics of the Hungarian Academy of Sciences
K. RAKENNUS, T. HAKKARAINEN
Dept. of Physics, Tampere University of Technology

Neste trabalho, investiga-se o efeito que o crescimento de camadas de InP por epitaxia de feixe molecular a partir de fonte gasosa (GSMBE), causa na rede do substrato GaAs(100), por observação direta do mapeamento bidimensional da condição de difração múltipla de raios-X - a varredura $\omega : \phi$. Esta varredura é obtida para um caso de difração múltipla de três feixes da rede do GaAs, em que o feixe secundário propaga-se paralelamente à superfície do substrato, que é em última análise, a interface do sistema InP/GaAs. As curvas de isointensidade mostram claramente a diferença entre os comportamentos de cristal quase-perfeito (com grandes regiões perfeitas difratantes, onde ocorre extinção primária) para o GaAs maciço, e de cristal mosaico (pequenos blocos mosaicos - extinção secundária) para o GaAs substrato, quando comparadas com as curvas simuladas. Essa diferença de comportamento só pode ser atribuída pelas tensões induzidas sobre a rede do substrato, pelo crescimento da camada.

MEDIDA DA DIFUSIVIDADE TÉRMICA DE PASTILHAS DE POLIPIRROL-PRATA

MARCELO HENRIQUE DE ARAÚJO SANTOS COSTA
UFC
ANTÔNIO CARLOS RODRIGUES DA COSTA
UFPI
ANTÔNIO FERNANDES SIQUEIRA, NILDO LOIOLA
DIAS
UFC

Através da técnica fotoacústica foi feita a medida da difusividade térmica de um sistema constituído por polipirrol condutor-prata. O sistema foi obtido pelo crescimento de polipirrol a partir de solução de pirrol diluído em ácido p-tolueno sulfônico 0.08M. A seguir a prata foi depositada eletroquimicamente sobre o polipirrol tendo este sido usado como eletrodo de trabalho, sendo utilizada uma solução de $AgNO_3$. O aspecto do material indica uma intensa difusão da prata no polipirrol caracterizando o sistema por este ponto de vista como não homogêneo. A medida da difusividade térmica foi realizada por técnica fotoacústica usando uma configuração de célula aberta. Resultados preliminares indicam um valor intermediário entre os valores das difusividades térmicas da prata e do polipirrol. Acreditamos que uma maior homogeneidade do material poderá ser obtida pela deposição por evaporação da prata. Este procedimento se encontra em andamento e

os novos resultados poderão ser comparados aos obtidos anteriormente.

Determinação das Emissões Termoluminescentes de Topázios de Diferentes Origens

DIVANIZIA DO NASCIMENTO SOUZA, JOSÉ
FERNANDES DE LIMA, MÁRIO ERNESTO GIROLDO
VALERIO
UFS

Estão sendo feitas análises das emissões termoluminescentes de topázios provenientes de diferentes regiões de Minas Gerais. Topázio é um fluorsilicato que possui estrutura cristalina ortorrômbica e elevada dureza. Seus cristais são transparentes, variando de incolor a cores pálidas. Separamos as amostras em cinco lotes: a) naturais; b) naturais mais dose adicional de raios gama de cobalto-60; c) amostras submetidas a tratamento térmico a 400°C; d) amostras submetidas a tratamento térmico a 300°C e) amostras que sofreram mais de um tratamento térmico. Os lotes c), d) e e) foram tratados termicamente em forno de atmosfera aberta, tiveram resfriamento rápido ou lento e em seguida receberam dose de radiação gama ou UV. Amostras naturais só apresentam o pico 2 entre 80 e 100°C com maior intensidade e pico 4 entre 150 e 250°C de menor intensidade. Após tratamento térmico e posterior irradiação o pico 4 desaparece e os picos 1, 2 e 3 crescem de intensidade. Amostras irradiadas com UV só apresentam pico 2 com baixa intensidade. Amostras tratadas a 300°C apresentam picos de menor intensidade. Amostras de diferentes origens apresentaram forma e intensidade dos picos diferentes. Utilizando o método de aquecimentos parciais foi identificada a ordem cinética de alguns picos.

Características das curvas TL do CaF₂ com os Fluoretos de Terras Raras (La³⁺, Yb³⁺) e Alumínio (Al³⁺)

ADEILSON PESSÔA DE MELO, JOSÉ F. DE LIMA,
MÁRIO E. G. VALERIO
UFS
ALAN V. CHADWICK
Univ of Kent-UK

O CaF₂, bem como alguns de seus parentes de estequiometria 1:2, possui uma estrutura cristalina onde a distribuição dos íons de cálcio e flúor são tais que formam cubos definidos pelas posições do flúor (F⁻), cujos centros ou são alternadamente vazios ou ocupados pelos íons de cálcio (Ca²⁺). Neste trabalho estamos estudando as emissões TL de amostras de CaF₂ puras e dopadas com AlF₃ e LaF₃ na proporção de 0,1mols % de cada impureza na mistura. As amostras foram crescidas pelo método de Stockbarger no Departamento de Química da Universidade de Kent em

Canterbury (Inglaterra). Depois de pulverizadas e selecionadas granulometricamente as amostras foram divididas em 5 lotes: i.) amostras sem qualquer tratamento térmico; ii.) amostras com dose de 200 Gy do ⁶⁰Co; iii.) amostras tratadas termicamente a 600°C / 10 min e submetidas a uma dose de 200Gy do ⁶⁰Co; iv.) amostras expostas a luz visível e v.) amostras tratadas termicamente a 600°C/ 10 min e submetidas a iluminação com luz U.V por 1h. Identificamos basicamente 3 conjuntos de picos nestas amostras em torno de 50, 130 e 170°C. Os tratamentos térmicos seguidos de irradiação ou iluminação modificam as intensidades relativas destes picos.

Influência da presença do Mg sobre a emissão termoluminescente da calcita

GIVANILDO OLIVEIRA MARTINS, MÁRIO ERNESTO
GIROLDO VALERIO, JOSÉ FERNANDES DE LIMA
UFS

A calcita é um mineral que apresenta forte emissão termoluminescente (TL). O número dos picos TL e a intensidade relativa dos mesmos depende da origem geológica e da quantidade de impurezas presentes nas amostras. A maioria dos trabalhos realizados com a termoluminescência da calcita têm sido direcionados para aplicação na datação geológica ou arqueológica e somente uns poucos têm estudado o entendimento do mecanismo de emissão. A emissão de cor alaranjada (620nm) tem sido atribuída a transição do Mn²⁺ desde o estado excitado para o estado fundamental. Em trabalhos anteriores propusemos que centros de armadilhamentos deveriam ter sido atribuídos aos centros de elétron Co₃³⁻ e CO₂. Neste trabalho estudamos a emissão TL da calcita sintética dopada com diversas concentrações de Mn e Mg encontramos que os picos em torno de 230°C dependem fortemente da presença do magnésio indicando que essa impureza deve funcionar como estabilizador dos centros de armadilhamento.

Propriedades e Caracterização II (CCP) - 09/06/95

TRANSIÇÕES DE FASE EM MONOCRISTAIS DE L-ASPARAGINA

A. J. D. MORENO
UFMA
J. MENDES FILHO, F. E. A. MELO, J. E. MOREIRA,
F. D. NUNES
UFC
A. SANJURRO
Unicamp

As amostras de monocristais de asparagina monohidratada foram crescidas por evaporação controlada de solução supersaturada com 2,1g de soluto para cada 100g de água a 5°C. Estes cristais cristalizam-se em estrutura ortorrômbica pertencente ao grupo D_2^4 com quatro moléculas por célula unitária ocupando sítios $C_1(4)$. A evolução dos espectros Raman polarizados em função da temperatura revelam a existência de duas transições de fase ocorridas, uma entre 120 e 160K e a outra próxima a 250K. O pico referente à deformação angular da estrutura N-H...O, que ocorre na representação B_1 do grupo pontual D_2 , sofre diminuição de intensidade entre 40 e 80K e desaparece completamente a 120K. Ainda neste intervalo de temperatura, é observado dois fatos que evidenciam a existência de uma transição de fase. O primeiro é o surgimento de uma vibração correspondente à deformação da estrutura C-NH₃⁺ na representação B_1 e o segundo, é o desaparecimento de picos referentes a vibrações da estrutura COO⁻ nas representações A e B_1 do grupo D_2 . Os espectros Raman entre 240 e 300K mostram dois eventos significativos. Um deles é o desaparecimento de dois modos translacionais com frequências 86 e 91 cm⁻¹ da representação B_1 do grupo pontual D_2 e o segundo é o surgimento de um pico com 124cm⁻¹ na representação B_1 no mesmo intervalo de temperatura. Esta transição de fase foi observada também em medidas de constante dielétrica. Ambas as transições se apresentam, segundo os espectros Raman em função da temperatura, como sendo de segunda ordem, não destrutivas, reversíveis e sem histerese térmica. Estas transições devem estar ligadas a desordem intrínseca nos sítios dos íons COO⁻ e NH₃⁺ ligados por pontes de hidrogênio. Nossos estudos revelam a existência de sítios C_1 não equivalentes onde jazem estes íons, provocados por aumento do stretching da ponte de hidrogênio com o abaixamento da temperatura. Os espectros Raman polarizados revelam desdobramentos dos sítios ocupados pelos íons de COO⁻ e NH₃⁺, com mudanças nos modos de dobramento destes íons.

Parâmetros microscópicos de transferência de energia entre íons de terras-raras no cristal de YLF.

LUIZ VICENTE GOMES TARELHO, LILIA CORONATO COURROL, LAÉRCIO GOMES, SPERO PENHA MORATO

Supervisão de Materiais Optoeletrônicos - MMO Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN

Os mecanismos de transferência de energia entre os primeiros estados excitados dos íons de Er, Tm e Ho podem ser avaliados através da determinação dos parâmetros microscópicos de interação: C_{D-D} , C_{D-A} , C_{A-D} (cm⁶/s) e R_C (raio crítico de interação). Existem vários processos de transferência de energia sendo classificados de acordo com tipo de interação: Re-

laxação Cruzada: Er→Er, Tm→Tm e Ho→Ho. Processos de transferência de energia não radiativa: ressonante: Tm→Ho não ressonante: Er→Tm e Er→Ho. Processos de retro-transferência de energia não radiativa: ressonante: Ho→Tm não ressonante Ho→Er e Tm→Er. Esses parâmetros foram obtidos utilizando-se o método de Förster-Dexter que se baseia principalmente na integral de overlap entre as secções de choque de emissão do doador e absorção do aceitador. A secção de choque de emissão para cada íon foi obtida espectralmente relacionando-a com a secção de choque de absorção e a distribuição de Boltzmann; relação desenvolvida por McCumber e aplicada nas terras-raras por Payne. As constantes C_{D-A} para as interações Er→Ho e Er→Tm foram obtidas utilizando-se uma modificação na teoria existente incluindo a probabilidade de criação de fônons no processo, viabilizando a transferência de energia. Apoio Financeiro: FAPESP, FINEP.

ESTUDOS DE TRANSIÇÕES DE FASE EM CRISTAIS $LiK_{1-x}Rb_xSO_4$ POR ESPECTROSCOPIA RAMAN

ARIETE RIGHI, MARCOS ASSUNÇÃO PIMENTA, ROBERTO LUIZ MOREIRA

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais

PATRICE BOURSON

MOPS, Université de Metz - SUPELEC, Metz, França

A despeito da similaridade de suas fórmulas químicas, os sulfatos da família $LiASO_4$, onde A é um cátion alcalino (Li, K, Na, Rb e Cs), apresentam sequências de transições de fase absolutamente diferentes. Entre eles, os compostos puros $LiKSO_4$ e $LiRbSO_4$ são os mais estudados, por apresentarem as sequências de fase mais interessantes. Em particular, estes cristais podem apresentar, para certos intervalos de temperaturas, fases superiônicas, piroelétricas e ferroelásticas. Por outro lado, acredita-se que ambos possuam também fases incommensuráveis a altas temperaturas. Recentemente nós iniciamos um estudo sistemático de compostos mistos do tipo $LiK_{1-x}A_xSO_4$, com o intuito de investigar a influência da presença aleatória de cátions de tamanhos diferentes e da desordem composicional sobre as propriedades físicas dos cristais. Nós focalizamos agora o sistema $LiK_{1-x}Rb_xSO_4$, o qual se mostra bastante adequado a estas investigações por formar soluções sólidas em todo o intervalo de concentrações x. Monocristais de $LiK_{1-x}Rb_xSO_4$ foram crescidos a 313K, para x igual a 0,1, 0,2 e 0,5, por evaporação lenta de soluções aquosas saturadas. As concentrações dos diferentes cristais foram confirmadas por Fluorescência de Raios-X. Amostras de boa qualidade óptica foram analisadas por Espectroscopia Raman, para temperaturas entre 80 e 300K. Uma análise da dependência térmica dos espectros mostra a existência de transições de fase

análogas àquelas do sistema puro (sem *Rb*). Os resultados mostram que, amostras contendo 20% ou menos de *Rb* se cristalizam diretamente na estrutura hexagonal $P6_3$ do $LiKSO_4$, enquanto o cristal com 50% de *Rb* apresenta provavelmente a estrutura trigonal $P31c$. Ao resfriar o material, observamos um aumento na temperatura de transição hexagonal-trigonal e um abaixamento na temperatura de transição ferroelástica com o aumento da concentração de *Rb*.

Financiamento: FAPEMIG, CNPq e FINEP.

MECANISMOS DE DESEXCITAÇÃO DE CRISTAIS DE $BaLiF_3 : Co^{2+}$

MARTHA MARQUES FERREIRA VIEIRA, MARCOS DUARTE, EVELY MARTINS, SONIA LÍCIA BALDOCHI, NILSON DIAS VIEIRA JR

IPEN - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares

Foram estudados os mecanismos de desexcitação do estado ${}^4T_2({}^4F)$ para um novo candidato a meio laser ativo: $BaLiF_3 : Co^{2+}$. Esse cristal apresenta um grande potencial como meio laser ativo quando dopado com íons de metais de transição. Observou-se que em baixas temperaturas o tempo de decaimento é constante e acima de 80 K decresce rapidamente. Este decréscimo é atribuído a processos não radiativos resultantes de um processo de emissão de fônons em cascata, do estado vibracional excitado do nível fundamental ${}^4T_2({}^4F)$ para o estado vibracional altamente excitado do nível fundamental ${}^4T_1({}^4F)$. O tempo de decaimento em função da temperatura foi ajustado segundo o modelo de Mott-Seitz e uma excelente concordância foi obtida, sendo determinados os seguintes parâmetros: tempo de vida radiativo, $\tau_R=580 \mu s$, tempo de vida não radiativo, $\tau_{NR}=0,17 \mu s$ e energia de ativação, $\Delta E=587 \text{ cm}^{-1}$ (Apoio financeiro: FAPESP e CNPq/RHAE).

As funções de quase-equilíbrio e de ordem de cinética para fenômenos termicamente ativados- da teoria à prática

MARCELO BARROS ALMEIDA, PIOTR TRZESNIAK
Departamento de Física e Química Escola Federal de Engenharia de Itajubá

Fenômenos termicamente ativados em materiais vêm sendo discutidos desde os meados dos anos 40, quando Randall e Wilkins e Garlick e Gibson, buscando explicar a luminescência termicamente ativada (TAL), escreveram as variações de populações dos estados envolvidos no processo (metaestável, ativado e estável) como somas algébricas de produtos de três fatores (a probabilidade de transição e as duas populações respectivamente envolvidas). Um segundo tratamento, em que os mesmos produtos apareciam em um contexto de condutividade elétrica termicamente ativada (TAC)-velocidades de portadores, seções de choque, tempos de relaxação foi empregado vinte anos depois por Saunders

e por Bube. A solução das equações envolvia, nas duas situações, as drásticas hipóteses de quase-equilíbrio e de ordem de cinética. Lewandowski e McKeever, em uma série de artigos (92-94), vieram inovar significativamente ao substituir as hipóteses drásticas por funções capazes de variar durante o desenrolar do processo. Foram assim introduzidas as funções de quase-equilíbrio $Q(T)$ e de ordem de cinética $P(T)$, que aqueles autores geram numericamente com base em um conjunto de variáveis de Saunders e Bube. O objetivo deste trabalho é analisar a utilização experimental das funções $Q(T)$ e $P(T)$, que são calculadas e interpretadas com base apenas em informações macroscópicas, sem passar pela parametrização microscópica de McKeever e Lewandowski. Nesta linha, diversas famílias de intensidades de luminescência e de correntes elétricas são examinadas em termos de $Q(T)$ e $P(T)$, bem como de taxas de recombinação, de recaptura e de liberação.

Crescimento e Caracterização (CCP) - 09/06/95

ENTALPIA DE UMA LIGA BINÁRIA DURANTE O CRESCIMENTO BRIDGMAN

MAURÍCIO FABBRI

*Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE
Universidade São Francisco - USF*

O transporte de massa e energia durante a solidificação de cristais binários é tratado por uma técnica implícita de volumes de controle, que leva em conta uma formulação termodinâmica explícita para a entalpia, em termos dos campos de temperatura e concentração. As soluções numéricas são obtidas sobre uma rede de discretização fixa, sendo que o tamanho dos volumes de controle é adequado para uma comparação direta com os resultados experimentais disponíveis. A modelagem pelos volumes de controle permite que se descreva adequadamente a liberação de calor na interface líquido-sólido. As equações acopladas de energia e massa são tratadas por um eficiente esquema de iterações baseado no comportamento local da função de entalpia inversa. Resultados são obtidos para o telureto de chumbo-estanho a 20% de concentração molar, e para ligas hipoeutéticas de estanho-chumbo. As variações da entalpia volumétrica na interface, e do calor latente liberado, indicam que os modelos tradicionais, baseados apenas no calor específico e/ou em valores constantes para o calor latente, podem se mostrar inadequados para uma descrição quantitativa dos campos de temperatura/concentração durante o crescimento Bridgman de compostos IV-VI.

BLAST-FURNACE SLAG GLASSES: AN OPTICAL ABSORPTION SPECTROSCOPIC STUDY

ERVINO CARLOS ZIEMATH

Departamento de Física, IGCE, UNESP, Rio Claro (SP)

CÁTIA FREDERICCI, EDGAR DUTRA ZANOTTO

Departamento de Engenharia de Materiais, UFSCar, São Carlos (SP)

Blast-furnace slag glasses were synthesized through the conventional method of fusion in an electric furnace, at temperatures about 1500°C. The starting slag has a composition of about (in wt%) 35.8 SiO₂, 11.8 Al₂O₃, 43.5 CaO, 6.21 MgO, 0.29 Fe₂O₃, 0.81 TiO₂, 0.82 S, 0.53 K₂O, 0.67 MnO and smaller concentrations of Na₂O and P₂O₅. Glasses were prepared in platinum and ZAS crucibles. The glass melted in platinum crucible presents a more dark amber coloration than the glass melted in ZAS crucible. Optical absorption spectra of both glasses are very similar, with a band at about 460 nm, generally attributed to the ferric ion, Fe³⁺. The intentional addition of about 5 wt% of ZrO₂ to the slag and melting the batch in a ZAS crucible results in a transparent and clear greenish color glass. Its absorption spectrum presents a broad and low intensity band at about 1000 nm, typical of the ferrous ion, Fe²⁺. Slag glass with addition of about 1 wt% of Cr₂O₃ also melted in a ZAS crucible, presents an amber-greenish coloration. Its absorption spectrum presents a shoulder at about 650 nm which can be due to the superposition of the absorption bands of the Fe³⁺ and Cr³⁺ ions, and a more intense band at 360 nm, probably due to chromate ions, CrO₄²⁻. The most pronounced changes in the spectra can be explained in terms of the oxidizing atmosphere during melting, the reduction effect of the ZrO₂ and the redox reactions during the melting due to the presence of about 0.6 wt% of manganese and sulfur in the starting slag. Financial support: CNPq (Grant No 142870/92-7)

OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO DE OBTENÇÃO DO BaLiF₃ PURO E DOPADO COM METAIS DE TRANSIÇÃO PARA APLICAÇÕES ÓPTICAS

A. M. DO E. SANTO, S. L. BALDOCCHI, S. P. MORATO

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

Neste trabalho foi desenvolvido o processo de obtenção do composto ternário BaLiF₃ puro e dopado com níquel ou cobalto, visando o crescimento de monocristais com qualidade óptica e cristalina para aplicações laser. Foram determinadas as condições ideais de síntese através do método de hidrofusão para obtenção

dos fluoretos-base e do composto puro e dopado. Através do método de refino por zona foram determinados os parâmetros experimentais para a purificação deste composto. Foi ainda, realizado um estudo do aproveitamento do lingote obtido à partir de diversas composições não estequiométricas de BaF₂:LiF, de acordo o diagrama de fases. A caracterização dos reagentes comerciais utilizados e dos produtos obtidos foi feita à cada etapa do processo pelas técnicas de termogravimetria, espectrografia de emissão atômica, difração de raios-X e espectroscopia de absorção óptica no infravermelho. Os resultados obtidos são apresentados e discutidos para cada método de caracterização utilizado. À partir do material produzido neste processo, foram crescidos monocristais com boa qualidade óptica.

MEDIDA DO PERFIL DE TEMPERATURA AXIAL DURANTE O CRESCIMENTO DE FIBRAS MONOCRISTALINAS PELO MÉTODO LHPG.

MARCELLO RUBENS BARSÍ ANDREETA, ANTONIO C.

HERNANDES, CLAUDIO J. LIMA, ERIKA REGINA

MANOEL, MARIA C. C. CUSTÓDIO, JOSÉ P.

ANDREETA

IFSC-USP

Recentemente, fibras monocristalinas estão emergindo como um novo componente com potencialidade para substituição dos substratos planares e volumétricos em dispositivos de estado sólido. A rapidez dos processos de preparação, 60 vezes mais rápidos que os processos convencionais de preparação de monocristais, o seu baixo peso e custo, a sua forma geométrica e a sua flexibilidade para pequenos diâmetros são convenientes para a utilização em dispositivos como guias de onda, geração de segundo harmônicos, produção de componentes ativos de minilasers de estado sólido, dispositivos eletro e acústico-óticos, fibras supercondutoras de alta temperatura crítica, etc.. Porém, para que esta substituição seja possível, devemos obter fibras monocristalinas com qualidade óptica e estrutural semelhante ou superior aos cristais que elas substituirão. A mais versátil técnica de produção de fibras monocristalinas é conhecida como zona flutuante com aquecimento a laser-LHPG. Esta técnica é caracterizada pelo alto gradiente térmico e pelas altas velocidades de crescimento. Até o presente momento, poucos trabalhos foram dedicados ao estudo do gradiente térmico em fibras monocristalinas. Neste trabalho, a medida do perfil de temperatura durante o crescimento de fibras monocristalinas será mostrado e discutido, baseado em modelo de fluxo de calor na interface de crescimento.

SÍNTESE DE FOSFETO DE ÍNDIO PELO MÉTODO DE SÍNTESE POR DIFUSÃO DE SOLUTO (SSD).

CLAUDIO RONALD MISKYS, CLÓVIS EDUARDO MAZZOTTI DE OLIVEIRA, MAURO MONTEIRO GARCIA DE CARVALHO
UNICAMP - IFGW - DFA - LPD

Foi desenvolvido um sistema de síntese de Fosfeto de Índio (InP) pelo método de Síntese por Difusão de Sóluto (SSD). Este sistema, que tem a vantagem de operar à baixa pressão de Fósforo (1 a 3 atm), fornecerá tarugos policristalinos de InP com baixa densidade de portadores (da ordem de 10^{15} cm^{-3}) para serem utilizados como matéria prima para o crescimento de monocristais de InP por Liquid Encapsulated Czochralski (LEC). Detalhes do sistema, da técnica de preparação das amostras e os resultados já obtidos serão apresentados neste trabalho.

IMPLANTAÇÃO DE UM SISTEMA DE CRESCIMENTO DE TARUGOS MONOCRISTALINOS DE COMPOSTOS III-V POR LIQUID ENCAPSULATED CZOCHRALSKI (LEC).

CLÓVIS EDUARDO MAZZOTTI DE OLIVEIRA, MAURO MONTEIRO GARCIA DE CARVALHO
UNICAMP - IFGW - DFA - LPD

Uma série de crescimentos de tarugos monocristalinos de GaAs foi realizada para caracterização e calibração de um sistema LEC à alta pressão recém adquirido com recursos da FINEP/PADCT II. As amostras são tipicamente tipo N, com concentração de portadores da ordem de 10^{17} cm^{-3} , EPD da ordem de 1000 cm^{-2} , 150g de massa, 25mm de diâmetro e orientações $\langle 111 \rangle$ $\langle 100 \rangle$. Neste trabalho serão apresentados detalhes da técnica de crescimento, do sistema de puxamento e caracterização das amostras.

PROPRIEDADES TERMICAS E HABILIDADE FORMADORA DE VIDRO NO SISTEMA PbO-TeO₂-TiO₂

RAUL F. CUEVAS, LUIZ C. BARBOZA, VICTOR C. S. REYNOSO, NORBERTO ARANHA, CARLOS L. CESAR
IFGW / UNICAMP
OSWALDO L. ALVES
IQ / UNICAMP

Vidros a base de óxido de telúrio possuem propriedades interessantes desde o ponto de vista fundamental e que são importantes para aplicações práticas; particularmente para os vidros do sistema PbO-TeO₂-TiO₂ a susceptibilidade não linear de terceira ordem alcança valores em torno de 10^{-12} esu , sendo este valor o maior entre os vidros óxidos até o presente momento. Foram preparados vidros da família $x\text{PbO} - (90-x)\text{TeO}_2\text{-TiO}_2$ (PTT) com $x = 5, 10, 15, 20$ e 25 mol\%

As diferentes temperaturas características dos materiais vítreos, assim como o coeficiente de expansão térmica foram medidos utilizando a análise térmico diferencial (DTA) e a dilatométrica. Foi observado que a temperatura de transformação vítrea T_g diminui linearmente com a variação na composição no rango entre 367 e $317 \text{ }^\circ\text{C}$; por sua vez, o coeficiente de expansão térmico aumenta linearmente quando varia a composição. A diminuição em T_g geralmente indica uma estrutura mais aberta, entanto que, o aumento linear no coeficiente de expansão térmico indica ligações mais fracas. Este resultado tem sido interpretado como uma consequência da formação de oxigênios não ligados. As curvas DTA para este sistema de vidros mostra que a temperatura de transição vítrea é seguida por mais de um pico exotérmico o que corresponderia à formação de diferentes fases cristalinas. O primeiro pico exotérmico pode ser atribuído ao processo de nucleação seguido pela formação de uma fase cristalina com baixa energia interna livre; o segundo pico nas altas temperaturas é atribuído à formação de uma outra fase cristalina mais relaxada. A habilidade formadora de vidro e a estabilidade vítrea são importantes para aplicações tecnológicas. Nos calculamos a habilidade formadora de vidro usando o critério de Hubry e a estabilidade vítrea que é definida como uma medida da resistência à desvitrificação pela relação $\Delta T = T_x - T_g$. Estes resultados são discutidos em relação à estrutura vítrea deste materiais.

PREPARAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE FILMES POLICRISTALINOS DE SELENETO DE CÁDMIO

JOÃO GUILHERME NOGUEIRA MATIAS
UFC
JOSÉ FRANCISCO JULIANO
UNIFOR

Filmes policristalinos de seleneto de cádmio foram crescidos por eletrodeposição catódica a partir de uma solução contendo SeO_2 (10mM), CdSO_4 (0,1M) com pH ajustado com H_2SO_4 (1M). A caracterização dos mesmos foi feita por difração de raios-x e por métodos eletroquímicos (espectroscopia fotoeletroquímica e medidas de capacitância diferencial). O eletrólito usado nos métodos eletroquímicos foi o polissulfeto (KOH, Na_2S e S) na razão 1:1:1 para as molaridades. A partir das curvas de voltametria cíclica (I vs V) determinamos o potencial ideal de crescimento dos filmes de CdSe ($V = -0,6 \text{ V vs ESC}$). O tamanho dos grãos monocristalinos foram determinados através da fórmula de Scherer e variaram de 7 a 30 nm. Das curvas Mott-Schottky ($1/C^2$ vs V) foram determinados o valor do potencial de banda plana e a densidade de doadores, como sendo, respectivamente, $V_{fp} = -1,6 \text{ V vs ESC}$ para a frequência de 500 Hz e $N_d = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$. A partir das curvas de I vs λ , foi determinado que o filme de CdSe apresenta

transição ótica direta com energia proibida da ordem de 1,76 eV.

FINANCIAMENTO: CAPES

Preparação e Caracterização de Carbono Ativado para Adsorção de gases

LEONARDO CABRAL GONTIJO, LEONARDO LIMA GOMES, ALFREDO GONÇALVES CUNHA, FRANCISCO GUILHERME EMMERICH

UFES

Foram preparados dois grupos de carbonos ativados tendo como precursor o endocarpo do coco da Bahia. No primeiro grupo foi feita uma carbonização e em seguida a ativação, utilizando-se tempos de residência na temperatura de ativação de 4, 8 e 24 horas. No segundo grupo fez-se a ativação simultaneamente à carbonização, utilizando-se um tempo de residência fixo de 2 horas. As temperaturas de carbonização e ativação variaram de 200 a 900 °C e a taxa de aquecimento foi de 5 °C/min. A carbonização foi feita com um fluxo controlado de nitrogênio. A ativação foi feita com vapor d'água carregado por um fluxo de nitrogênio. No processo de ativação o vapor d'água reage com a amostra eliminando CO e H₂, proporcionando então uma queima seletiva no interior do material, realizada por meio da gaseificação parcial da amostra. É durante o processo de ativação que há o aumento da microporosidade da amostra e conseqüentemente de sua área superficial interna. Foram obtidas áreas superficiais de cerca de 1000 m²/g nas amostras tratadas em torno de 850 °C. As análises das áreas superficiais das amostras foram feitas através do método BET, através da adsorção de nitrogênio à 77 K. Trabalho financiado pelo Fundo de apoio a Ciência e tecnologia (FACITEC) do Município de Vitória.

ESTABILIDADE TÉRMICA EM CERÂMICAS DE PZT PURAS E DOPADAS.

JAMILSON PINTO DE MEDEIROS, JOSÉ ANTÔNIO

EIRAS

UFSCar

Neste trabalho investigamos cerâmicas de PZT dopadas com elementos doadores e aceitadores, polarizadas à temperatura ambiente, 80 e 120°C, pela aplicação de

um campo elétrico dc de 3 kV/mm durante 30 minutos. Medidas de estabilidade térmica no intervalo de temperaturas entre -60 à +60°C são apresentadas para a constante de frequência e o fator de acoplamento no modo planar. Os resultados apresentaram coeficientes de temperatura negativos ou positivos, dependendo do tipo de dopante utilizado, em cerâmicas com simetrias romboédrica e tetragonal, respectivamente.

Estudo dos Parâmetros Determinantes do Tamanho dos Cristais de Calcita Produzidos pelo Método de precipitação

LUÍZ AUGUSTO CARVALHO SOBRAL, GIVANILDO OLIVEIRA MARTINS, MÁRIO ERNESTO GIROLDO VALÉRIO, JOSÉ FERNANDES DE LIMA

UFS

Existe interesse no conhecimento das propriedades termoluminescentes da calcita devido ao fato de que as medidas de termoluminescência permitem a determinação da idade de formações geológicas e de fósseis. O entendimento do mecanismo de emissão termoluminescente de um material fica bastante facilitado quando conseguimos produzir esse material artificialmente mantendo um rigoroso controle sobre os tipos e quantidades das impurezas. O método de precipitação constitui-se numa forma eficiente de se produzir soluções sólidas e baseia-se em reações com formação de compostos pouco solúveis. Estas reações devem se processar de forma quantitativa, completarem-se em um determinado tempo e oferecerem condições ótimas para uma boa precipitação. Neste trabalho produzimos microcristais de calcita a partir da reação de precipitação envolvendo as soluções de (NH₄)₂CO₃ e CaCl₂. Estudamos o efeito da temperatura e encontramos que a temperatura em torno de 29°C favorece a formação de calcita enquanto que a faixa entre 50°C e 70°C favorece a formação de aragonita. Variamos a velocidade da reação e encontramos que o processo de gotejamento aumenta o tamanho dos cristais. Encontramos que o pH em torno de 9,0 favorece o crescimento de cristais de calcita e estudamos a variação do tamanho final dos microcristais em função da razão das concentrações das soluções envolvidas.

CRISTALOGRAFIA

Saxs, Exafs, Cristalografia Inorgânica (CRI) - 07/06/95

ESTUDO POR SAXS DA INFLUÊNCIA DO CONTEÚDO DE Cd E DA DOSE DE Se NA FORMAÇÃO DE MICROCRISTAIS DE CdSe EM XEROGÉIS DE SÍLICA

DANIELE C. A. HUMMEL, IRIS L. TORRIANI
*Instituto de Física 'Gleb Wataghin', UNICAMP,
Campinas, SP, Brasil*

ALDO CRAIEVICH
*LNLS/CNPq, Campinas, SP e IFUSP, São Paulo, SP,
Brasil*

NICOLÁS DE LA ROSA-FOX
*Instituto de Física, Universidade de Cadiz, Puerto Real
(Cadiz), Espanha*

ALINE Y. RAMOS
LMCP-CNRS, Paris, França

Foi feito um estudo mediante espalhamento de raios-X a baixos ângulos (SAXS) de um material composto formado por uma matriz porosa (xerogel de sílica com adição de formamida e uso de ultra-som) e micropartículas de CdSe. O Cd é adicionado no processo de formação do xerogel e o Se é incorporado por difusão no xerogel já formado. As concentrações de Cd foram de: 1, 5 e 10 % (em peso). Os resultados de SAXS correspondentes às amostras sem Se indicam uma estrutura com heterogeneidades que possuem uma distribuição de tamanhos bimodal. Estas heterogeneidades foram associadas à existência de dois tipos de porosidade (microporos e mesoporos). Os microporos têm um raio médio da ordem de 20 Å que tende a decrescer com o aumento do conteúdo de Cd. Devido às características ópticas das amostras com baixa dose de Se, assumimos que estas contêm, além dos micro e mesoporos, microcristais de CdSe. No caso de alta dose de Se, concluiu-se pela existência de microcristais maiores que para baixa dose e com raio de giro crescente para concentrações de Cd crescentes (de 45 para 55 Å). Serão também apresentados resultados experimentais de espalhamento anômalo de raios-X correspondentes a amostras com alta dose de Se. Estes resultados serão utilizados na discussão da consistência do modelo estrutural clássico proposto.

EVOLUÇÃO DA FASE NANOCRISTALINA NA LIGA MAGNÉTICA Fe-Cu-Nb-Si-B POR ESPALHAMENTO DE RAIOS-X A BAIXOS ÂNGULOS (SAXS).

DENISE RIBEIRO DOS SANTOS, MARCELO KNOBEL,
IRIS L. TORRIANI
*Instituto de Física 'Gleb Wataghin', UNICAMP,
Campinas, SP, Brasil*

A liga metálica $Fe_{73.5}Cu_1Nb_3Si_{13.5}B_9$ tem sido amplamente estudada devido às propriedades magnéticas doces exibidas por esse material após tratamento térmico adequado (tipicamente 1h a $540^\circ C$). O material é produzido por melt-spinning (resfriamento rápido da mistura líquida), apresentando-se inicialmente em estado amorfo. Após o tratamento térmico a microestrutura da liga metálica é essencialmente composta de duas fases: grãos nanocristalinos de Fe_3Si (tamanho médio da ordem de 10 nm) distribuídos homogeneamente em uma matriz amorfa residual composta de Fe, Nb e B. O surgimento das propriedades magnéticas de interesse está basicamente relacionado ao pequeno tamanho de grão e às frações relativas das duas fases estruturais. Utilizando a técnica de espalhamento de raios-X a baixos ângulos (SAXS) com radiação síncrotron ($\lambda = 1.48 \text{ \AA}$) e tratamentos térmicos *in situ*, foi possível observar a evolução da fase nanocristalina a partir do estado amorfo inicial. Utilizando-se outro comprimento de onda ($\lambda = 1 \text{ \AA}$) obtivemos também espectros das amostras sem tratamento térmico. A qualidade dos espectros foi superior neste caso, devido a uma queda substancial na absorção pelos átomos de ferro. Com a análise dos dados experimentais, em andamento, pretendemos caracterizar o estado amorfo inicial resultante da variação da taxa de resfriamento das fitas, permitindo esclarecer o papel deste parâmetro de preparação nas propriedades estruturais e magnéticas observadas ao final da cristalização^{a, b}. CNPq.

^aD. R. dos Santos, I. L. Torriani e M. Knobel, submetido para *J. Non-Cryst. Solids* em dez/94

^bM. Knobel, J. P. Sinnecker, J. F. Saenger e R. Sato Turtelli, *Phil. Mag. B*, vol. 68, 861 (1993).

ESTUDO DA INFLUÊNCIA DA URÉIA EM SISTEMAS DE MICELAS REVERSAS POR ESPALHAMENTO DE RAIOS-X A BAIXOS ÂNGULOS

ROSANGELA ITRI
IFUSP

CARMEM LUCIA COSTA AMARAL
IQUSP

Neste trabalho foram estudadas inicialmente as características estruturais de micelas reversas formadas por AOT / água / hexano com uma razão molar fixa de água / AOT $W=10$, e variação da fração volumétrica de água de 0.02 a 0.15M, por espalhamento de Raios-X a baixos ângulos. A análise das curvas de espalhamento foi feita via modelagem de um fator de forma micelar esférico e uma função de interferência segundo o modelo de esferas duras de Percus-Yevick. A seguir foram também estudadas curvas de espalhamento dos mesmos

sistemas agora na presença de uréia (3M), uma vez que tinha sido previamente observado um aumento brusco na condutividade dos sistemas por influência da uréia.

CRYSTAL STRUCTURE OF NEW MOLYBDENUM (VI) COMPLEXES

OSCAR GONZÁLEZ, RAÚL MARIEZCURRENA

Universidad de la República - Uruguay

JULIA LI-KAO

Universidad de Atacama - Chile

DAVID CARRILLO

Universidad Católica de Valparaíso - Chile

RICARDO BAGGIO

Comisión de Energía Atómica - Argentina

MARÍA T. GARLAND

Universidad de Chile - Chile

In this report we describe the synthesis of bis(triethylammonium) bis(2-mercaptobenzoato-O-S) dioxomolybdate (VI), (Complex 1), $(C_6H_{16}N)_2 [MoO_2(C_7H_4O_2S)]$ and bis(triethylammonium) cis-oxo-(diphenylhydrazido(2-)) molybdenum complex, (Complex 2), $[Et_3NH]_2 [MoO(NNPh_2)(SC_6H_4CO_2)_2]$. The synthesis of the title compounds were undertaken as part of our current research. The purpose was to obtain a new precursor for the preparation of molybdenum complexes. One of these complexes (Complex (2)) contains organo-dinitrogen ligand. Complex 1 is orthorhombic, $P2_12_12_1$; Complex 2 is triclinic, $P-1$. Both complexes have similar coordination geometry around the metallic center and the coordination sphere around the Mo(VI) ion is well described as a slightly distorted octahedron. The anion in complex 1 presents a non-crystallographic twofold axis. The two monomeric units of mercaptobenzoate ligands coordinated in Complex 2 with cis-MO(N-N'-Phen₂) core are dissimilar. The structures are completed by two triethylammonium cations. Complex 2 cation geometry is more disordered than complex 1 one. In both cases they show a strong coupling to the anion through two rather short H-bonded leading to somewhat independent neutral units connected to each other only through coulombian interactions. This work opens up the study of the -N-N-(R,R') system to improve the understanding of such compounds.

CARACTERÍSTICAS ESTRUTURAIS DE CAULINITAS BRASILEIRAS PELA DIFRATOMETRIA DE DE RAIOS-X EM TEMPERATURAS ELEVADAS

ZBIGNIEW BARAN

IFUFBA

WILSON OTTO GOMES BATISTA

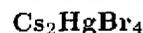
IFUFBA/CEFET-BA

THIERRY JACQUES LEMAIRE

IFUFBA/CNPq

As caulinitas são os silicatos laminares com fórmula estrutural $2[Si_2Al_2O_5(OH)_4]$. Eles são formados pelo empilhamento de lâminas indéticas constituídas de uma camada de tetraedros SiO_4 e uma camada de octaedros $AlO_2(OH)_4$. Quando o empilhamento das lâminas é perfeitamente ordenado a caulinita tem uma estrutura triperódica, triclinica. No entanto existem caulinitas que apresentam um número bastante grande de falhas de empilhamento. Foi evidenciado que a trituração das amostras de caulinita de Keokuk bem cristalizada (DeLuca e Slaughter, 1985) introduz um deslocamento de uma camada, em relação a outra paralelo a direção b, que não é múltiplo inteiro de b/3. Isto diminui a estabilidade da ligação de hidrogênio entre as camadas e em consequência altera a distância interlamina. A distância alterada produz um pequeno deslocamento na posição do pico de difração 001 e sua assimetria. Os autores sugerem que este efeito indica a presença de múltiplas fases cristalinas que surgem durante a trituração. Nós repetimos esta experiência com uma caulinita de Manaus (bem cristalizada) e com uma de Bananeiras-Ba (mal cristalizada). Efetuamos varredura passo a passo utilizando o difratômetro com anodo rotativo. Para obter o perfil da reflexão livre de aberrações instrumentais efetuamos um tratamento numérico dos dados experimentais seguido de uma técnica de deconvolução. No caso da caulinita de Keokuk foi evidenciada a presença de três fases cristalina. Em nosso caso foram também observados picos revelados pela deconvolução que poderiam ser associados às diferentes fases cristalinas. Para verificar esta hipótese empregamos a câmara de alta temperatura instalada no difratômetro. A idéia básica é que o aumento da temperatura deverá permitir um estudo da evolução dos picos de difração correspondentes as diferentes fases cristalinas durante um aquecimento gradual das amostras de caulinita de Manaus e Bananeiras. Assim iremos apresentar os difratogramas em função da temperatura e desta forma caracterizar as estruturas das caulinitas brasileiras. (Apoio CNPq).

ESTUDO CRISTALOGRAFICO DO



CARLOS BASÍLIO PINHEIRO, NIVALDO LÚCIO

SPEZIALI

UFMG

O Cs_2HgBr_4 é um cristal da família A_2BX_4 que, segundo estudos de espectroscopia Raman, calorimetria, ressonância nuclear, ultrassom e cristalografia, apresenta cinco fases estruturalmente distintas durante o resfriamento:

Fase I	Fase II	Fase III	Fase IV	Fase V
$Pnma$	\Leftrightarrow Incomens.	$\Leftrightarrow P2_1/n$	$\Leftrightarrow P\bar{1}$	$\Leftrightarrow P\bar{1}$
	$T_{c1}=245 K$	$T_{c2}=232 K$	$T_{c3}=167 K$	$T_{c4}=85 K$

Na fase de temperatura ambiente (I), o Cs_2HgBr_4 tem estrutura isomorfa ao $\beta\text{-K}_2\text{SO}_4$, que apresenta grupo de espaço $Pnma$. Em $T_{c1}=245\text{K}$ ocorre uma transição de fase estrutural de segunda ordem. Na fase II foi verificada a presença de reflexões satélite, características de estruturas moduladas; a estrutura média desta fase (incomensurável) também foi descrita pelo grupo de espaço $Pnma$. Em $T_{c2}=232\text{K}$ ocorre uma transição de fase de primeira ordem ("lock-in") levando o cristal a uma fase comensurável geminada (III), sem mudança na periodicidade da rede e descrita pelo grupo de espaço $P2_1/n$. Outras duas transições de fase são registradas na literatura: uma transição de fase de segunda ordem em $T_{c3}=167\text{K}$, levando o cristal a um grupo de espaço $P\bar{1}$, e uma transição de fase de primeira ordem em $T_{c4}=85\text{K}$, levando o cristal a um grupo de espaço $P\bar{1}$, com duplicação da malha.

Serão apresentadas as estruturas da fase I, da fase III e a estrutura média da fase incomensurável, o comportamento do vetor de modulação com a temperatura $[q(T)]$ na fase II e o comportamento da intensidade de algumas reflexões durante a transição fase II \leftrightarrow fase III. Com base nestes resultados serão discutidos os mecanismos responsáveis pela incomensurabilidade, geminação e transição "lock-in".

Estudo de Cerâmicas com Estrutura do Tipo Espinélio Através da Técnica de EXAFS

VALMOR ROBERTO MASTELARO, PEDRO IRIS PAULIN FILHO

DEMa - Universidade Federal de São Carlos

Os materiais com a estrutura do espinélio tem sido utilizados em aplicações eletro-eletrônicas e magnéticas. As aplicações deste tipo de material provem das diversas maneiras pela qual os cátions podem ser colocados dentro da estrutura cristalina do espinélio, introduzindo defeitos específicos em quase todos os arranjos cristalinos de íons. Isto ocorre pela substituição de íons divalentes A na estrutura AB_2O_4 com igual número de cátions mono e trivalentes de tamanho apropriado. A introdução de cátions com valência variável altera a condutividade elétrica destes materiais que passam a ter um comportamento semicondutor. No caso dos compostos CuAl_2O_4 , para que ocorra o processo de condução, existe a necessidade da presença de íons Cu^{+1} e Cu^{2+} . Para estudar as mudanças de valência, número de primeiros vizinhos e as distâncias médias do átomo de cobre, introduzidas pela variação da concentração de CuO e das dopagens, utilizamos a técnica de EXAFS. Uma análise preliminar dos resultados mostrou que para as composições contendo 30% e 43% de CuO , a estrutura local do átomo de cobre é similar a estrutura do CuO . Para as amostras contendo

20% (dopadas ou não) observou-se mudanças significativas no número de coordenação redor do átomo de cobre. Para estas mesmas amostras, observou-se também mudanças significativas na região da borda de absorção (XANES) do átomo de cobre, indicando uma possível mudança na valência dos átomos de cobre.

MECHANICAL MILLING INDUCED AMORPHIZATION OF Fe_2Sc LAVES PHASE

SIKE XIA, ELISA BAGGIO-SAITOVITCH, VICTOR. A. RODRIGUES

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

M. GHFARI

Technische Hochschule Darmstadt Germany

F. C. RIZZO, ASSUNTAUPIO

DCMM, PUC-RIO

The ordered Fe_2Sc intermetallic compound with C14 Laves phase structure was mechanical milled. The structural evolution was followed by X-ray diffraction and M/SSbauer spectroscopy. The results indicated that severe plastic deformation produced by ball milling induced a partial disordering followed by an amorphization. The analyses of the M/SSbauer magnetic hyperfine fields indicated that the structural disorder and amorphization affected the magnetic properties. Differing from the conventional amorphous phase, the ball milled powder exhibited a remarkable structural relaxation before the crystallization transition occurs, which is around 600 C, as shown by DSC and X-ray diffraction. The Mediema's model was used to estimate the thermodynamic properties of the Sc-Fe system which showed that the amorphous phase has a lower enthalpy than the corresponding solid solution phase. The amorphization kinetics have been discussed through the lattice destabilization.

Filmes Finos, Textura e Óptica de Raios-X (CRI) - 07/06/95

SIMETRIA EM DIAGRAMAS DE DIFRAÇÃO MÚLTIPLA

CARLOS BENEDICTO RAMOS PARENTE, VERA LÚCIA MAZZOCCHI

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

JOSÉ MARCOS SASAKI, LISANDRO PAVIE CARDOSO

Instituto de Física Gleb Wataghin - UNICAMP

Em 1972, ao estudar a difração múltipla de nêutrons em uma placa monocristalina de alumínio, Parente observou a existência de dois picos, em posições simétricas com relação a um dos espelhos de simetria do diagrama experimental obtido com a reflexão primária 111. Contrariamente ao que era esperado, esses picos não tinham mesma intensidade (Parente, C.B.R., "Difração Múltipla de Nêutrons em um Cristal de Alumínio" Tese de Doutorado, Instituto de Física da Universidade de São Paulo, 1972). Em uma estrutura cúbica, como a do alumínio, a direção $\langle 111 \rangle$ é um eixo de simetria de ordem 3. Com esta simetria, são esperados espelhos a cada 60° . Entretanto, o diagrama obtido, de extensão reduzida, mostrou dois espelhos distanciados de 30° , com o por menor de que em torno de um dos espelhos estavam os dois picos de intensidades diferentes. Recentemente, Sasaki observou a ocorrência do mesmo fenômeno em diagrama obtido com a reflexão primária 222 de um cristal cúbico de arseneto de gálio (GaAs), usando radiação $CuK_{\alpha 1}$ (Sasaki, J.M., "Diagramas Renninger com Radiação de Freamento de Elétrons e Síncrotron no Estudo de Estruturas Heteroepitaxiais", Tese de Doutorado, Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas, 1993). Com o auxílio do programa de computador MULTX, de simulação de diagramas de difração múltipla de raios-X, foi calculado o diagrama dessa reflexão e comprovada a assimetria verificada experimentalmente. Neste presente trabalho, é feito um estudo sistemático da simetria em diagramas de difração múltipla de raios-X e nêutrons. Diagramas experimentais foram obtidos, com diversos monocristais, e comparados com diagramas simulados com os programas MULTX e MULTI, este último utilizado no caso de nêutrons. Para uma melhor visualização da simetria dos diagramas, estes foram graficados em uma escala circular, permitindo a fácil identificação dos espelhos de simetria verdadeira. Apoio financeiro: "International Atomic Energy Agency" (IAEA) e Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

**PROPRIEDADES ELETROCRÔMICAS E
ESTRUTURAIS DE FILMES FINOS DE
ÓXIDO DE NÍQUEL CRESCIDOS POR
RF-SPUTTERING**

F. F. FERREIRA, M. C. A. FANTINI
Instituto de Física, USP, São Paulo, SP

A. GORENSTEIN
Instituto de Física, UNICAMP, Campinas, SP

Filmes finos não estequiométricos de óxido de níquel (NiO_x) são conhecidos por suas propriedades ópticas dinâmicas, relacionadas ao efeito de electrocromismo induzido por intercalação iônica. As características

desejáveis para aplicações em diferentes dispositivos electrocrômicos incluem tempo de resposta curto (< 100 ms), grande variação de densidade óptica ($> 50\%$), efeito de memória e longa durabilidade ($10^5 - 10^7$ ciclos). O alto desempenho de filmes de óxido de níquel depositados por "sputtering" depende: (i) da compreensão da influência dos parâmetros de deposição na morfologia, estrutura e estequiometria do depósito e (ii) da relação entre as propriedades dos filmes com o comportamento electroquímico/electrocromico. Os parâmetros de deposição a serem otimizados são a potência rf (P), o fluxo de oxigênio na câmara (ϕ) e a temperatura do substrato (T). Neste trabalho apresentamos um estudo sistemático da influência de P e ϕ nas propriedades dos diferentes filmes. As amostras foram caracterizadas por voltametria cíclica, transmitância óptica e difração de raios-X. A intercalação electroquímica ocorreu em solução aquosa 0,1M de KOH. Os resultados obtidos mostram que a eficiência electrocrômica e a variação de densidade óptica independem de ϕ , mas crescem com P, em decorrência de modificações morfológicas. O tempo de resposta depende de ambos os parâmetros. A orientação preferencial paralela à superfície na direção do plano (111) do NiO cúbico é maior para filmes crescidos com alta potência e alto fluxo, e depende do substrato. O parâmetro de rede também varia com as diferentes condições de deposição, sendo menor em substrato monocristalino. O tamanho de grão e o grau de cristalinidade independem de ϕ , mas variam com P; neste caso, o tipo de substrato é relevante. Os resultados indicam que o aumento da rugosidade superficial e a orientação preferencial afetam positivamente o desempenho dos filmes, o qual independe do parâmetro de rede e do tamanho de grão.

**High energy resolution X-ray absorption
spectroscopy with backdiffraction optics**
DOMINIQUE UDRON, IRINEU MAZZARO, CESAR
CUSATIS

Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná

High energy resolution in X-ray absorption near edge spectroscopy (XANES) can be obtained by using a fluorescence detection scheme with high energy resolution analysis of the fluorescence signal. In this case, the resolution of the XANES spectra can reach levels one order of magnitude better than the width of the deep hole energy level. The fluorescence signal is analyzed by a spherically bent monochromator working at high Bragg angle values, which decreases the energy resolution loss caused by the divergence of the analyzed fluorescence. The efficiency of this experimental scheme can be improved by using a bent crystal analyzer in the backd-

iffraction regime (with Bragg angle close to 90°). This diffraction regime is characterized by high energy sensitivity, great angular acceptance and not-sensitive goniometry. Preliminary results were obtained at the Cu K edge with synchrotron radiation. The set-up was installed at the D45 experimental station of LURE (Orsay, France) with a four-crystal monochromator selecting the monochromatic beam which excites the fluorescence of the sample, and a 42.2 reflection quartz analyzer. The possibility of using mosaic crystals as analyzers for other absorption edges was studied. The same set-up could also be used for spin dependent XANES giving spectra of specific spin electronic states for the absorbing atom.

Monocromador cristalino com focalização sagital para Luz Síncrotron.

IRINEU MAZZARO, CESAR CUSATIS

Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná
HÉLIO TOLENTINO

Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS/CNPq

A focalização sagital do feixe de luz síncrotron, possibilita aumentar o fluxo na amostra com a captação de vários miliradianos de divergência horizontal do feixe. Uma lâmina de Silício (111) foi confeccionada no formato triangular, com espessura de 0,5mm, para servir como segundo cristal sagitalmente focalizante no monocromador de duplo cristal do anel UVX do LNLS. São coletados 10 miliradianos do feixe que ilumina 60 mm da bisetriz maior do cristal curvado cilíndricamente. Isto possibilita a focalização do feixe na amostra colocada a 2 m do monocromador, quando a fonte está a 6 m de distância do monocromador, ou seja, com a demagnificação óptica de 3/1. O raio de curvatura é ajustável para energia disponível acima de 2 keV. Resultados de testes preliminares com fonte convencional serão apresentados.

TEXTURA CRISTALOGRAFICA EVIDENCIADA POR ESPECTROSCOPIA NUCLEAR

H. SAITOVITCH, P. R. J. SILVA

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

As interações quadrupolares eléctricas (IQEN), medidas em impurezas situadas em redes cristalinas não cúbicas, são muito sensíveis às propriedades cristalograficas das amostras. Geralmente são utilizadas para estes estudos amostras policristalinas, com os cristalitos orientados aleatoriamente; o que, de certa forma mascara os efeitos da orientação. No entanto, em amostras

solidificadas rapidamente assim como em laminas afinadas mecanicamente, podem aparecer orientações especiais dos microcristais constituintes das amostras medidas. Nestes casos, mesmo que o valor das IQEN permaneçam inalterados com relação ao caso policristalino, aleatoriamente orientado, os padrões dos espectros medidos se alteram radicalmente com as diferentes orientações. Nesta comunicação apresentamos medidas de correlação angular tempo diferencial (CATD) em impurezas de $^{111}\text{In}(^{111}\text{Cd})$ difundidas em lamina de metal Índio afinada mecanicamente. As medidas, realizadas em temperatura ambiente e com a amostra orientada em três ângulos diferentes com relação ao plano dos detectores, apresentam padrões que evidenciam as mudanças de orientação cristalografica. Este método pode, eventualmente, configurar um processo de determinação da textura cristalografica em materiais.

CARACTERIZAÇÃO DE FILMES FINOS DE GERMÂNIO NANOCRISTALINO POR DIFRAÇÃO DE RAIOS-X COM BAIXO ÂNGULO DE INCIDÊNCIA

LEIDE PASSOS CAVALCANTI, IRIS L. TORRIANI

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

Camadas finas crescidas por técnicas diversas podem conter heterogeneidades ao longo da direção de crescimento tais como textura, cristalinidade, tamanho de grão, tensões e outros. Essas variáveis podem ser claramente reveladas através de medidas de difração de raios-X com geometria assimétrica e baixo ângulo de incidência realizadas com o Goniômetro de Guinier. Este trabalho mostra os resultados do estudo de camadas finas de germânio nanocristalino crescidas por sputtering sobre substrato monocristalino de germânio cortado na direção 110. Estas amostras já foram objeto de pesquisa usando as técnicas de espectroscopia Raman e difração de raios-X. Medidas com a técnica convencional de difração de raios-X, as reflexões 220 e 440 do substrato de germânio monocristalino têm uma intensidade muito grande que, além de se superpor às reflexões correspondentes do filme, atrapalham o delineamento dos outros picos. O estudo com o Goniômetro de Guinier mostra claramente uma de suas vantagens que é suprimir totalmente as reflexões do substrato monocristalino. A caracterização com esta técnica permitiu verificar que existe uma textura na direção do eixo de crescimento e revelar algumas das razões das discrepâncias entre os resultados das medidas de Raman e Raios-X no que se refere ao tamanho de grão cristalino.

Workshop: Espectroscopia, Difração e Espalhamento de Raios-X: Projeto de Utilização do Síncrotron Brasileiro (CRI) - 08/06/95

ESPECTROSCOPIA, DIFRAÇÃO E ESPALHAMENTO DE RAIOS-X: PROJETOS DE UTILIZAÇÃO DO SÍNCROTRON BRASILEIRO

ALDO CRAIEVICH

LNLS/CNPq, Campinas, SP e IFUSP, São Paulo, SP, Brasil

As estações experimentais associadas à pesquisa da estrutura da matéria condensada que estão sendo atualmente projetadas e construídas no LNLS são: (i) Difração de Raios X; (ii) Espalhamento de Raios X a Baixo Ângulo; (iii) Cristalografia de Proteínas; (iv) EXAFS. Os responsáveis pela construção destas estações experimentais comunicarão o estado atual dos projetos e descreverão as principais pesquisas propostas pelos futuros usuários. Estas quatro estações, além de outras três associadas a espectroscopia de VUV e de raios X moles, deverão estar concluídas e instaladas até julho de 1996, data prevista para o início do funcionamento da fonte de luz síncrotron do LNLS.

ANDAMENTO DO PROJETO DA LINHA DE SAXS PARA O LNLS

IRIS L. TORRIANI

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

A construção da estação experimental de SAXS para o LNLS está em andamento desde 1992^{*}. O projeto da estação contém instrumentação similar à já existente em outros Laboratórios da Europa e USA: um monocromador de alto fluxo, fendas para colimação, absorvedores e monitores de feixe, caminhos de vácuo e detectores. No planejamento da linha foi importante a análise das necessidades experimentais de projetos de pesquisa apresentados pela comunidade. Estes projetos contemplam diferentes usos da técnica SAXS, dos quais mencionaremos os seguintes: (i) determinação de estrutura molecular de proteínas, (ii) avaliação da textura de poros de catalisadores, (iii) análise da estrutura de bio-polímeros em solução, (iv) estudo de variações conformacionais de proteínas neurotóxicas, (v) estudo de variações conformacionais de albuminas humana e bovina, em diferentes condições físico-químicas, (vi) estudo de soluções de polieletrólitos, (vii) cinética de separação de fases blendas poliméricas, (viii) soluções de copolímero bloco, (ix) membranas poliméricas, (x) interdifusão de polímeros, (xi) pesquisa de materiais energéticos e carbônicos, (xii) estudo estrutural de ionômeros, (xiii) estudo de partículas em solução, (xiv) estudo de sistemas interagentes, (xv) estudo de estruturas com parâmetro de rede grande, (xvi) estudos estruturais de eritrocruorina, (xvii) estudo de membranas de eritrócitos modificados por drogas, (xviii) estudo de materiais amorfos, ligas e cristais líquidos, (xix) estudo de materiais eletrocromicos, (xx) estudo de cristais líquidos dopados com semicondutores, (xxi) estudo de corrosão em ligas de Fe-Ni, (xxii) estrutura de novos ferrofluidos. Acreditamos que a instrumentação desenvolvida será adequada à realização de todos os tipos de experiências propostas nestes projetos. A linha de luz já conta com vários módulos construídos em fase de teste e esperamos que esteja concluída para a data de início de funcionamento do anel do LNLS.

^{*} A partir de 1993 com recursos da FAPESP.

PROJETOS DE UTILIZAÇÃO DA ESTAÇÃO DE ESPECTROSCOPIA DE ABSORÇÃO DE RAIOS X DO LNLS

MARIA DO CARMO M. ALVES

LNLS/CNPq, Campinas, SP

O Laboratório Nacional de Luz Síncrotron está construindo uma linha de luz de espectroscopia de absorção de raios X (XANES, EXAFS) dedicada a região de raios X duros (4 - 16 KeV). Esta técnica permite estudar a estrutura atômica local na vizinhança de um átomo selecionado. São obtidas as seguintes informações: estados de oxidação, simetria do arranjo atômico local, densidade de estados vazios, número de coordenação, distâncias entre átomo absorvedor e vizinhos. Esta técnica permite estudar uma grande gama de materiais cristalinos ou amorfos (filmes

finos, multicamadas magnéticas, vidros, semicondutores, colóides, catalisadores, complexos inorgânicos, sistemas eletroquímicos, biológicos, etc.

Está em andamento um projeto de pesquisa realizado em colaboração com a Petrobrás (CENPES, RJ) relacionado com o estudo de catalisadores de Ni de interesse dessa indústria. Este ano serão realizadas experiências nos seguintes materiais:

1) Ligas magnéticas granulares (UFRGS, RS); 2) Nanoestruturas de semicondutores ($Cd_{1-X}S_X$) (Inst. Química/UNICAMP); 3) Catalisadores de Ni suportados em alumina (CENPES, RJ); 4) Caracterização de catalisadores de óxido de vanádio e molibdênio (UFRJ, RJ); 5) Estudo de complexos de Ru(II) e Mn(III) (Depto. de Química, UFSC).

PROJETOS DE UTILIZAÇÃO DA ESTAÇÃO DE DIFRAÇÃO DE RAIOS X DO LNLS

CESAR CUSATIS

LNLS/CNPq, Campinas, SP e Depto. de Física, UFPr, Curitiba, PR

A estação de difração de raios X está sendo construída para operar com fótons de energia acima de 1 Kev e pressão ambiente de 10^{-2} torr ou atmosférica, tanto para difratometria de pó como para multicristais.

O monocromador da linha será semelhante àquele já desenvolvido no LNLS e em uso, atualmente, no laboratório CAMD, de Louisiana (EUA), ou seja, tipo 2-cristais/4-cristais, com a focalização, pelo último cristal, de 10 mrad do feixe.

O difratômetro que está sendo desenvolvido é do tipo teta/2-teta com a opção da adição de eixos escamoteáveis que serão colocados em número e nos locais onde forem necessários, sobre a mesa 2-teta, para difratometria de múltiplos cristais.

As propostas de pesquisa a serem inicialmente realizadas nesta estação incluem estudos e caracterização estrutural, "in situ" e "ex situ", de materiais e superfícies mono e policristalinos, heteroestruturas, epitaxias, silício poroso, etc, por diversas técnicas de difração de raios X, além de estudo e aplicações da retrodifração.

Serão apresentados alguns detalhes dos projetos de pesquisa, o cronograma e o estágio de desenvolvimento do projeto da estação.

ESTAÇÃO EXPERIMENTAL DE CRISTALOGRAFIA DE PROTEÍNAS DO LNLS

G. OLIVA, R. GARRAT, E. E. CASTELLANO

Instituto de Física de São Carlos, USP

As características do anel de armazenamento do LNLS são os fatores determinantes no projeto da estação de Cristalografia de Proteínas. A solução adotada tem por objetivo maximizar o fluxo monocromático na amostragem cristalina, em comprimentos de onda na faixa de $1 \rightarrow 1.5 \text{ \AA}$. Para tanto, utilizar-se-á um monocromador de um único cristal triangular e curvo, em conjunto com um espelho de raios-X para focalização vertical. O detector empregado utiliza Placas de Imagens (Fuji Photo Film, Ltd.) para armazenar intensidades de raios-X como imagens latentes na forma de centros de cor, as quais são posteriormente medidas com uma fotomultiplicadora que registra a fotoluminescência induzida por varredura com um laser de He-Ne. O instrumento é caracterizado por uma alta eficiência quântica e larga faixa dinâmica linear, bem como baixo ruído intrínseco, o que o torna ideal para coleta de dados de difração em fontes de radiação síncrotron.

Diversos projetos de determinação de estruturas estão em desenvolvimento no Laboratório de Cristalografia do IFSC, utilizando atualmente fontes do laboratório ou radiação síncrotron em laboratórios no exterior (Photon Factory, DESY, Daresbury). Serão apresentados os recentes avanços nas seguintes estruturas: Glucosamina-6-Fosfato Deaminase de *Escherichia coli*, Gliceraldeído -3-Fosfato Desidrogenase de *Anas sp.* (pato doméstico e de *T. cruzi*, Anidrase Carbônica Bovina, *Bothropstoxina II* de jararaca, *Lectina KM+* da semente de *Artocarpus integrifolia*, *Lectina* da semente de *Cratylia mollis*, *Calgranulina C* de granulócitos porcinos e inibidor de α -amilase extraído do trigo. Todos estes projetos, bem como os demais provenientes de outros laboratórios (p.e., IBILCE/UNESP-S.J.Rio Preto), serão amplamente beneficiados pela disponibilidade da estação experimental de Cristalografia de Proteínas.

Estructuras Cristalinas e Moleculares (CRI) - 08/06/95

STRUCTURE DETERMINATION OF AN ABSORPTION FUROSEMIDE PRODRUG acetyloxymethyl

4-chloro-N-furfuryl-5-sulfamoylanthranilate.

LEOPOLDO SUESCUN, OSCAR GONZÁLEZ, ALVARO MOMBRÚ, RAÚL MARIEZCURRENA

Laboratorio de Cristalografía, Facultad de Química - Universidad de la República

EDUARDO MANTA, CAROLINA PRANDI

Cátedra de Química Farmacéutica, Facultad de Química - Universidad de la República

Furosemide is a very strong diuretic widely used in hypertensive crisis. It has been studied the possibility of using some acyloxymethyl esters of Furosemide as Prodrugs in order to improve the therapeutical success of this drug. This ester blocks the carboxylic group of Furosemide and favours the absorption of the drug by avoiding the ionization of the acidic group of Furosemide. Six of these esters were obtained and characterised spectroscopically, their pharmacological properties were studied (1),(2) and the crystalline structure of the best prodrug was determined. Some acetyloxymethyl 4-chloro-N-furfuryl-5-sulfamoylanthranilate crystals were obtained by vapour diffusion method and its space group was determined by means of Oscillation and Weissenberg photographs. Diffractometric data were collected using a Siemens R3m diffractometer of the Lab. de Cristalografía - Dpto. de Física - Fac. de Ciencias Físicas y Matemáticas - Universidad de Chile. The structure was solved using the SHELXS-86 program, locating Cl and S atoms by Patterson method. Refinement was successfully made finding the rest of the atoms (except 4 H atoms that were modelated) by Fourier Difference method using SHELXL-93 program. Absorption correction was not needed.

Crystallographic Data: $C_{15}H_{15}O_7N_2S_2Cl$, MW=402.81, triclinic, P(-1), (N° 2), $a=8.502(2)$ Å, $b=9.653(3)$ Å, $c=11.767(2)$ Å, $\alpha=72.1^{\circ}$, $\beta=74.57^{\circ}$, $\gamma=72.74^{\circ}$, $V=860.8(4)$ Å³, $Z=2$, $D_c=1.554$ g.cm⁻³, $\mu(MoK_{\alpha})=0.385$ cm⁻¹, $F(000)=416$. Final Results: $R=0.051$, $R_w=0.1143$, $S=1.119$, for 279 parameters and 2722 independent reflections with $I>2\sigma(I)$.

(1)E.Manta, C.Prandi, P.Fagiolino, L.Llera, *Il Farmaco*, 47 (9),1225-1230;1992

(2)E.Manta, C.Prandi, P.Fagiolino, L.Llera, J.Aiache,J.Couquelet, *Il Farmaco*, 47, 249-263;1992

STRUCTURE OF DIBROMO 2[N - (2-PYRIDYLMETHYL) IMINOMETHYLOYRIDINE] COOPER (II) COMPLEX

OSCAR GONZÁLEZ

Universidad de la República - Uruguay

JORJE MANZUR, YANKO MORENO, EVGENIA

SPODINE, MARÍA T. GARLAND

Universidad de Chile - Chile

RICARDO BAGGIO

Comisión Nacional de Energía Atómica - Argentina

The structure of this copper complex is a monomer and the environment around the copper ion is a square pyramid, with one bromine ion Br occupying the apical site, the other bromine ion Br occupying one of the basal positions. The ligand, Schiff base, was prepared by the reaction 2-pyridinecarboxaldehyde with 2-aminomethylpyridine. The bromo copper (II) complex with this ligand was prepared, and the crystal structure determined in order to determine the multiplicity of the coordination with nitrogen atoms. The environment around the copper ion is a square pyramid, with Br1 occupying the apical site, the other bromine ion Br2, occupying one of the basal positions, and the three remaining being occupied by the three nitrogen atoms of the organic ligand. The two copper-bromine bonds are quite different in length. This striking difference is probably due to the existence of two short intra-molecular non-bonding H...Br2 contacts (C12-H12...Br2=2.908; C1-H1...Br2=2.871Å). Their action is clearly in the sense of contracting the Cu-Br2 bond. Instead the non-bonding interactions involving Br1, are all inter-molecular, and their action is rather in the opposite sense. The tridentate ligand does not show a short double bond characteristic of a C=N imine group (C6-N2=1.338(9)Å and C7-N2=1.361(9) Å). The two angles involved are also of the same magnitude (C5-C6-N2=113.0(6)Å and C8-C7-N2=112.2(6)Å). These values are intermediate between pure sp² and sp³ values, and indicate a high degree of delocalization. The latter one coordinates only through the two nitrogen atoms, and shows clear differences between a short C=N bond (C7-N2=1.268(5) and a long C-N bond (C7-N2=1.483(6)Å). Acknowledgements The authors would like to thank Fundacion Andes for the purchase of the single crystal diffractometer currently operating at the Universidad de Chile, and Fondecyt (1940515) for financial support.

THE CRYSTAL STRUCTURES OF TWO DIMETHYLTIN(IV) COMPLEXES OF VITAMIN B₆ IN DIFFERENT CHLORIDE/NITRATE MEDIA

E. E. CASTELLANO, J. ZUKERMAN-SCHPECTOR

Instituto de Física e Química de São Carlos

J. S. CASAS, F. CORDONI, M. D. COUCE, A.

SANCHEZ, J. SORDO, J. M. VARELA

Universidade de Santiago de Compostela. Spain.

The wide use of organotin(IV) compounds has increased the interest for the study of their chemistry, both, from the environmental and the biological points

of view. In this context, the interaction of organotin(IV) with biologically relevant compounds, as vitamin B₆ [PN-H, Pyridoxine, 2-methyl-3-hydroxy-4,5-bis(hydroxymethyl) pyridine], can be useful examples to understand, and therefore even to modify, the activity of tin complexes. 1. [SnMe₂(PN-H)]NO₃·2H₂O Crystal data: C₁₀H₂₀N₂O₈Sn; crystallizes in space group

P $\bar{1}$, with a=7.1266(8), b=8.1056(8), c=14.523(4)Å, $\alpha = 73.76(2)$, $\beta = 80.29(2)$, $\gamma = 82.58(1)^\circ$, Z=2, Dx=1.73gcm⁻³, $\mu(\text{MoK}\alpha) = 16.46\text{mm}^{-1}$. The structure was refined to R=0.036 for 2725 reflections and 201 parameters. 2. [SnMe₂(H₂O)₂(PN-H)]Cl Crystal data: C₁₀Cl H₂₀NO₅Sn; crystallizes in space group P2₁/a, with a=11.056(1), b=11.396(1), c=12.323(2)Å, $\beta = 110.40(1)^\circ$, Z=4, Dx=1.77gcm⁻³, $\mu(\text{MoK}\alpha) = 19.56\text{mm}^{-1}$. The structure was refined to R=0.023 for 2409 reflections and 164 parameters. The essential features of the coordinated (PN-H) ligand in both structures, particularly the C(9)-O(1), 1.419(6)Å and C(3)-O(2), 1.338(5)Å bond distances, compare well with those found in other complexes in which this ligand is coordinated via deprotonated phenolic and 4-CH₂OH groups. When comparing with the free ligand, it can be seen that the C(2)-C(3)-C(4) angle does not change upon deprotonation of the phenol group whereas C(3)-O(2) is shortened [1.338(5) vs. 1.374(4) Å]. The C(9)-O(1) bond length is practically unmodified and the C-N-C angle is wider [123.6(4) vs. 119.3(3)°] and close to that in PN.HCl where, as in this case, the N atom is protonated. Bond parameters for the 5-CH₂OH fragment do not undergo significant modifications if compared with structures where a monodeprotonated pyridoxine ligand is coordinated to other metals through the O(1) and O(2), as in this case, but their fragment is uncoordinated and involved in hydrogen bonds. In both compounds the Sn atom is hexacoordinated and the deprotonated ligand chelates a tin ion via its phenolic and ethanolic oxygen atoms. Both compounds are crystallographically centrosymmetric dimmers with the ethanolic oxygen bridging between neighbor tin ions. In compound 1 the hexacoordination is completed by an ethanolic oxygen of a different ligand. In compound 2, the sixth position is occupied by a water molecule. The structures are stabilized by an intricate hydrogen bonding scheme that links pyridoxine, water molecules and nitrate or chloride ions. This work has received partial support from FAPESP, CNPq and FINEP.

ESTUDOS POR MECÂNICA MOLECULAR DE COMPOSTOS ORGÂNICOS TIPO BIFENILOS

PAULO J. PORTEZANI, SILVIA L. CUFFINI, YVONNE P. MASCARENHAS, ALBERTO WOLFENSON
Instituto de Física de São Carlos. USP

JOSÉ SCHNEIDER, ALDO BRUNETTI

FAMAF. Univ. Nacional de Cordoba. Argentina

A fim de analisar possíveis variações conformacionais de moléculas orgânicas tipo bifenilos no estado livre e cristalino, minimizamos sua energia molecular aplicando mecânica molecular [Allinger, N.L. & YUH, Y.H., 1987. "MM2"]. Estudando mediante este procedimento o composto Bifenilo, utilizando como dados iniciais os dados cristalográficos previamente determinados; verificamos que a base de dados do MM2 deveria ser alterada a fim de parametrizar melhor os dados referentes aos carbonos que efetuam a ligação entre os anéis (carbono pivot). Chegamos a esta conclusão, já que utilizando os dados originais desta base, encontramos um ângulo torsional de 0.11° quando minimizamos a energia molecular. Sendo o valor deste ângulo, medido por Difração de Gás de Elétrons, de 44.4° [J. Mol. Struct., 128 (1985) 59]. Portanto alteramos a base do MM2, com os parâmetros de potencial de J. Font [J. Mol. Structure, 195 (1989) 103-110]. Com esta base de dados modificada o valor obtido para o ângulo torsional foi de 38.0°, o que melhora notavelmente a concordância com o obtido experimentalmente. Estes novos parâmetros foram utilizados para outros compostos bifenilos modificados, como 4,4'-dicloro bifenilo (DCB)[Acta Cryst. (1978). B34, 981-985] e 4-bromo bifenilo (BB)[Acta Cryst. (1980). B36, 968-971]. No primeiro composto (DCB), verificamos que o ângulo torsional, cujo valor cristalográfico é de -37.85°, atinge o valor de -38.88° após a minimização de energia molecular. No outro composto estudado (BB) estes valores foram respectivamente de 15.6° e de 37.71°. No primeiro caso, é evidente que não há mudança significativa na conformação da molécula quando passa do estado cristalino ao livre e que as forças intermoleculares são fracas, tipo Van der Waals. Dados experimentais obtidos por Ressonância Quadrupolar Magnética (RQM) confirmam esta suposição. Agradecimentos: FAPESP, CAPES, CNPq, FINEP.

CRYSTALLIZATION OF BOTHROPSTOXIN II ISOLATED FROM THE VENOM OF

Bothrops jararacussu.

RAQUEL KELY BORTOLETO, RICHARD J. WARD,
JOÃO RUGGIERO NETO, RAGHUVIR K. ARNI
UNESP

Phospholipases A₂ (PLA₂) are 14-16 KD proteins which are ubiquitous in nature and catalyse the hydrolysis of sn-2 ester links in phospholipids. Their activity is enhanced by several orders of magnitude when the lipid substrate aggregates into vesicles, and a detailed "facilitated diffusion" model has been proposed for the mechanism of catalysis (Scott et al., 1990). Key residues in the catalysis include His-48 which acts as a nucleophile, and Asp-49 which plays a crucial role in binding Ca⁺, an essential co-factor in the reaction.

Recently, the structure of a number of calcium independent PLA2s in which Asp-49 is substituted by Lys-49 have been determined (Arni et al., 1994;1995). In Bothropstoxin II (BTHX-II), isolated from the venom of Bothrops jararacussu, Asp-49 is retained but other mutations in the calcium binding loop and active site regions result in a low catalytic activity of the protein. In order to further our structural knowledge of the effect of mutations on the catalytic activity, we have crystallized BTHX II. The first crystal form obtained belonged to the trigonal point group, diffracted poorly and proved to be unstable when exposed to X-rays. A second crystal form obtained belongs to the tetragonal space group ($P4_12_12$) with cell constant of 101.0, 101.0 and 106.4 Angstroms. Diffraction data has been collected to high-resolution (2.2 Angstroms) and the structural refinement is in progress, and an atomic model of the protein will be presented. Supported by FAPESP, CNPq and FUNDUNESP.

**ESTRUTURA CRISTALINA DE
HETEROCICLOS APRESENTANDO
ATIVIDADE INIBIDORA EM
ESCHERICHIA COLI**

LEON ITALO BRASIL HOMAR, CARLITO LARIUGGI,
GUILHERME C. OLIVEIRA, PEDRO H. FERRI, NILMA
C. SANTOS, LOURIVAL C. FARIA
Universidade Federal de Goiás

Escherichia coli e Salmonella typhimurium são causadoras de gastroenterites humanas, inclusive responsáveis por óbitos relacionados com infecções intestinais em recém-nascidos e crianças. As vias de transmissão dessas bactérias são através dos alimentos e água ou disseminação via oral-anal. Atualmente diversas substâncias antibacterianas tem demonstrado pouco ou nenhum efeito antimicrobiano, devido ao desenvolvimento de resistência às drogas. Neste trabalho descrevemos a estrutura cristalina do composto X, um representante de heterociclos sistematicamente sintetizados com o objetivo de inibir o crescimento e respiração de Escherichia coli. A avaliação de toxicidade está sendo efetuada por meio do monitoramento de CO_2 , produzido pela bactéria durante os processos de respiração, utilizando a técnica de Análise por Injeção em fluxo (FIA), com detecção condutimétrica. O objetivo deste trabalho é resolver a estrutura desta substância e verificar a relação estrutura x atividade. Os dados iniciais da estrutura, obtidos por difração de raios-X usando radiação monocromatizada $K\alpha$ do molibidênio, são: $a=8,185(2)\text{Å}$, $b=14,756(3)\text{Å}$, $c=12,838(2)\text{Å}$, $\beta=91,11(2)^\circ$, $Z=4$, $V=1550,3(5)\text{Å}^3$, sistema cristalino monoclinico, grupo espacial $P2-1/n$. 1565 reflexões únicas foram medidas, das quais 1065 com $I \geq 3\sigma(I)$. A resolução da estrutura foi obtida por métodos diretos e o refinamento parcial apresenta $R=0,12$.

Determinação da Estrutura do $C_{22}O_5N_2H_{33}$

YVONNE PRIMERANO MASCARENHAS, JOSÉ
GERALDO NERY, SÉRGIO FRANCISCO DOS SANTOS
Universidade de São Paulo - USP
RONALDO ALOISE PILLI
Universidade de Campinas - UNICAMP

O trabalho visou à determinação da estrutura do composto orgânico sintético $C_{22}O_5N_2H_{33}$. Os dados experimentais foram obtidos usando-se o difratômetro automático CAD-4, radiação de $MoK\alpha$ monocromatizada por grafite, sistema ortorrômbico, grupo espacial $P2_12_12_1$, $a = 10.5937(2)$, $b = 11.4180(2)$ e $c = 18.1461(5)\text{Å}$, volume da cela = $2194.9(1)\text{Å}^3$, $Z = 4$ molec/cela, densidade calculada = 1.22 g/cm^3 , dimensão da amostra $20 \times 16 \times 35\text{ mm}$, $T = 25^\circ\text{C}$. Os dados foram medidos no intervalo de $\theta = 0$ a 25° , 2108 reflexões independentes sendo 1161 com $I = 3\sigma(I)$. A estrutura foi resolvida por métodos diretos e refinada por mínimos quadrados até um fator de discordância $R = 0.065$. Os valores encontrados para distâncias e ângulos interatômicos correspondentes aos diversos tipos de ligações são os usuais dentro do erro experimental e confirmam a estrutura molecular esperada segundo o processo de síntese utilizado.

**A NEW ORTHORHOMBIC CRYSTAL
FORM OF $[Fe(BBPPN)] ClO_4 \cdot 1/2 C_2H_2O$.**

IVO VENCATO
Depto. Física - UFSC
ADEMIR NEVES, ALEXANDRE METRAN
Depto. Química - UFSC
YVONNE P. MASCARENHAS
Instituto de Física de São Carlos - USP

The molecular and crystal structure of $[Fe(BBPPN)].PF_6 \cdot 1/2 C_2H_6O \cdot 1/2 H_2O$; $H_2BBPPN = N,N',N,N'$ - bis (2-hydroxybenzyl)(2-methylpyridyl) -1,3 - propanodiamine was determined and presented in the 1992 SBQ Meeting. Complex formula: $FeC_{29}H_{30}N_4O_2$. The structure was found to be triclinic, space group $P-1$ (nr.2), $a = 8.780(4)$, $b = 17.558(2)$, $c = 20.726(2)\text{Å}$, $\alpha = 94.61(1)$, $\beta = 92.71(2)$, $\gamma = 91.70(3)$, $\mu = 0.543\text{ mm}^{-1}$, $Z = 4$, with two independent molecules in the asymmetric unit. We intended to compare the geometric parameters of the previously unknown orthorhombic modifications with those exhibited by the triclinic polymorph. The space group and crystal structure found in our new determination differs clearly from that reported earlier: orthorhombic, space group $Fdd2$ (nr. 43), $a = 28.377(9)$, $b = 61.31(1)$, $c = 13.750(2)\text{Å}$, $V = 23924.7\text{ Å}^3$, $\mu = 0.585\text{ mm}^{-1}$, $Z = 32$, with two independent molecules in the asymmetric unit. The number of measured reflections was 7968, with 2828 observed reflections, 700 refined parameters and $R = 7.66\%$. The bond distances and angles for the cation $[Fe(BBPPN)]^+$ lie in the same range as found for

Na primeira fase, acima de 675°C, sua simetria é $P6_3/mmc$ e na terceira fase, abaixo de 435°C, o cristal possui simetria $P6_3$. Com relação à fase intermediária (entre 435 e 675°C), há controvérsias sobre a simetria e também fortes suspeitas de aparecimento de uma modulação incommensurável acima de 470°C. Fizemos medidas de difração de raios-x em monocristais pelo método de precessão, no intervalo de 450 a 600°C. Observamos uma simetria ortorrômbica (provavelmente $Pnma$) e a presença de três tipos de domínios ferroelásticos com orientação relativa de 120 graus. Ao aplicarmos pressão uniaxial no cristal, observamos no diagrama de difração o desaparecimento de alguns pontos, correspondendo à inibição de um dos tipos de domínios. Isto torna evidente o caráter ferroelástico do cristal nesta fase. Medidas preliminares realizadas sob pressão uniaxial à 550°C sugerem a existência de uma fase incommensurável, com vetor de onda da modulação ao longo de a^* . Apresentaremos resultados da dependência do vetor de onda com temperatura e pressão.

Estudo do sistema palmitoil lisofosfatidil colina-água na fase isotrópica e na transição de fase isotrópica-cúbica líquido cristalina por espalhamento de raios-X.

VALERIA CASTELETTO, LÍA QUEIROZ DO AMARAL, ROSANGELA ITRI

Instituto de Física, Universidade de São Paulo.

Os sistemas lipídeo-água apresentam transições líquido cristalinas de um extraordinário polimorfismo. Em particular, o sistema palmitoil lisofosfatidil colina (PLPC)-água, apresenta uma transição isotrópica (I)-cúbica (Q^{223})-hexagonal (H) [1].

A fase H consiste de um arranjo hexagonal de cilindros finitos revestidos pelos grupos das cabeças polares e preenchidos pelas cadeias de hidrocarbonetos dos lipídeos [2]. A fase Q^{223} consiste de duas classes diferentes de micelas: quasi-esféricas e com forma de disco. As micelas de cada classe estão centradas nas posições especiais do grupo espacial $Pm3n$ [3].

Neste trabalho é estudada a fase I com ênfase na transição I- Q^{223} . Para isto, foram estudadas soluções com concentrações Φ entre 5 e 40 % em peso de PLPC. Foi utilizado o método fotográfico de Laue (geometria de transmissão, foco pontual, $CuK\alpha$ -filtro de Ni). As curvas de espalhamento de raios-X foram obtidas com um difratômetro de baixo ângulo da Rigaku Denki (foco linha, $CuK\alpha$ -monocromador de grafite).

A análise por espalhamento de raios-X utilizando o método fotográfico de Laue, forneceu uma dependência funcional entre a distância média intermicelar (d) e Φ correspondente a objetos finitos ($d \propto \Phi^{-\frac{1}{3}}$) [4]. A análise das curvas de espalhamento foi feita via modelagem do produto do fator de forma micelar pela função de interferência intermicelar, calculada dentro da aproximação de esfera média supondo que as micelas

interagem via um potencial de Coulomb blindado [5].

[1] G. Arvidson, I. Brentel, A. Khan, G. Lindblom e K. Fontell; *Eur. J. Biochem* **152** (1985) 753.

[2] J. M. Sheddon; *Biochim. Biophys. Acta* **1031** (1990) 1.

[3] H. Delacroix, T. Gulik-Krzywicki, P. Mariani e V. Luzzati; *J. Mol. Biol.* **229** (1993) 526.

[4] R. Hentschke e J. Herzfeld; *Phys. Rev. A* **44** (1991) 1148.

[5] J. B. Hayter e J. Penfold; *Mol. Phys.* **42** (1981) 109.

IRRACIONALIDADES QUADRÁTICAS E CÚBICAS ASSOCIADAS A SIMETRIAS QUASIPERIÓDICAS DO PLANO

B. J. O. FRANCO, K. BALZUWEIT

UFMG

F. W. O. DA SILVA

UFV

Sistemas quasiperiódicos têm sido objeto de crescente interesse após a descoberta da fase quasicristalina Al-Mn em 1984 (grupo NBS - USA). Posteriormente outras ligas foram obtidas: ligas com simetrias octogonais, pentagonais e dodegagonais e fases cristalinas 1D (fases Fibonacci). As ligas quasicristalinas atualmente conhecidas correspondem a irracionalidades quadráticas. Irracionalidades não quadráticas correspondem a sistemas altamente instáveis e com efeito, ainda não foram observados na natureza. Propusemos recentemente dois "tilings" heptagonais quasiperiódicos do plano associados a sequências de Fibonacci de terceira ordem (irracionalidades cúbicas). Em tal trabalho foi feito uso de sete formas fundamentais (triângulos e paralelogramos). Os padrões obtidos apresentaram auto-similaridade sendo translacionalmente quasiperiódicos. No presente trabalho consideramos a simetria pentagonal ("Penrose tiling") e a heptagonal, usando, respectivamente, duas e três formas fundamentais (losangos). Como no nosso trabalho anterior, os padrões obtidos contém uma sequência de Fibonacci de segunda e terceira ordem nas direções pentagonal e heptagonal, respectivamente, porém, a própria sequência de Fibonacci é aqui utilizada na geração do padrão infinito.

SCHORLITA-OXIDADA E BUERGERITA: UMA ANÁLISE ESTRUTURAL COMPARATIVA

EUSÉBIO C. TORRES-TAPIA, HELIO SALIM DE

AMORIM, MANOEL ROTHIER DO AMARAL JR

Instituto de Física - UFRJ

Procuramos estabelecer uma comparação entre as estruturas da buergerita ($NaFe_3Al_6B_3Si_5O_{30}(OH,F):Fe^{3+}$) e da Schorlita ($NaFe_3Al_6B_3Si_6O_{27}(OH,F)_4:Fe^{2+}$) submetida a tratamento térmico na presença

de oxigênio. Com este tratamento observa-se a oxidação dos íons Fe^{2+} acompanhada de desidroxilação, preservando-se a estrutura básica característica dos minerais do grupo de Turmalinas. Parâmetros estruturais de amostra de Schorlita-oxidada foram refinados pelo Método de Rietveld a partir de medidas de difração de raios-x e comparados com os valores fornecidos por Barton^[1]. Análises termogravimétrica e termodiferencial relativos ao tratamento térmico, da temperatura ambiente a 1000K, foram realizados. O estado de valência dos íons ferro e sua distribuição por sítios inequivalentes foram analisadas por espectroscopia Mössbauer^[2,3]. As poucas informações sobre a ocorrência do mineral buergerita têm permitido algumas especulações^[4] sobre uma possível formação deste mineral a partir da oxidação, por processo térmico natural, da Schorlita. Pretendemos estabelecer as evidências para esta hipótese. 1. R. Barton Jr. - *Acta Crystallograph.* **B25**, 1524 (1969). 2. E. Hermon, D. J. Simkin and G. Donnay, *Tschermaks Mineralogische und Petrographische Mitteilungen* **19**, 124 (1973). 3. V. V. Korovushkin, V. I. Kuzmin and V. F. Belov, *Phys. Chem. Minerals* **4**, 209 (1979). 4. R. V. Dietrich, "The Tourmalina Group", Van Nostrand Reinhold Company New York (1985).

ANÁLISE POR DIFRAÇÃO DE RAIOS X A ALTAS TEMPERATURAS DOS ÓXIDOS

SrRuO₃ e CaRuO₃

SILVIA L. CUFFINI, JUAN A. GUEVARA, YVONNE P. MASCARENHAS

INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS. USP.

Os materiais poli-cristalinos, *SrRuO₃* e *CaRuO₃*, foram sintetizados mediante o método convencional de mistura de óxidos; usando reagentes *RuO₂*, *SrCO₃* e *CaCO₃* de alta pureza nas proporções estequiométricas. O processo de calcinação foi realizado em várias etapas, repetindo-se a moagem nas temperaturas de 1000 C e 1200 C. Os dados coletados por difração de raios X foram obtidos num intervalo de 200 C a partir de 25 C até 1000 C. Utilizando estes dados, a estrutura cristalina foi refinada pelo método de Rietveld. A partir dos resultados obtidos pode-se dizer que à temperatura ambiente tanto o *SrRuO₃* como o *CaRuO₃* não possuem simetria cúbica como mencionado em alguns trabalhos (Russian J.Inorg.Chem. **18**, 592 (1973)). A simetria obtida refinando os parâmetros até valores aceitáveis ($R_{wp}=13\%$ e $S=1,9\%$) foi ortorrômbica, *Pnma*, e concorda com resultados recentes (*Acta Cryst.* **C45** p365-367 (1989)). Os dados do *SrRuO₃*, acima da temperatura ambiente, mostram claramente uma transição de fase, que concorda com os resultados obtidos por Perturbed-Angular-Correlation Spectroscopy (PAC) (*Phys.Rev.B* vol.45, 1 (1994)). Também no caso do *CaRuO₃* os dados estruturais obtidos concordam com os fornecidos por PAC. Neste último caso,

não detectou-se qualquer transição de fase até 1000 C. Agradecimentos: FAPESP, CAPES, CNPq e FINEP

APLICAÇÃO DO MÉTODO DE RIETVELD NA DETERMINAÇÃO DO TAMANHO MÉDIO DE CRISTALITO, MICRODEFORMAÇÃO E ANÁLISE QUANTITATIVA DE FASES EM CERÂMICAS PMN

CARLOS DE OLIVEIRA PAIVA-SANTOS, MARIA APARECIDA ZAGHETE, JOSIMARA CRISTINA DE CARVALHO, JOSÉ ARANA VARELA

Instituto de Química, IQ - UNESP, Araraquara

E. LONGO
DQ - UFSCar

Tamanho de cristalito, microdeformação e proporção de fases são características importantes dos materiais e que podem ser determinadas fazendo uso das técnicas de difração de raios X e de neutrons. Com o método de Rietveld todas essas análises podem ser realizadas ao mesmo tempo que se estuda a estrutura cristalina das fases presentes nos materiais. Neste trabalho o MR, com dados de difração de raios X, foi aplicado nas análises da estrutura cristalina, proporção das fases perovskita e pirocloro, tamanho de cristalito e microdeformação em amostras de Magnésio Niobato de Chumbo (PMN) preparados por síntese química. A fase perovskita do PMN variou de 82% em massa para a amostra pura (P) para 87% em massa para a amostra dopada com 1% molar de $BaTiO_3$ em solução citrato + 2% molar de MgO (DMg), enquanto que o tamanho de cristalito foi sempre maior que 250 nm e a microdeformação $\langle \epsilon \rangle$ decresceu de 100×10^{-5} (P) para 33×10^{-5} (DMg). Para a fase pirocloro do PMN o cristalito decresceu de 47 nm (P) para 34 nm (DMg).

DETERMINAÇÃO DAS CARACTERÍSTICAS DOS DOMÍNIOS MOSAICOS DE UM CRISTAL POR MEIO DE VARREDURAS ω TRIDIMENSIONAIS

SABRINA METAIRON, VERA LÚCIA MAZZOCCHI, CARLOS BENEDICTO RAMOS PARENTE, SONIA LÍCIA BALDOCHI

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

Este trabalho é parte de um estudo mais amplo, que busca estabelecer uma metodologia de análise da qualidade cristalina de monocristais. O conhecimento da qualidade cristalina de monocristais serve

tanto ao crescer de cristais, no acompanhamento do método de crescimento empregado, quanto ao usuário de monocristais, na verificação da viabilidade de seu emprego. Neste trabalho, é mostrado como, a partir de varreduras ω tridimensionais, obtidas com difração de nêutrons, é possível a visualização dos domínios, etapa inicial na determinação de suas características. O emprego de nêutrons permite observar todos os domínios em uma única varredura ω tridimensional. Isto porque, devido à grande penetrabilidade dos nêutrons na maioria dos materiais, e às grandes dimensões dos feixes usualmente empregados, toda a massa cristalina pode ser observada de uma só vez, com o cristal todo imerso no feixe. A obtenção de varreduras ω tridimensionais, por sua vez, permite a visualização de domínios muito afastados angularmente, que poderiam não aparecer em uma única curva bidimensional. Neste trabalho, foram determinadas varreduras ω tridimensionais de cristais de $BaLiF_3$. As curvas individuais $I_x\omega$, que constituem a varredura tridimensional, foram ajustadas por gaussianas, e, em seguida, deconvoluídas da largura experimental. A largura experimental do difratômetro de nêutrons foi obtida de um cristal perfeito de LiF. Com a deconvolução, o gráfico tridimensional resultante mostra os domínios mosaicos com suas larguras intrínsecas.

Apoio financeiro: "Internacional Atomic Energy Agency" (IAEA) e Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

SIMULAÇÃO DE "ROCKING CURVES" DE SUPER-REDES MONOCRISTALINAS DE $Ge/Si_{0,3}Ge_{0,7}$

H. T. PALACIOS, C. A. M. CARVALHO, M. C. A. FANTINI

Instituto de Física, USP, São Paulo, SP

O modelo geral de uma super-rede cristalina consiste de uma superposição de M bicamadas cristalinas de materiais A e B, onde cada camada j é caracterizada pelos fatores de estrutura F_{Aj} e F_{Bj} , espessuras t_{Aj} e t_{Bj} , e distâncias de interface a_{Aj} e a_{Bj} . Cada camada cristalina consiste, por sua vez, de N planos atômicos de distância interplanar d . A estrutura interna de uma super-rede depende das condições de crescimento, as quais podem induzir flutuações aleatórias (desordem) na espessura das camadas, no número de camadas, nas distâncias interplanares e imperfeições nas interfaces. Tais defeitos estruturais podem ser modelados através de distribuições gaussianas ao redor de um valor médio. Assim, o processo de modelamento dá informações sobre a estrutura interna da super-rede, ajustando-se a intensidade medida experimentalmente à intensidade cal-

culada a partir dos modelos teóricos. O modelo teórico utilizado é baseado na teoria cinemática de difração, no qual não somente as desordens acima mencionadas são consideradas, mas também a expansão e contração dos planos atômicos próximos à interface entre as camadas, de uma quantidade determinada $\Delta d^{-\alpha}$, onde α é uma constante que controla o decaimento do "strain" a partir da interface. A intensidade de espalhamento calculada é dada pela média $I(q) = \langle F_{SL}(q)F_{SL}^*(q) \rangle$, onde $F_{SL}(q)$ é o fator de estrutura da super-rede de M bicamadas, obtidos a partir dos fatores de estrutura F_j de uma camada cristalina j , e do fator de espalhamento atômico f de uma monocamada. O processo de simulação e comparação entre as curvas teórica e experimental foi realizado através do programa "uperlattice Refinement from X-ray diffraction" - SUPREX, o qual assume como valores iniciais as distâncias interplanares "bulk" da super-rede e resultados experimentais obtidos a baixo ângulo. O ajuste é obtido pelo método dos mínimos quadrados e a simulação foi efetuada para três diferentes amostras de super-redes monocristalinas de $Ge/Si_{0,3}Ge_{0,7}$, caracterizadas por difração a alto e baixo ângulo. Os resultados obtidos permitiram determinar os parâmetros de espaçamento interplanar e as espessuras das bicamadas, bem como a ordem de grandeza das flutuações no número de planos e o parâmetro de rede médio, o qual é comparado aos valores experimentais.

PERFIS DE DIFRAÇÃO DE RAIOS-X EM MODELOS DE CRISTAIS PERFEITOS

HELIO SILVA CAMPOS, DIONICARLOS SOARES DE VASCONCELOS, WLODZIMIERZ ALEKSANDER KELLER
Universidade Federal da Bahia

A caracterização, por técnicas de difração de raios-X, de estruturas artificialmente crescidas exige um rigoroso tratamento analítico para o campo eletromagnético espalhado no meio cristalino. A obtenção de padrões de difração, simulados com parâmetros experimentais, representa uma valiosa contribuição para o aferimento do grau de perfeição das estruturas. Neste trabalho, utilizamos um formalismo unificado baseado no princípio da auto-consistência de Ewald para analisar o espalhamento de raios-X em modelos de mono e heteroestruturas com qualquer espessura. O cristal é tratado como um conjunto de planos de dipolos induzidos acoplados através do campo de propagação do meio de modo que qualquer um dos planos, e os campos associados ao mesmo, pode ser a unidade de espalhamento auto-consistente. Com este formalismo, são calculadas a intensidade do campo espalhado (transmitido e refletido) e a respectiva fase. Introduzindo-se um fator para a absorção do campo incidente em cada plano, foram obti-

dos perfis de difração representativos dos parâmetros adotados, como em uma realização experimental. Os resultados apresentados, correspondentes a modelos de estruturas compostas de Ge, Si, GaAs, AlAs, e InP, delineiam com precisão numérica as regiões de ocorrência da saturação do campo difratado em cada situação, especialmente através dos valores para a fase.

FORMAS MORFOLÓGICAS DE EQUILÍBRIO EM CRISTAIS APERIÓDICOS

K. BALZUWEIT

Universidade Federal de Minas Gerais

M. KREMERS, H. MEEKES, M. A. VERHEIJEN, P. BENNEMA

Katholieke Universiteit Nijmegen

Desde os primórdios da cristalografia, o estudo da morfologia dos cristais tem desempenhado importante papel como auxílio simples na determinação de estruturas cristalinas quanto em teorias fenomenológicas relativas ao crescimento dos cristais.

Seguindo as mesmas leis dos índices racionais de Haüy, a lei de Bravais-Friedel-Donnay-Harker, a teoria de Hartman-Perdok e outras, para cristais que podemos denominar de convencionais; pode-se estender o mesmo tipo de tratamento para cristais aperiódicos.

Utilizamos então a idéia de um superespaço de dimensão maior que três, contendo a simetria de translação perdida no espaço de dimensão três.

Analiza-se a situação de um cristal modulado incomensurável unidimensional com somente um vetor de onda de modulação. E então generalizam-se os procedimentos, leis e teorias na determinação das faces de equilíbrio mais prováveis nos cristais aperiódicos; no presente caso um cristal modulado incomensurável unidimensional.

Avaliação de parâmetros termodinâmicos a partir de dados de difração de raios-X para um mineral interestratificado Clorita/Esmectita

WILSON OTTO GOMES BATISTA

IFUFBA/CEFET-Ba

ZBIGNIEW BARAN

IFUFBA

JOAQUIM JULIO DE OLIVEIRA

IGUFBA

Em recente comunicação (XVII ENFMC-Caxambú/1994) apresentamos um modelo para tratar minerais interestratificados como cristais unidimensionais. Usamos um modelo de Ising unidimensional através do qual podemos estabelecer uma relação entre parâmetros termodinâmicos e

parâmetros cristalográficos. Para verificar os resultados fornecidos por tal modelo usamos dados da literatura e dados por nós obtidos através da difração de raios-X de uma amostra de clorita/esmectita. Esta amostra foi submetida a três tratamentos: (1) orientação preferencial, (2) orientação preferencial e saturação com glicoletilênico e (3) orientação preferencial e aquecimento a 400°C durante 24 horas. Os difratogramas obtidos das duas primeiras amostras foram suficientes para confirmar que o material em estudo é de fato um mineral interestratificado e também para avaliar as proporções dos componentes clorita(0.7)/esmectita. No difratograma obtido da amostra que foi submetida ao aquecimento observamos o colapso parcial da esmectita, evidenciando claramente uma interestratificação com presença de dois espaçamentos interplanares $d^c=14.3$ Å e $d^e=10.3$ Å. Para avaliar as probabilidades p_{ab} (a=clorita, b=esmectita) de uma camada de clorita ser sucedida por uma camada de esmectita usamos o método direto da transformada de Fourier (MacEwan, 1956), que consiste em obter uma função de probabilidade de distribuição de dois diferentes espaçamentos interplanares. Os resultados obtidos indicam uma estrutura zonal irregularmente interestratificada. Estes resultados foram usados para calcular o número médio de pares vizinhos N_{ab} e comprimento médio das fileiras L_a e desta forma avaliamos a energia de interação $w=900$ cal/mol de pares de camadas ab. Os valores calculados estão de acordo com as previsões do modelo teórico que determina uma energia positiva e finita para uma estrutura irregularmente interestratificada com tendência a segregação independente da proporção dos componentes.

DETECÇÃO DE FALHAS DE EMPILHAMENTO NO $ZrCr_2$ E TRANSIÇÃO DE FASE NO HIDRETO $ZrCr_2H_3$ POR MEIO DA DIFRAÇÃO DE RAIOS-X E CORRELAÇÃO ANGULAR PERTURBADA DE RAIOS GAMA.

JOSÉ MESTNIK FILHO, ARTUR WILSON CARBONARI, WILLI PENDL JÚNIOR, JACÓ IZIDRO DE MOURA, RAJENDRA NARAIN SAXENA

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares

Foi detectada a existência de defeitos de empilhamento no composto absorvedor de hidrogênio $ZrCr_2$ através da correlação angular perturbada de raios gama (TD-PAC), utilizando núcleos de ^{181}Ta ocupando sítios do zircônio. Realizando-se um refinamento de estrutura do $ZrCr_2$ pelo método de Rietveld e uma análise estrutural dos sítios de Zr próximos a uma falha de empilhamento, foi observado que existem dois sítios para os átomos de zircônio nesta liga que são responsáveis pela presença de uma distribuição relativamente larga de gradientes de campo elétrico nos sítios ocupados pelos núcleos de ^{181}Ta . Um desses sítios possui simetria

pontual $3m$, sendo um sítio normal de uma estrutura cristalina hexagonal do tipo $P6_3/mmc$. O outro sítio origina-se das falhas de empilhamento, onde, devido a um deslizamento de um plano de átomos de Cr, ocorre uma mudança na primeira vizinhança de átomos de Zr no sentido de, neste sítio, os átomos de Zr tenderem a relaxar para uma configuração local que possui simetria pontual $\bar{4}3m$, dando origem a tensões em torno do defeito.

O gradiente de campo elétrico médio e seu parâmetro de assimetria η , nos sítios ocupados pelos núcleos de

prova, são independentes da temperatura no intervalo $77 \leq T \leq 300$ K enquanto que para o hidreto $ZrCr_2H_3$ ocorre uma transição de fase em 230 K. Esta transição de fase é relativamente larga, ocorrendo no intervalo de temperatura entre 200 e 260 K. Acima da temperatura de transição de fase, a estrutura metálica do hidreto é a mesma que a da liga não hidrogenada. A estrutura do hidreto abaixo da transição de fase não é, até o momento, conhecida.

FÍSICA ESTATÍSTICA E FENÔMENOS CRÍTICOS

Workshop: Sistemas Complexos e Desordena-
dos (EST) - 07/06/95

Frustrated Percolation, Spin Glasses and Glasses

ANTONIO CONIGLIO

Dipartimento di Scienze Fisiche, Università di Napoli Mostra d'Oltremare Pad. 19, 80125 Napoli, Italia

The static and dynamic properties of the frustrated percolation model are investigated. This model, which contains frustration as an essential ingredient, exhibits two transitions: a percolation transition at a temperature T_p with critical exponents of the ferromagnetic $s = 1/2$ state Potts model, and a second transition at a lower temperature T_g in the same universality class of the Ising spin glass model. Above T_p the time dependent autocorrelation function is characterized by a single exponential, while for $T_p > T > T_g$ preliminary numerical results show a broad shoulder or plateau typical of a structural glass transition. Below T_g the system is in a glassy state with an infinitely long relaxation time. It is also shown that a frustrated q -state Potts Hamiltonian gives for $q = 1$ the bond frustrated percolation model and for $q = 2$ the spin glass model. Finally it is argued that the site version of the frustrated percolation model may be relevant to describe structural glasses.

Domínios induzidos por frustração e campo magnético em antiferromagnetos (AF) desordenados :

$$Fe_xZn_{1-x}F_2$$

ERNESTO CARNEIRO PESSOA RAPOSO, MAURÍCIO DOMINGUES COUTINHO-FILHO
UFPE

Recentemente demonstramos por simulação numérica (campo médio sítio-a-sítio) [1] que a pequena interação frustrada presente no $Fe_xZn_{1-x}F_2$ é responsável pelo aparecimento da fase vidro de spin (VS) para $x = 0.25$ [2]. Neste trabalho apresentamos resultados de um estudo da formação de domínios e instabilidades induzidos por um campo magnético externo H , explicitando também os efeitos de frustração. Dentre os vários resultados destacamos: i) a visualização microscópica da fase VS a $H=0$ e baixas temperaturas com média térmica do spin local $\langle m_i \rangle_T \neq 0$, magnetização de sub-rede $M = 0$ e parâmetro de Edwards-Anderson $Q \neq 0$. ii) Na amostra a $x = 0.25$, não-frustrada, observamos que o campo magnético em um ciclo zfc (zero-field cooling) estabiliza uma ordem AF de longo alcance. A presença de frustração introduz domínios (inversão de spins) nesta ordem AF. iii) Por outro lado, num ciclo fc (field cooling) em campos baixos e ultra-baixos ($\sim 1G$ e $\ll 1G$), a configuração de spins é praticamente idêntica à VS de i) com domínios induzidos pelo campo, independente da presença de frustração. iv) Finalmente, observamos que a linha H-T de irreversibilidade (com expoente compatível com o valor experimental, independente da presença de frustração) apresenta reentrância (para campos ultra-baixos) que isola a fase vítrea para $H \neq 0$ da fase VS para $H=0$.

[1] E.P. Raposo, M.D. Coutinho-Filho e F.C. Montenegro, "Spin-glass phase in $Fe_{0.25}Zn_{0.75}F_2$ ", Europhys. Lett. (1995), a ser publicado.

[2] F.C. Montenegro, M.D. Coutinho-Filho e S.M. Rezende, Europhys. Lett. 8, 383 (1989).

UM MODELO BOOLEANO PARA ENVELHECIMENTO BIOLÓGICO

THADEU J. P. PENNA

Instituto de Física - Universidade Federal Fluminense

É bem conhecido que vários mecanismos contribuem para o processo de envelhecimento biológico. Recentemente, várias teorias evolucionárias para o envelhecimento biológico têm sido formuladas e testadas. Uma delas diz respeito ao acúmulo de mutações, isto é, a pressão evolutiva é maior em mutações deletérias (desvantajosas) que se manifestam mais cedo na vida. Mutações ocorrendo muito tempo após a idade de reprodução seriam mais prováveis.

Baseado nesta hipótese, formulamos um modelo Booleano para envelhecimento biológico. Neste modelo, cada indivíduo é uma tira de bits (representando cada "ano") que representa sua vida (T.J.P.Penna, *J.Stat.Phys.* (1995)). Se o n -ésimo bit do indivíduo estiver setado (valor 1), então uma mutação deletéria se manifestará naquela idade. Após um dado número de manifestações de mutações deletérias, o indivíduo morre. Em uma população, o indivíduo também pode morrer por competição (fator de Verhulst). O indivíduo pode ainda reproduzir-se transmitindo sua tira de bits para os descendentes, a menos de algumas mutações no processo do nascimento. Este modelo foi aplicado, com sucesso, a alguns problemas como a senescência catastrófica do salmão do Pacífico e a diminuição do estoque de bacalhau no Atlântico Norte (ver S. Moss de Oliveira *et al*, nesta reunião). Este modelo é particularmente adequado para implementação em computadores paralelos, onde mais de 5 milhões de indivíduos podem ser envelhecidos em menos de 10 minutos, em 128 processadores de um Intel Paragon (T.J.P.Penna and D. Stauffer, *IJMPC* (1995)). Mostraremos ainda, simulações relativas a escolha entre ser haplóide e diplóide. Segundo estes resultados, a escolha pelo diploidismo pode ser feita mesmo se as mutações deletérias dominarem com probabilidade maior que 25% , como se acreditava anteriormente.

Coulombic Criticality in General Dimension

YAN LEVIN

UFRGS

XIAO-JUN LI, MICHAEL E. FISHER

University of Maryland

Debye-Huckel Theory for spheres of diameter a with charges $\pm q$, is extended to general dimension d . Explicit results include Bjerrum association of $+/-$ ions and the dipole-ionic solvation energy. For all $d > 2$ a critical point terminates conducting-liquid/conducting-vapor coexistence: the critical density $\rho_c = \rho a^d$ falls as $d \downarrow 2$ but $T_c^* = k_B T_c a^{d-2}/q^2$ rises, suggesting that the fluctuations are actually becoming less important as one approaches $d = 2$. When $d = 2$ and insulating vapor appears for $T^* < \frac{1}{4}$ (the Kosterlitz-Thouless point) separated from conducting fluid by an infinite-order critical line ending at a tricritical point: $\rho_t^* = \rho_c^*(d \rightarrow 2) \approx .004$, $T_t^* = T_c^*(d \rightarrow 2) = .25$; for $\rho^* > \rho_t^*$, the transition is first order. The Debye screening length diverges as $\xi \approx e^{\nu/\nu}$ ($\nu = 1$) as the insulating phase is approached. Allowing for the population of dipoles present in $d = 2$ renormalizes phase diagram reproducing Kosterlitz-Thouless result ($\nu = \frac{1}{2}$) up to the tricritical density after which point the transition becomes first order.

Sistemas Complexos (EST) - 07/06/95

Conformational Phase Transitions in Polyampholytes

YAN LEVIN, MARCIA C. BARBOSA

UFRGS

Debye-Huckel theory augmented by the Bjerrum's ideas of dipole formation and Flory's affine network theory of rubber elasticity is applied to the study of neutral Polyampholytes (PA), polymers that in addition to neutral monomers contain charged groups. It is shown that in a good solvent and in the low temperature state the polyampholytes with N monomers resembles an affine network and has a radius of gyration which scales as N^ν with $\nu = 2/5$. As the temperature is raised, the polymer undergoes a first order collapse transition into a globular state in which $\nu = 1/3$. Changing the quality of the solvent, the network, at low temperature, has a radius that scales with $\nu = 3/8$ at the θ point and with $\nu = 1/3$ for poor solvents. In this last case, the change in temperature leads to a first-order transition

between two collapse states. The value of the transition temperature is calculated as a function of the polymer size.

UM MODELO "BOOLEANO" PARA ENVELHECIMENTO BIOLÓGICO APLICADO A PEIXES

SUZANA MOSS DE OLIVEIRA, THADEU J. P. PENNA

UFF

DIETRICH STAUFFER

Cologne University - Germany

Utilizando o recém proposto modelo "Booleano" para o envelhecimento biológico¹, mostramos como um pequeno aumento na taxa de pesca pode subitamente acabar com uma população estável de peixes. Mostramos também como a devolução ao mar de peixes menores que um certo tamanho pode evitar tal desastre econômico e ecológico, que atualmente vem preocupando cada vez mais os cientistas de todo o mundo². Por ser um modelo que se baseia na utilização de variáveis "Booleanas", sua implementação computacional é simples, permitindo a simulação de populações

de mesmo tamanho que as verdadeiramente existentes³ (centenas de milhares de peixes). São apresentados ainda resultados da aplicação do modelo ao caso específico do Salmão, cuja principal característica está no fato de morrer logo após a reprodução (senescência catastrófica).

[1]- T.J.P. Penna, J.Stat.Phys. 78, 1629 (1995); T.J.P. Penna and D. Stauffer, Int.J.Mod.Phys.C, in press.

[2]- B. Holmes, Science 264, 1252 (1994); T.P. Hughes, Science 265, 1547 (1994).

[3]- S. Moss de Oliveira, T.J.P. Penna and D. Stauffer, Physica A, in press.

GENERALIZAÇÃO NUMA REDE DE MULTIESTADOS

DAVID R. C. DOMINGUEZ

Universidade Autónoma de Madri

WALTER K. THEUMANN

UFRGS

Utilizando uma dinâmica paralela determinística sem ruído, estudamos a habilidade de generalização numa rede neural com feedback, no limite de diluição extrema com neurônios em mais de dois estados. Nesse limite, a dinâmica é resolvida exatamente. A generalização consiste na criação de padrões grandes (os conceitos), como pontos fixos da dinâmica, a partir de padrões pequenos de baixa atividade. Acharmos o overlap entre um número macroscópico de conceitos binários quando a rede é treinada mediante a apresentação de exemplos de atividade variável segundo a regra de aprendizado de Hebb. Obtemos resultados finais para qualquer número de estados e resultados explícitos para neurônios de três estados que permanecem inativos abaixo de um limiar não nulo. Acharmos um diagrama de fases de generalização, uma fase "caótica" e uma fase paramagnética, assim como as bacias de atração destas fases. Obtemos curvas para o erro de generalização em função do limiar, do número de exemplos e do parâmetro de correlação entre conceitos e exemplos. A comparação com o erro de generalização na rede treinada com exemplos de atividade plena mostra que um aumento moderado do limiar reduz o erro de generalização na presença de exemplos de baixa atividade.

EQUIVALENCE BETWEEN PERCEPTRON LEARNING WITH NOISY EXAMPLES AND LEARNING NOISELESS EXAMPLES IN A COMMITTEE MACHINE.

MAURO COPPELI DA SILVA, OSAME KINOCHI,

NESTOR CATICHA

IFUSP

We study learning from single presentation of examples (*incremental* or *on-line* learning) in single-layer perceptrons and committee machines. Lower bounds for the perceptron generalization error as a function of

the noise level ϵ in the teacher output are calculated. We find that optimal local learning in a tree committee machine with K hidden units is simply related to optimal learning in a simple perceptron with a corresponding noise level $\epsilon(K)$. For large α and finite K the generalization error decays as α^{-1} , where α is the number of examples per adjustable weight in the committee machine. We also show that on-line learning is possible even in the $K \rightarrow \infty$ limit, but with the generalization error decaying as $\alpha^{-1/2}$. The simple Hebb rule can also be applied to the tree committee machine, but now the error decays as $\alpha^{-1/2}$ (for finite K) and $\alpha^{-1/4}$ (for $K \rightarrow \infty$).

THE SPACE OF INTERACTIONS WITH DEFINITE SYMMETRY IN CONNECTED NEURAL NETWORKS WITH BIASED PATTERNS.

ALBA THEUMANN

UFRGS

We study the analytical solution to the problem of calculating the volume in the phase space of interactions that allow a set of biased patterns $\{\xi_i^\mu\}$, $i = 1, \dots, N$, $\mu = 1, \dots, p$ to be fixed points of the dynamical equations for a network of N neurons $S_i \pm 1$ located at sites $i = 1, \dots, N$. The asymmetric interactions $J_{ij} \neq J_{ji}$ satisfy a spherical condition and a symmetry constraint controlled by the continuous symmetry parameter η , $-1 \leq \eta \leq 1$. When $\eta = 0$ the interactions J_{ij} and J_{ji} are uncorrelated, while for $\eta = +1(-1)$ we recover the symmetric(asymmetric) case. The components of a pattern are considered to be independent random variables $\xi_i^\mu = \pm 1$ with means on "bias" $\langle \xi_i^\mu \rangle = b$. The problem for unbiased patterns, $b = 0$, was solved in ref(1) and are more generally valid for fully connected neural networks and are not restricted to low values of the connectivity. In the present work we extend the method of ref(2) to calculate the volume of the phase space of interactions for the case of biased patterns with $0 < b < 1$. In the process of averaging over the random patterns we demonstrate that the leading contributions of a cumulant expansion can be mapped into the free energy of Thouless, Anderson and Palmer (TAP) for a spin glass³. To be consistent with ref(1) we look for replica symmetric and site independent solutions of the saddle point equations. In these equations the "ferromagnetic bias" $g = \frac{1}{N} \sum_j J_{ij}$ appears affected by a factor $\frac{1}{N}$, then it is negligible in the thermodynamic limit. The value of g , however, is given by the solution of TAP-like equations, that are not in general exactly soluble. An approximate solution that interpolates correctly between the known results for $b = 0$ and $\eta = 0$ is presented.

[1] Gardner E.,Gutfreund H. and Yekutieli I, J.Phys. A:Math. Gen.,**22** 1995(1989)

[2] Theumann Alba, J.Phys. A: Math. Gen, to be published

[3] Sommers H.J, Z.Physik B 31, 301(1978)

**Aprendizagem e Generalização em Redes
Neurais Feed Forward com Multi-Interações**
EVALDO BOTELHO, RITA M. C. DE ALMEIDA, JOSÉ
ROBERTO IGLESIAS
IF UFRGS

Consideramos aprendizagem e generalização no modelo para redes de neurônios feed-forward multi-interagentes recentemente proposto por H.-O. Carmesin. Com uma definição a priori da arquitetura da rede baseada nas simetrias apresentadas pela regra a ser aprendida, definimos uma regra de Hebb generalizada, estendemos o algoritmo de aprendizagem de máxima estabilidade para multi-interações e obtemos as curvas de erro de aprendizagem e de treinamento. Para as regras cujas diferentes ordens de sinapses não são correlacionadas os resultados obtidos para o perceptron simples relacionados à regra de Hebb e aos cálculos de réplica no espaço dos acoplamentos podem ser adaptados para redes multi-interativas através de uma simples renormalização do número total de acoplamentos independentes. Resultados analíticos e de simulações numéricas são comparados e demonstram excelentes resultados.

*Fenômenos Críticos e Estatística Geral (EST) –
07/06/95*

**Singularities near tricritical end
points: applications to ferroelectric transitions**
E. L. DE SANTA HELENA, MARCIA C. BARBOSA
UFRGS

Systems where a phase transition is induced by bi-quadratic coupling of two different modes are analyzed utilizing a Landau-type free energy. The phase diagram of these systems have a critical line that meets a first-order phase boundary surface at a point that can be either a critical end point or a tricritical end point. We show that this phase boundary close to the critical end point exhibits singularities associated with the nonanalyticities of the critical line, confirming our previous phenomenological theory. Similarly, by means of scaling arguments, we show that, near the tricritical end point, the phase boundary should exhibit singularities associated with the tricritical end point. We then

show that the phase boundary close to the tricritical end point also exhibits singularities but now associated with the tricritical line. Applications to the paraelectric to ferroelectric transitions in $NaH_3(SeO_3)_2$ and $Bi_4Ti_3O_{12}$ compounds are suggested.

**DEMONSTRAÇÃO SIMPLIFICADA PARA
A REGRA DAS FASES DE GIBBS EM
SISTEMAS HOMOGÊNEOS.**

FERNANDO DE MAGALHÃES COUTINHO VIEIRA
Instituto de Biofísica - UFRJ

A famosa regra das fases de Gibbs nos diz que um sistema composto por n espécies químicas apresenta, no máximo, $n + 2$ fases em equilíbrio. Tal resultado encontra aplicações em diversos problemas de Física, Química, Ciência dos Materiais, etc. Apesar disto, os argumentos comumente usados para justificar tal proposição possuem deficiências, como se mostra facilmente. Por outro lado, Noll¹ e Feinberg² forneceram demonstrações para a regra das fases, a partir de hipóteses precisamente definidas. Vamos apresentar uma demonstração simples, porém completa, para a regra das fases de Gibbs em sistemas homogêneos, baseada nos trabalhos citados anteriormente. Além do caráter didático, cremos que esta demonstração captura vários elementos essenciais dos resultados mais gerais de Noll e Feinberg, servindo para comparação com outras linhas de desenvolvimento sobre o assunto. Discutiremos aspectos da relação entre estes teoremas com casos em que o número de fases em equilíbrio excede aquele previsto na formulação completa da regra das fases.

- [1] W. Noll, Arch. Rational Mech. Anal., 38 (1970) 1.
[2] M. Feinberg, Arch. Rational Mech. Anal., 70 (1979) 219.

**EFEITO DO CAMPO MAGNÉTICO NO
MODELO DE ISING COM INTERAÇÕES
ANTIFERROMAGNÉTICAS
COMPETITIVAS NA REDE DE BETHE NO
LIMITE DE COORDENAÇÃO INFINITA.**
MARCELO HENRIQUE ROMANO TRAGTENBERG
UFSC

Recentemente, estudamos o efeito de campo magnético no modelo de Ising com interações ferromagnéticas entre primeiros vizinhos e antiferromagnéticas entre segundos vizinhos na rede de Bethe (F-AF) (Tragtenberg e Yokoi, "Field Behavior of an Ising Model with

Competing Interactions on the Bethe Lattice", 1994, submetido ao Physical Review E). O comportamento do modelo em que ambas as interações são antiferromagnéticas (AF-AF) tem várias diferenças em relação ao caso (F-AF). Preservando o caráter competitivo das interações, o diagrama de fases deste modelo a campo nulo é semelhante ao do caso (F-AF) e deste pode ser obtido através de uma transformação simples. No entanto, o estado fundamental do caso (AF-AF) na presença de campo é bem mais rico que no caso (F-AF). Os diagramas de fases a temperatura finita no caso (AF-AF), na presença de campo, foram obtidos através do estudo do limite de estabilidade da fase paramagnética e de outras técnicas descritas em detalhe na referência acima citada. A forma geral dos diagramas temperatura versus campo magnético, para valores fixos do parâmetro de competição, tem uma semelhança com o antiferromagneto puro na presença de campo. Regiões de co-estabilidade entre diferentes fases ordenadas são também observadas nos diagramas de fases obtidos para certos valores do parâmetro de competição.

MODELO DE POTTS UNIDIMENSIONAL COM INTERAÇÕES DE LONGO ALCANCE

AGLAÉ CRISTINA NAVARRO DE MAGALHÃES
CBPF

SERGIO ALEJANDRO CANNAS

Fa.M.A.F, Universidad Nacional de Córdoba

Estudamos, através de um grupo de renormalização do tipo proposto por Niemeijer e van Leeuwen, o ferromagneto de Potts com q estados, cujos acoplamentos J_{ij} decaem como potência ($J_{ij} = Jr^{-\alpha}$) ($\alpha > 0$) da distância r_{ij} entre spins nos sítios i e j de uma cadeia linear. Recentemente Cannas obteve, para $q = 2$ (modelo de Ising), boas estimativas para a temperatura crítica $T_c(\alpha)/J$ (que reproduzem todos os resultados exatos conhecidos) e para o expoente crítico associado ao comprimento de correlação $\nu(\alpha)$ (cujo comportamento assintótico para $\alpha \rightarrow 1$ concorda com o exato). Estamos estendendo estes cálculos para um valor genérico do número de estados q do modelo de Potts. Nossos cálculos mostram que, para $\alpha > 2$ não existe transição de fase à temperatura não nula (qualquer que seja q), concordando com o resultado exato. Nossos resultados fornecem, pela primeira vez em nosso conhecimento, boas aproximações (pelo menos para $q = 2$) para T_c e ν qualquer que seja o valor de α .

TRANSIÇÕES DE FASE NUM MODELO DE SPIN-1 COM INTERAÇÃO A QUATRO CORPOS NA REDE QUADRADA.

C. BUZANO

Politécnico di Torino, Itália

L. R. EVANGELISTA

UEM

O modelo de Blume-Emery-Griffiths (BEG), com um termo de interação a quatro spins (caracterizado pelo parâmetro Q) é considerado. O estado fundamental do modelo apresenta uma grande variedade de fases. O diagrama de fase em temperatura é detalhadamente investigado com o Método Variacional sobre "Clusters" na aproximação de quadrado. Nessa aproximação o método permite calcular, naturalmente, os parâmetros de ordem e as correlações de até quatro corpos. Além disso, o método apresenta a vantagem de identificar, de forma simples, a ordem da transição de fase. Valores representativos para os parâmetros do modelo de BEG são utilizados como ponto de partida para uma análise do efeito do termo de interação a quatro corpos sobre as transições de fase. Em particular, a influência desse termo sobre o fenômeno de reentrância e sobre a presença de pontos multicríticos é discutida. O caso $Q = 0$ (BEG) é analisado e os resultados são comparados com aqueles obtidos com outras técnicas.

TERMODINÂMICA ESTENDIDA DE GASES IONIZADOS

CHRISTINE FERNANDES, G. M. KREMER
UFPR

Desenvolvemos uma teoria baseada na termodinâmica estendida para uma mistura binária constituída de ions e elétrons e que caracterizam um gás completamente ionizado. Os campos básicos desta teoria são as densidades de massa, as velocidades, os tensores de tensão e os fluxos de calor de cada constituinte da mistura, perfazendo um total de 25 campos escalares. A generalidade das equações constitutivas é restrita através da exploração do princípio da indiferença ao referencial e do princípio da entropia. A partir das equações de campo desta teoria é possível, através de um processo iterativo, determinar as leis de Navier-Stokes, Fourier e Ohm e identificar os tensores de viscosidade de cisalhamento, condutividade térmica, condutividade elétrica e os tensores dos coeficientes dos efeitos cruzados. As relações de Onsager para os coeficientes de transporte na presença de campos magnéticos externos são verificadas e os efeitos termoelétricos, galvanomagnéticos e termomagnéticos são também analisados.

Phase Transition in the Spatially Anisotropic XY Model

ANTÔNIO SÉRGIO TEIXEIRA PIRES

Afrânio Rodrigues Pereira e

MARIA ELIZABETH DE GOUVÊA

Departamento de Física - ICEx - UFMG

There are many layered materials in which the different layers are sufficiently weakly coupled so that they behave in many ways like two-dimensional systems. An example of foremost importance is high-temperature superconductors: they have a very highly

anisotropic structure of superconducting layers weakly coupled through intervening insulating layers by the Josephson effect.

In this work we consider the renormalization effects of the interlayer and intralayer coupling using a generalized self-consistent harmonic approximation, on the classical three-dimensional spatially anisotropic XY model. We remark that this model can be viewed as a model of superconductors for which the magnitude variations of the order parameter have been suppressed. We calculate the spin-stiffness, the magnetization and show that the interplane coupling effectively ceases to be felt by the vortices, present in the model for temperatures above the critical temperature. The model, then, is effectively reduced to a two-dimensional planar model.

ESTUDO DO MODELO ANNNI NA PRESENÇA DE CAMPO MAGNÉTICO USANDO APROXIMAÇÃO DE CAMPO MÉDIO.

FRANCISCO F. BARBOSA FILHO

Depto. de Física - Univ. Federal do Piauí, CAPES-PICD

CARLOS S. O. YOKOI

Instituto de Física - USP

Estudamos o modelo ANNNI (Axial Next-Nearest-Neighbour Ising) para a rede cúbica simples na presença de campo magnético H , a temperatura finita, T . Este modelo consiste de interações ferromagnéticas entre primeiros vizinhos, $J_1 > 0$, e antiferromagnéticas entre segundos vizinhos, $J_2 < 0$, que competem pelo ordenamento dos spins ao longo de um eixo (eixo z), de interações ferromagnéticas entre primeiros vizinhos, $J_0 > 0$, dentro de planos perpendiculares a este eixo e do termo com campo, HS_i . Estudamos os diagramas de fases no espaço de parâmetros $p - T - H$ para valores constantes do parâmetro de competição $p = -J_2/J_1$. As fases encontradas nestes diagramas foram determinadas resolvendo as equações de campo médio através da técnica de potenciais efetivos (R. B. Griffiths and W. Chou, Phys. Rev. **B 34**, 6219, 1986) e, também, através do processo de ramificação proposto por Selke e Duxbury (W. Selke e P. M. Duxbury, Z. Physik **B 57**, 49, 1984). Conseguimos obter fases com períodos mais longos e de maior complexidade que aquelas encontradas por Yokoi, Coutinho-Filho e Salinas (C.S.O. Yokoi, M.D. Coutinho-Filho e S.R. Salinas, Phys. Rev. **B 24**, 4047, 1981).

Expoentes Críticos Associados a um Ponto de Lifshitz com $m = 6$.

CARLOS MERGULHÃO JR, CARLOS EUGENIO

IMBASSAHY CARNEIRO

USP

Sistemas magnéticos com interações competitivas apresentam diagramas de fases extremamente ricos. Um dos modelos mais conhecidos é o modelo ANNNI, que consiste de um modelo de Ising em uma rede cúbica com interações ferromagnéticas (de intensidade $J_1 > 0$) entre primeiros vizinhos e interações antiferromagnéticas (de intensidade $J_2 < 0$) entre segundos vizinhos ao longo de uma direção da rede, na direção z , por exemplo. Além das fases ferromagnéticas e paramagnéticas usuais, este sistema exhibe fases moduladas onde os spins nos planos paralelos ao plano xy apontam em uma mesma direção. Para $p \equiv |J_2|/J_1 > 0.5$ o estado fundamental apresenta as configurações $++--++--$, onde cada $+(-)$ representa um plano paralelo ao plano xy onde os spins apontam na direção positiva (negativa) do eixo z . À medida que a temperatura aumenta e p varia, um número infinito de fases moduladas podem ocorrer, por exemplo $+++- - -+++-$, etc. O número de direções ao longo das quais ocorre competição entre as interações ferromagnética e antiferromagnética é usualmente denotado por m . O modelo ANNNI tem, portanto, $m = 1$ (só existe competição ao longo de z). Sistemas com $1 \leq m \leq 8$ podem apresentar fases moduladas e pontos de Lifshitz. Estes são pontos multicríticos para os quais convergem as duas linhas críticas e a linha de primeira ordem. Estas três linhas separam as fases ferromagnética, paramagnética e a região de fases moduladas nos diagramas no espaço TXp . Existe uma controvérsia na literatura sobre o valor dos expoentes críticos de pontos de Lifshitz com $m = 6$. Os trabalhos existentes calculam os expoentes com o grupo de renormalização desenvolvido por Wilson. Porém, devido a complexidade dos cálculos, várias aproximações foram feitas. Para decidir qual resultado está correto calculamos os expoentes críticos utilizando teoria de campos e a expansão ϵ sem nenhuma aproximação.

GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO DE CAMPO MÉDIO PARA O MODELO DE ISING DE SPIN QUALQUER

DIEGO PEÑA LARA, JÓAO ANTÔNIO PLASCAK

UFMG

O grupo de renormalização de campo médio (GRCM) é um método eficiente e simples no estudo da criticalidade de sistemas de spins na rede. Em particular, para o modelo de Ising de spin S com $S = \frac{1}{2}$, bons resultados são obtidos mesmo ao se considerar blocos de um e dois spins. Neste caso, a temperatura crítica é idêntica à obtida na aproximação de Bethe (AB). Entretanto, o mesmo procedimento aplicado à modelos com spin $S \geq 1$ produz resultados diferentes da AB, além de fornecer uma temperatura crítica $T_c \neq 0$ para o modelo unidimensional. Propomos, neste trabalho, uma maneira de estender o GRCM no estudo de modelos com $S \geq 1$, com o objetivo de se obter

resultados idênticos à AB para T_c com os blocos mais simples. Para tanto, introduzimos novos parâmetros nos hamiltonianos dos blocos, dentro do espírito de campo médio. Estes parâmetros são então obtidos auto-consistentemente através de ideias de escala de tamanho finito. Desta forma, é possível obter, com um mínimo de esforço, resultados em uma dimensão, inclusive para o valor médio do quadrado dos spins, bem como resultados bem melhores que os anteriores para duas e três dimensões.

APROXIMAÇÃO DE PARES NO MODELO DE BLUME-CAPEL DE SPIN S QUALQUER

DIEGO PEÑA LARA
UFMG

O modelo de Blume-Capel para spin $S \geq 1$ foi estudado através da aproximação de campo médio^a. Para spins inteiros existe um ponto tricrítico e uma fase desordenada em baixas temperaturas, que não estão presentes para spins semi-inteiros. Além do mais, no caso de spins semi-inteiros, as linhas de primeira ordem terminam em pontos críticos isolados. Um trabalho recente de grupo de renormalização^b, no caso particular $S = \frac{3}{2}$ obtém uma linha de primeira ordem terminando numa linha de segunda ordem em um ponto tetracrítico, diferente do obtido por campo médio. Com o intuito de estudar melhor a região de baixas temperaturas nesse modelo, utilizamos então uma aproximação de pares, bem melhor que campo médio, pois os resultados em uma dimensão são exatos, e utilizamos também simulação de Monte Carlo. Nossos resultados, por ambas técnicas, são qualitativamente idênticos aos obtidos por campo médio para qualquer valor do spin S .

^aJ. A. Plascak, J. G. Moreira and F. C. Sá Barreto, Phys Lett. A173 (1993) 360

^bS. Moss de Oliveira, P. M. C. de Oliveria and F. C. Sá Barreto, J. Stat Phys no prelo

Aproximação de Bethe para o antiferromagneto de Ising na rede triangular na presença de um campo magnético uniforme

MÁRIO N. TAMASHIRO, SILVIO R. A. SALINAS
Instituto de Física, Universidade de São Paulo

O modelo de Ising antiferromagnético na rede triangular constitui um dos exemplos mais conhecidos de um sistema de spins altamente frustrado, com enorme entropia residual, incapaz de exibir uma transição de fases a temperatura finita (há uma conhecida solução exata, obtida por Wannier, na ausência de campo aplicado). Na presença de um campo magnético, no entanto, uma antiga conjectura sugere a existência de um estado ordenado, em que o sistema se dividiria em três sub-redes (uma sub-rede teria magnetização por spin $m_1 \neq 0$, enquanto as outras duas sub-redes teriam a

mesma magnetização, $m_2 \neq 0$, com $m_2 \neq m_1$). De fato, esta conjectura parece muito bem apoiada nos únicos resultados de Monte Carlo que conseguimos encontrar na literatura, indicando uma "bolha" ordenada no diagrama do campo aplicado (H) contra a temperatura (T).

As aproximações usuais de campo médio, incluindo técnicas do tipo Bethe-Peierls, fornecem péssimos resultados para o modelo antiferromagnético na rede triangular. Utilizando a formulação de Curie-Weiss, em que os spins de uma sub-rede interagem antiferromagneticamente com todos os spins das duas outras sub-redes, obtém-se uma transição de fases (de segunda ordem) mesmo na ausência de campo externo. Por outro lado, o modelo de Ising antiferromagnético definido no cactus de Husimi não apresenta qualquer anomalia termodinâmica.

Apresentamos então uma solução para o problema na aproximação de Bethe, mas com a introdução de três sub-redes distintas. Esta divisão em três sub-redes é crucial para possibilitar o estabelecimento da ordem antiferromagnética conjecturada para o problema. De fato, além da solução paramagnética, encontramos uma solução ordenada dentro de uma "bolha" no diagrama $H-T$. No entanto, a energia livre desta fase ordenada, obtida através de uma integração das equações de estado, é sempre superior à energia livre da fase paramagnética, indicando que a solução ordenada poderia ser apenas um mínimo local da energia livre.

O MODELO DE POTTS COM Q ESTADOS NA PRESENÇA DE CAMPOS MAGNÉTICOS

JOSÉ CÂNDIDO XAVIER, FRANCISCO CASTILHO
ALCARAZ

Dep. de Física - Universidade Federal de São Carlos

Estudamos o modelo de Potts com $q = 2, 3, 4$ estados sujeitos a $m = 2, 3, 4 < q$ campos magnéticos. Utilizando-se das técnicas advindas da invariância conforme (relaciona os expoentes críticos com o espectro de sistemas finito) obtivemos as classes de universalidade calculando-se a anomalia conforme. A presença de $m < q$ campos magnéticos idênticos quebra a simetria $Z(q)$ do modelo de Potts parcialmente, sobrando uma simetria residual menor ($Z(m)$). Observamos que o comportamento crítico é governado por essa simetria residual, isto é, o modelo de Potts q estados com m campos magnéticos idênticos possui o mesmo comportamento crítico do modelo de Potts m estados. No caso $q > 4$ nossos resultados indicam que a transição passa de primeira para segunda ordem assim que introduzimos m campos ($m < 4$), contrariamente ao predito pela aproximação de campo médio (Straley e Fisher). O diagrama de fase do modelo foi obtido através de finite-size-scaling. Tal estudo foi feito utilizando a Hamiltoniana quântica de tempo contínuo associada ao modelo.

ON THE EQUIVALENCE OF FINITE SIZE SCALING RENORMALIZATION GROUP AND PHENOMENOLOGICAL RENORMALIZATION

JOÃO A. PLASCAK, JAFFERSON KAMPHORST L. SILVA
UFMG

It is shown that the finite size scaling renormalization group, when using systems infinite in one dimension and finite in the others, is equivalent to the Nightingale (correlation length) phenomenological renormalization. The equivalence, however, is concerned only with the critical coupling and thermal critical exponent once the finite size scaling renormalization group approach provides other exponents in a more precise and elegant way through the complete mapping of the recursion relations in the space spanned by the parameters of the Hamiltonian.

Screening in Two-Dimensional Hierarchical Coulomb Gases

DOMINGOS HUMBERTO URBANO MARCHETTI, JOSÉ FERNANDO PEREZ
IFUSP
CLODOALDO GROTA RAGAZZO
Courant Institut of Mathematical Science

Two-dimensional (lattice) Coulomb gases is known to exhibit a Kosterlitz-Thouless phase transition characterized by a critical inverse temperature β_c such that for $\beta < \beta_c$ external charges are screening and for $\beta > \beta_c$ no screening takes place. Here we analyse the high temperature phase of a hierarchical version of the model. We show that the two-(unit) charge truncated correlation function has a power-law falloff exponent $\theta = 4$ for $\beta > 0$ (small enough) as in the hierarchical massive Gaussian model. The same power-law decay holds for $\beta < \beta_c$ sufficiently close to β_c . Absence of exponential clustering is a characteristic feature of hierarchical model and we interpret this result as Debye screening. We argue that the intermediate sequence of phase transitions conjectured by Nicolò and Gallavotti do not occur in the hierarchical approximation. We also discuss the relation of Debye screening and spontaneous symmetry breaking and discuss the possibility of a single intermediate phase in the complete model.

STATIC AND DYNAMIC PROPERTIES OF THE XY-MODEL ON THE ONE-DIMENSIONAL SUPERLATTICE[†]

JOSÉ PIMENTEL DE LIMA
UFPI
LINDBERG LIMA GONÇALVES
UFCE

The static and dynamic properties of the isotropic XY-model in a transverse field on the one-dimensional su-

perlattice (closed chain), recently considered by the authors¹, is studied. The problem is exactly solved by using the Green function method and the equation of motion technique². Analytic expressions are obtained for the internal energy, specific heat, induced magnetization and the two-spin, static and dynamic, correlations in the field direction. Explicit numerical results are presented for various strengths of the transverse field as a function of temperature, and the main features discussed. At $T=0$, the behaviour of the system is studied as a function of the field, and it is shown that the static susceptibility in the field direction presents several singularities. These singularities, the number of which depends on the size of the sub-cells of the superlattice¹, can be associated to second order phase transitions induced by the field, as in the two sublattice case, studied by Kontorovich and Tsukernik³.

[1] L.L. Gonçalves and J. P. de Lima, *J. Magn. & Magn. Mater.* **140-144** (1995).

[2] D.N. Zubarev, *Sov. Phys. Uspekhi* **3**, 320 (1960).

[3] V. M. Kontorovich and V.M. Tsukernik, *Sov. Phys. JEPT* **26**, 687 (1968).

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

INVESTIGAÇÃO DAS PROPRIEDADES ELÁSTICAS E DA ESTABILIDADE TERMODINÂMICA DO SÓDIO SÓLIDO EM BASE A UM POTENCIAL INTERIÔNICO EFETIVO

NIKOLAI PAVLOVITCH TRETIAKOV, VIATCHESLAV IVANOVITCH ZUBOV
UFG
JESUS FELIX SANCHEZ
Universidade Russa da Amizade dos Povos

No trabalho [1] foram calculados a dilatação térmica, os módulos de elasticidade, as capacidades térmicas e o parâmetro de Gruneisen do sódio sólido, em função da temperatura. O potencial efetivo interiônico de Schiff, que contém oscilações de Friedel, as quais estabilizam a rede BCC, foi utilizado. No presente trabalho aplicamos o método de cálculo do tensor elástico [2] para o caso do sódio. Os resultados são comparados com dados experimentais. Nota-se uma melhor concordância para as propriedades estruturais e termodinâmicas (dilatação térmica, capacidades térmicas) do que para as propriedades elásticas, embora a inclusão das correções da teoria de perturbações melhore os resultados. Em base nas funções elásticas calculadas, analisamos o mecanismo de perda da estabilidade da rede cristalina na região metaestável (acima da temperatura de fusão $T_M=371$ K). Diferentemente do caso dos cristais de rede FCC, nos quais a perda da estabilidade é consequência da anulação do módulo B_T [3], o

sódio perde a estabilidade quando a condição $C_{11}^T - C_{12}^T > 0$ não é mais satisfeita. Isso ocorre para $T_S = 550$ K. Essa temperatura é menor do que a temperatura na qual a equação de estado não tem soluções e o módulo B_T anula-se (663 K).

Apoio financeiro: CNPq.

1. J. F. Sanchez, N. P. Tretiakov and V. I. Zubov, Phys. stat. sol(b) 181, K7(1994).
2. V. I. Zubov, N. P. Tretiakov, J.F. Sanchez and A.E. Yusef, Int. J. Mod. Phys., a ser publicado (1995).
3. V.I. Zubov, A.A. Caparica, N.P. Tretiakov and J.F. Sanchez, Solid State Commun 91, 12, 941 (1994).

CÁLCULOS DAS PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DO COBRE E ALUMÍNIO NAS VIZINHANÇAS DA TEMPERATURA DE FUSÃO

ÁLVARO DE ALMEIDA CAPARICA, NIKOLAI PAVLOVITCH TRETIKOV, VIATCHESLAV IVANOVITCH ZUBOV
UFG

As propriedades termodinâmicas do Cu e Al são estudadas utilizando-se um potencial interiônico efetivo proposto por Rautioaho [1], composto por um termo exponencial de curto alcance e outro oscilatório de longo alcance. Os cálculos foram feitos em base do método [2,3], que permite a inclusão dos termos anarmônicos principais na aproximação zero e trata por teoria de perturbações os termos de quinta e sexta ordem. Este procedimento proporciona uma descrição mais acurada do cristal nas vizinhanças da temperatura de fusão. Foram obtidos o coeficiente de dilatação térmica, os módulos de elasticidade, as capacidades térmicas a volume e pressão constantes, o parâmetro de Grüneisen e as componentes dos tensores de elasticidade isotérmico e isobárico em função da temperatura e a pressão ambiente. Foi estudado o comportamento das propriedades termodinâmicas nas regiões metaestáveis desses cristais, acima das suas temperaturas de fusão T_M . A temperatura de perda da estabilidade foi avaliada. Foram investigadas as peculiaridades dos coeficientes de estabilidade desses cristais.

Apoio financeiro: CNPq.

1. R.H.Rautioaho, Phys.stat.sol(b)115, 95(1993).
2. V.I. Zubov, Phys.stat. sol(b)87, 385; 88,43(1978).
3. V.I. Zubov, N.P. Tretiakov, J.F. Sanchez, Int. J. Mod. Phys, a ser publicado (1995).

CÁLCULOS DAS PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS E DA ESTABILIDADE DOS GASES NOBRES SOLIDIFICADOS

VIATCHESLAV IVANOVITCH ZUBOV, NIKOLAI PAVLOVITCH TRETIKOV
UFG

JESUS FELIX SANCHEZ

Universidade Russa da Amizade dos Povos

Cálculos baseados no método correlativo do campo autoconsistente não simetrizado [1,2] dão o conjunto completo das propriedades termodinâmicas de equilíbrio dos cristais de Ar, Kr e Xe, em função da temperatura, à pressão normal. Vários potenciais são utilizados: Lennard-Jones, Barker et al, Aziz. As forças de três corpos de Axilrod-Teller são levadas em conta. Os termos anarmônicos principais até a quarta ordem são incluídos na aproximação zero. A teoria de perturbações leva em conta os termos de quinta e sexta ordens. Os resultados são comparados com dados experimentais. Notamos melhor concordância para o Ar e o Kr no caso dos potenciais de Barker-Fisher-Watts e de Barker-Bobetic, enquanto que para o Xe a opção pelo potencial de Lennard-Jones se mostra mais apropriada. Investigamos o comportamento das propriedades desses cristais nas regiões metaestáveis acima da temperatura de fusão T_M . Os cristais tornam-se totalmente instáveis à temperatura de confluência dos ramos das raízes da equação de estado. Neste caso $B_T=0$, enquanto α (dilatação térmica) e $C_p \rightarrow \infty$. Os outros parâmetros de estabilidade ($C_{11}^T, C_{44}, C_{11} - C_{12}, T/C_v$) ficam finitos. Todos os potenciais utilizados indicam $T \approx 1.35 T_M$ como a temperatura de perda da estabilidade.

Agradecimentos: CNPq.

1. V.I.Zubov, Phys.stat.sol(b)87, 385; 88, 43(1978).
2. V.I. Zubov, N.P. Tretiakov, J.F. Sanchez, Int. J. Mod. Phys, a ser publicado (1995).

DESLOCAMENTOS RELATIVOS MÉDIOS QUADRÁTICOS EM UM MODELO BIDIMENSIONAL ANARMÔNICO COM REDE HEXAGONAL

MONTERRAT FREIXA PASCUAL, CLOVÉS GONÇALVES RODRIGUES, VIATCHESLAV IVANOVITCH ZUBOV
UFG

Os deslocamentos relativos médios (MSRD) entre os átomos em cristais, os quais expressam as amplitudes efetivas das vibrações dos átomos próximos dos sítios da rede, são umas das características mais importantes na dinâmica da rede. Na aproximação harmônica foi calculada esta grandeza utilizando a teoria da rede de cristal. É bem conhecido que efeitos anarmônicos são significativos a temperaturas altas. Baseando-se no método correlativo não simetrizado do campo autoconsistente (CUSF) e utilizando a segunda ordem da teoria de perturbação, obtivemos as fórmulas gerais para MSRD em cristais levando em consideração termos anarmônicos até quarta ordem [1]. No presente trabalho, calculamos MSRD para o modelo de duas dimensões de um cristal com fraca anarmonicidade para uma rede hexagonal. Esta aproximação permite calcular correlações in-

teratômicas entre os primeiros, segundos e terceiros vizinhos. Comparamos estes resultados com o de uma rede quadrada recentemente obtidos [2]. Na rede hexagonal MSRSD é em geral menor que numa rede quadrada.

Apoio financeiro: CNPq.

1. V.I. Zubov, M.F. Pascual et al, Phys. stat. sol.(b)183,315(1994).
2. V.I. Zubov, M.F. Pascual, Mod. Phys. Lett. B8, 523(1994).

MOMENTOS INTERATÔMICOS DE CORRELAÇÃO E DESLOCAMENTOS RELATIVOS MÉDIOS PARA UMA REDE CÚBICA SIMPLES ANARMÔNICA

MONTSERRAT FREIXA PASCUAL, ANDRÉIA LUISA DA ROSA, VIATCHESLAV IVANOVITCH ZUBOV
UFG

O presente trabalho tem por objetivo calcular as expressões gerais dos momentos de correlação quadráticos (QCM) entre os deslocamentos interatômicos dos sítios de uma rede tridimensional e seus deslocamentos relativos médios (MSRD) utilizando o método formulado em [1,2]. Como exemplo ilustrativo, investigamos uma rede cúbica simples, levando em conta a primeira e segunda ordem da teoria de perturbação. Considerando termos anarmônicos até quarta ordem, investigamos um cristal com fraca anarmonicidade, calculando QCM e MSRSD para os primeiros, segundos e quartos vizinhos. Utilizamos um potencial de curto alcance para estudar o comportamento destas grandezas em relação à temperatura. Comparamos estes resultados com os recentemente obtidos para um modelo bidimensional com rede quadrada [2]. Obtivemos que para o caso de uma rede cúbica simples anarmônica, o módulo das correlações quadráticas longitudinais para os segundos vizinhos são iguais às correlações quadráticas transversais, entretanto com sinais opostos. Este resultado também foi obtido para uma rede quadrada anarmônica.

Agradecimentos: CNPq.

1. V.I. Zubov, M.F. Pascual and A.C. de Faria, Phys. stat. sol.(b)182,315(1994).
2. V.I. Zubov, M.F. Pascual, Mod. Phys. Lett. B8, 523(1994).

CÁLCULOS DAS PROPRIEDADES DA FASE DO FULERENO C₇₀ COM REDE FCC

JUAN MARQUES BARRIO, NIKOLAI PAVLOVITCH TRETIKOV
UFG

Enquanto que numerosas pesquisas do fulereno C₆₀ foram efetuadas, sabe-se muito pouco sobre o fulereno C₇₀. Esta molécula é composta de 70 átomos de carbono nas cinco camadas esféricas de raios diferentes [1]. Verheijen et al [1] obtiveram o potencial intermolecular efetivo somando os potenciais de Jirifalco para varios pares de camadas. No presente trabalho propomos a aproximação deste potencial sob a forma de potencial de Lennard-Jones. Calculamos as distâncias intermoleculares em função da temperatura e outras propriedades termodinâmicas, usando os dois potenciais e o método utilizado em [2] para os cálculos das propriedades de C₆₀. Bem como no caso de C₆₀, a justificativa física de uso dos potenciais intermoleculares efetivos é de que as moléculas C₇₀ giram livremente nos sítios da rede a temperaturas altas.

Agradecimentos: CNPq.

1. M.A. Verheijen et al, Chem. Phys.166,287(1992).
2. V.I. Zubov, N.P. Tretiakov, J.N. Teixeira Rabelo, J.F. Sanchez, Phys. Lett. A194, 223 (1994).

THE ZEROETH LAW OF THERMODYNAMICS WITHIN TSALLIS STATISTICS

ANNA MARIA NÓBREGA CHAME
UFF

Whithin the generalized statistical mechanics introduced recently by Tsallis, we derive the generalized form of the affinities, the quantities which drive a process in the theory of irreversible thermodynamics. From this expression we are able to obtain the zeroth law in the framework of the generalized thermodynamics: as in the usual case, two systems which are in equilibrium with a third one are necessarily in equilibrium among them and share the same temperature.

UNIVERSAL PARAMETRIC CORRELATIONS IN RANDOM MATRIX THEORY OF BALLISTIC CAVITIES

A. M. S. MACÊDO
Universidade Federal de Pernambuco, Depto de Física

In this work we discuss the response to an external adiabatic perturbation of open quantum chaotic systems, such as ballistic cavities, coupled to external reservoirs by free propagation pipes. Physically these external perturbations could be, for instance, a change the Aharonov-Bohm flux through a ring or a change in the geometry of the system. We study, in particular, the effect of the perturbation on the statistics of the transmission eigenvalue spectra[1]. We demonstrate that the statistical properties of the transmission eigenvalues can be conveniently described by means of a diffusion equation generated by a random walk in a curved manifold. The resulting Brownian motion is solved exactly

for systems without time reversal symmetry. We derive an exact non-perturbative expression for the parameter-dependent level density autocorrelator, which we show to be universal after appropriate rescalings of the physical parameters at the hard edge of the spectrum. In the hydrodynamic limit we demonstrate that our theory predicts a Lorentzian-squared behaviour for the correlator of conductance fluctuations of ballistic cavities, in agreement with semiclassical calculations [2]. Finally, we derive a formula for the power spectrum of the fluctuations of an arbitrary linear statistic on the transmission eigenvalues.

[1] A. M. S. Macêdo, Phys. Rev. B 49, 16841 (1994).

[2] H. U. Baranger, R. A. Jalabert and A. D. Stone, CHAOS 3, 665 (1993).

Sistemas Complexos (EST) – 07/06/95

Optimal on-line learning in the $K = 3$ non-overlapping committee machine

MAURO COPELLI LOPES DA SILVA, NESTOR FELIPE CATICHA ALFONSO
IFUSP

The dynamics of learning from examples in the $K = 3$ nonoverlapping committee machine with single presentation of examples is studied. The optimal algorithm, in the sense of mean generalization, is obtained from a variational analysis of the differential equations which describe the dynamics. The agreement of the theoretical predictions and the results of numerical simulations is excellent. The optimized dynamics has the extra advantage with respect to the nonoptimized cases in that it uncouples the differential equations which describe the evolution of the relevant parameters, ie the student-teacher overlap and the norm of the student synaptic vector. This in turn translates into the possibility of constructing useful practical optimized on-line algorithms. For the optimal algorithm the generalization error decays as $\sim 0.88 \alpha^{-1}$, the same nominal error as for the simple perceptron with optimized dynamics.

UM MODELO DE CRESCIMENTO PARA A EVOLUÇÃO DE ADN

MARIA DA CONCEIÇÃO DE SOUSA VIEIRA
Universidade Federal do Rio Grande do Norte
HANS HERRMANN

P. M. M. H. (U. R. A. CNRS 857) E. S. P. C. I. - França

Introduzimos um modelo de crescimento para a evolução de ADN o qual incorpora as características básicas de ADN real, isto é, crescimento da cadeia por duplicação de gens e mutações. Nosso modelo dá os mesmos resultados estatísticos de seqüências de ADN

reais investigadas na literatura, isto é, a existência aparente de correlações de longa distância. No entanto, quando grandes cadeias são estudadas em nosso modelo, vemos que isto é apenas um comportamento transitório, válido para cadeias que não são suficientemente longas. O modelo tem solução analítica exata.

CAPACIDADE DE ARMAZENAMENTO DE PADRÕES DE UM MODELO DE REDE NEURAL HIERÁRQUICA

LOURENÇO C. B. MIRANDA, ROSANE RIERA
Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

É estudado um modelo de rede neural onde as memórias são não correlacionadas e estão armazenadas segundo uma arquitetura na qual blocos de espins ativos e não ativos estão dispostos de forma hierárquica. A capacidade de armazenamento da rede é medida pela razão $\alpha = p/N$ (p -número de memórias e N -número de neurônios). Resultados preliminares para o valor α_c , a partir do qual não é observada a propriedade de memória associativa, fornecem o valor $\alpha_c = 0.3$. Este fato indica que este modelo de rede neural possui capacidade de armazenamento de padrões maior do que o modelo de Hopfield usual.

MODELO DE HOPFIELD DILUIDO E ASSIMÉTRICO COM PERÍODO REFRAATÁRIO

CRISÓGONO RODRIGUES DA SILVA
Universidade Federal de Alagoas e Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

FRANCISCO ANTONIO TAMARIT
Fa.M.A.F, Universidad Nacional de Córdoba
EVALDO MENDONÇA FLEURY CURADO
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas e Centro Internacional de Física da Matéria Condensada - Universidade de Brasília

Neste trabalho, incorporamos período refratário numa rede de neurônios com diluição e assimetria nas sinapses. Eles são introduzidos como um limiar de ativação que depende do estado do neurônio em tempos anteriores. No nosso modelo, se um neurônio dispara um sinal no tempo t , necessitará de um potencial adicional A no tempo $t + 1$ e B em $t + 2$ para poder disparar novamente. Estes dois limiares modelam os chamados Período Refratário Absoluto e Relativo, respectivamente. Nosso interesse é estudar como são afetadas as propriedades de reconhecimento e capacidade de armazenamento levando em conta esses ingredientes biológicos na modelagem. No limite de ultra diluição ($C \ll \ln N$), e quando o número de memórias e a conectividade média por neurônio divergem ($p \rightarrow \infty$, $C \rightarrow \infty$ com $\alpha = p/C$ constante), podemos tratar o modelo analiticamente. Encontramos uma equação de recorrência para a superposição do estado do sistema

com cada memória. Obtivemos o diagrama de fase e analisamos o reconhecimento para diferentes valores dos parâmetros α , A e B e diferentes níveis de ruído. Simulações numéricas foram realizadas e comparadas aos resultados analíticos.

INFLUÊNCIA DOS PERÍODOS REFRATÁRIOS NA DINÂMICA DE UMA REDE DE NEURÔNIOS DILUIDA

FRANCISCO ANTONIO TAMARIT, DANIEL ADRIÁN
STARIOLO
CBPF

SERGIO A. CANNAS, PABLO SERRA

FAMAF, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina

Propomos uma dinâmica estocástica para uma rede de neurônios que leva em consideração os períodos refratários, *absoluto e relativo*, na dinâmica de cada neurônio. Isto é possível introduzindo um modelo de neurônio formal com três estados, dois dos quais correspondem ao neurônio em repouso e o terceiro ao estado ativo. O modelo armazena um conjunto de p memórias segundo a regra de Hopfield. No limite de diluição extrema da matriz de sinapses obtemos uma solução analítica da dinâmica do modelo. Desta forma incorporamos diversas características realistas num único modelo, como são *diluição e assimetria* nas sinapses e os períodos refratários *absoluto e relativo*. Redefinindo apropriadamente o parâmetro de ordem (superposição com as memórias) encontramos um comportamento muito rico com fases de reconhecimento, coexistência de atratores e rota ao caos via bifurcação de período nos atratores do parâmetro de ordem.

A complexidade da dinâmica observada requer uma re-discussão do conceito de **reconhecimento** em redes de neurônios.

PROTÓTIPO PARA EFEITOS DE MEMÓRIA: RESULTADOS ANALÍTICOS.

CELIA ANTENEODO
CBPF

ANDRÉ M. C. DE SOUZA
Instituto de Física - UFS

Efeitos de memória podem ser encontrados em grande número de sistemas dinâmicos complexos (redes de neurônios, sistemas magnéticos, etc.). Este fato os torna relevantes para a compreensão dos fenômenos críticos. Uma das formas de analisar a presença de efeitos de memória se baseia no estudo da evolução temporal de um dano introduzido no sistema, que pode ser caracterizado pela distância de Hamming entre duas réplicas do mesmo. Recentemente¹, foi introduzido um automato celular que constitui um bom protótipo para efeitos de memória. A distância de Hamming associada evolue no tempo com flutuações semelhantes

àquelas que apresentam algumas das grandezas que caracterizam muitos sistemas dinâmicos complexos. Este protótipo pode pertencer à mesma "classe de universalidade" de uma grande classe de sistemas e modelos teóricos que exibem efeitos de memória. Neste trabalho, apresentamos resultados analíticos para descrever o comportamento deste protótipo.

¹ Tsallis, C., et al. (1993). *Physical Review E* 47, 4514-4523.

O Modelo de Fibras para Fraturas em uma Rede Retangular

AMÉRICO TRISTÃO BERNARDES
Departamento de Física - ICEB - UFOP
JOSÉ GUILHERME MOREIRA
Departamento de Física - ICEX - UFMG

Estudamos o modelo de fibras para fraturas [Bernardes e Moreira, *Phys. Rev. B* 49, 15035 (1994)] em uma rede com $L \times pL$ sítios. Para $p = 1$ temos uma rede quadrada e, na região de transição frágil-dúctil, o modelo apresenta uma lei de escala entre o número de trincas H e o tamanho das trincas S : $H \sim S^\alpha$. Para $p \neq 1$ temos uma rede retangular e o sistema perde esse comportamento, passando a apresentar um tamanho característico que está relacionado com o valor de p . Este resultado é equivalente a um resultado experimental obtido em um processo de fragmentação [Oddershede, Dimon e Bohr, *Phys. Rev. Lett.* 71, 3107 (1993)]. Nesse experimento o comportamento do número de fragmentos H com o tamanho destes S segue uma lei de escala igual à de cima quando a amostra é cúbica mas apresenta um tamanho característico quando a amostra tem o formato de um disco. Conjecturamos que nos dois casos o que impede o surgimento de fragmentos (trincas) grandes é a pequena largura da amostra. Este fato deve provocar perfis com dimensões fractais diferentes em amostras cúbicas e em amostras retangulares.

GENERALIZAÇÃO COM EXEMPLOS DIFERENCIADOS.

ROGÉRIO ADEODATO LIMA COSTA, ALBA
THEUMANN
UFRGS

Propomos um modelo de rede neural onde os exemplos estão diferentemente armazenados na matriz sináptica, exemplos diferenciados, ao invés de serem igualmente armazenados pela rede. Para cada exemplo armazenado irá corresponder uma quantidade positiva, com a matriz sináptica dada pela seguinte relação: $J_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mu} \lambda_{\mu} \xi_i^{\mu} \xi_j^{\mu}$, onde o exemplo, ξ^{μ} , é uma versão degradada do conceito ζ^{ν} , $\mu = 1, \dots, s$ e $\nu = 1, \dots, p$. O grau de degradação é medido pelo parâmetro $0 < \kappa < 1$. Efetuamos um estudo

analítico do modelo com a obtenção das equações de campo médio, a fim de analisarmos a capacidade do modelo em atingir a fase de generalização. A partir das soluções das equações de campo médio, investigamos de que maneira as quantidades $\{\lambda_\mu\}$ modulam as transições que ocorrem na rede, isto é, a transição entre a fase de recuperação e a de generalização e a transição entre a fase desordenada e a de generalização, através dos parâmetros críticos: $s_c = s_c(\{\lambda_\mu\}, \kappa)$ e $\alpha_c = \alpha_c(\{\lambda_\mu\}, \kappa)$. Com o comportamento da rede investigado na presença e ausência de ruído térmico.

Irreversibilidade: um estudo sobre o autômato celular de Domany-Kinzel.

EMÍLIO PEDRO GUEUVOGLHANIAN, TÂNIA TOMÉ
USP

O modelo aqui estudado consiste em um autômato celular evoluindo de acordo com as regras de Domany-Kinzel. Por autômato celular, entende-se um sistema cuja evolução temporal e espacial se dá por passos discretos e cujo número de estados também é discreto. Além disso, todos os sítios do sistema são atualizados simultaneamente. As regras de Domany-Kinzel são de natureza probabilística. A probabilidade de um sítio assumir um determinado valor (0 ou 1) depende dos valores dos sítios vizinhos no instante anterior. O sistema caracteriza-se por dois parâmetros de ordem. O primeiro refere-se a a probabilidade x de encontrar um sítio assumindo o valor

1. O segundo parâmetro surge quando se considera uma cópia do sistema original, com os valores de alguns sítios alterados, evoluindo sob os mesmos números aleatórios. O novo parâmetro é a distância de Hamming (D), que indica a probabilidade de encontrar dois sítios correspondentes (um no original e um na cópia) com valores diferentes. Consideram-se três fases distintas para o sistema: congelada ($x = 0$ e $D = 0$), ativa ($x \neq 0$ e $D = 0$) e caótica ($x \neq 0$ e $D \neq 0$). Existem elementos de irreversibilidade nas transições entre as três fases. Desenvolvemos uma formulação analítica a partir de equações de evolução estocástica e utilizamos aproximações de campo médio para obter os diagramas de fases em ordens 1, 2 e 3. Os resultados obtidos concordam com os resultados de simulações de Monte Carlo.

APLICAÇÕES DO SIMULATED ANNEALING GENERALIZADO

THADEU J. P. PENNA

Instituto de Física - Universidade Federal Fluminense

Problemas de otimização de sistemas apresentando muitos mínimos de uma função custo são bastante frequentes, em vários ramos do conhecimento. Em algumas situações, o tempo necessário para encontrarmos

o mínimo global cresce com uma forma não-polinomial (problemas *NP*-completos). O problema do caixeiro viajante é, talvez, o mais famoso desta classe. Frequentemente, não é necessário encontrar o mínimo global, mas uma boa aproximação deste. Dentre os vários métodos que foram propostos, o simulated annealing (Kirkpatrick et al.) apresenta soluções bastante razoáveis, quando o número de cidades envolvidas é razoavelmente grande. Baseado no famoso algoritmo de Metropolis, este método parte da idéia, que o recozimento ("annealing") deve ser feito vagarosamente, de tal forma que o sistema se encontre em equilíbrio, com a probabilidade de cada configuração sendo dada pelos pesos de Boltzmann ($\exp(-\beta F)$, onde F é o valor da função custo para uma dada configuração). Pode-se mostrar que, se o abaixamento da temperatura é realizado segundo uma função logarítmica do tempo, o sistema estará "preso" ao mínimo global. Utilizando uma distribuição de Lévy, ao invés da tradicional Gaussiana, o annealing pode ser realizado como uma função linear do tempo. Recentemente, Stariolo e Tsallis generalizaram o método do simulated annealing, permitindo que o annealing pudesse ser realizado como uma potência do tempo, aumentando consideravelmente a eficiência do método. Uma outra generalização pode ser incluída, ao utilizarmos outras funções, diferentes da de Boltzmann, para a probabilidade de cada configuração. Neste trabalho, aplicamos ambas generalizações em dois problemas práticos: o caixeiro viajante (T.J.P. Penna, *Phys. Rev.* 51, R1 (95)) e o ajuste de curvas (T.J.P. Penna, *Comp. Phys.* (95)). Em particular, neste último, com a utilização deste método, não é necessário o conhecimento, a priori, de valores aproximados dos parâmetros, como exigido em outros métodos. Complicações adicionais como a introdução de vínculos e o ajuste de funções com descontinuidades também podem ser facilmente implementadas.

PARAELECTRIC PHASE INSTABILITY NEAR THE PHASE TRANSITION TEMPERATURE

VALERY BORISOVICH KOKSHENEV, ALAOR SILVÉRIO CHAVES

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais

Fluctuations of the local order parameter, as embryonic formations of the ordered phase, are responsible for the instability of the disordered phase near phase transition. A new microscopic analysis of the so-called central peak

phenomena observed in the order-parameter spectra of crystals, undergoing soft-mode-type structure phase transitions, and caused by thermal fluctuations (intrinsic mechanism of the central peak) is given. This analysis is based on new results[1] obtained recently in the

dynamics of the disordered phase of ferroelectrics in the framework of the three-dimension Ising model with a tunneling field within the Green-function technics. A microscopic description of all phenomenological parameters adopted in the central-peak problem is proposed. In particular, the central-peak observation conditions are formulated. New critical behavior of the central relaxation-type mode is found that leads to further critical narrowing of the central peak. A minimum of the soft mode above the critical temperature found earlier in experiments by Campinas group[2] is described. Financial support of FAPEMIG and CNPq is acknowledged.

[1] V.B. Kokshenev, J.L. Kim and M.C. Nemes, On the Dynamics of the Three-Dimensional Spin-1/2 Ising Model In a Transverse Field, submitted to Physica A: Statistical and Theoretical Physics

[2] M.A.F. Scarparo, R.S. Katiar, R. Srivastava and S.P.S. Porto, Evidence For Non-Linear Behavior of Soft Modes in Crystals with KDP Structure, Phys. Stat. Sol. (b), v.90, 543 (1978)

SOLUÇÃO EXATA DA DINÂMICA DE GENERALIZAÇÃO NUMA REDE NEURAL

JOSÉ ARTHUR MARTINS, WALTER KARL THEUMANN
UFRGS

Uma propriedade importante de redes neurais é a capacidade de generalização, isto é, a habilidade que o sistema possui para gerar conceitos a partir dos traços comuns de exemplos utilizados no treinamento da rede. Neste problema, memórias escolhidas são apresentadas à rede e os resultados sobre os conceitos são obtidos na saída. Neste trabalho resolvemos exatamente no limite termodinâmico, segundo Meir e Domany¹, a dinâmica determinística de uma rede neural treinada com padrões simples correlacionados com os conceitos. Estes padrões seguem uma distribuição de probabilidade independente para todos os sítios da rede. A dinâmica da rede pode ser associada a estática de uma rede de camadas com propagação unidirecional de informação, onde sucessivas camadas correspondem a tempos discretos. Estudamos a dinâmica da rede para um número extensivos de conceitos com a razão $\alpha = \frac{P}{N} \neq 0$, quando a rede é exposta a um número finito s de exemplos para cada conceito. Acharmos o erro de generalização em função de s e da correlação entre exemplos e conceitos, comparamos os resultados com as curvas de generalização para o modelo de Hoperfeld². Obtemos também resultados para uma dinâmica Estocástica.

[1] R.Meir e E. Domany, Phys.Rev A, 37, 608(1988)

[2] J.F. Fontanari, J. Phys. France 51, 2421 (1990)

AN ALGORITHM WHICH GIVES THE OPTIMAL BAYESIAN PERCEPTRON

OSAME KINOCHI, NESTOR CATICHA
IFUSP

The replica method enables the calculation of the generalization error as a functional of the cost function (*training energy*) used by a learning algorithm. Minimization of this functional leads to the determination of the optimal training energy to be utilized, which has the simple form $E = -\Gamma \sum_{\mu}^p \ln P(\xi_{\mu} | h_{\mu})$ where Γ is a function of the number of examples p and $P(\xi_{\mu} | h_{\mu})$ is the conditional probability of the target output being ξ if the perceptron local field is h_{μ} . The performance of the optimal training energy saturates the Bayesian bound for this type of perceptron. The training energy found is closely related to the optimal algorithm for on-line learning.

BIFURCATION PHENOMENA IN A NEURAL NETWORK WITH ASYMMETRIC COUPLINGS

MÁRIO N. TAMASHIRO, OSAME KINOCHI, SILVIO R. A. SALINAS
IFUSP

We study the evolution of macroscopic order parameters (pattern overlaps) in a stochastic Ising spin neural network with asymmetric coupling matrices. The evolution of the overlaps becomes deterministic in the thermodynamic limit. For a synchronous update, and with a coupling matrix associated with P patterns, the problem is reduced to a simple P -dimensional map. We consider the dynamical phase diagram for the $P = 2$ case.

RECONSTRUÇÃO DE SUPERFÍCIE (W(100))

MAURÍCIO RIBEIRO BALDAN
INPE
ENZO GRANATO
Instituto de Pesquisas Espaciais-INPE
SEE CHEN YING
Brown University - Providence

A reconstrução pode ser vista como um exemplo de transição de fase em duas dimensões. Uma superfície limpa como W(100) exhibe uma transição de fase estrutural. A altas temperaturas se observa a fase (1x1) e a baixas temperaturas a fase c(2x2), sendo que essa transição é contínua e de natureza ordenada-disordenada. Nos podemos verificar essa mudança de fase através do cálculo do parâmetro de ordem. É também possível determinar a temperatura crítica do sistema. Para realizarmos tal cálculo fizemos uso de uma simulação numérica, usando a técnica de dinâmica molecular.

COMPORTAMENTO DA FRAGMENTAÇÃO DE PLACAS DE CIMENTO E MATERIAIS CERÂMICOS

VALDEMIRO DA PAZ BRITO

Universidade Federal do Piauí

MARCELO ANDRADE DE FILGUEIRAS GOMES

Universidade Federal de Pernambuco

SADHAN KUMAR ADHIKARI

Instituto de Física Teórica - Universidade Estadual Paulista

A estatística de fragmentação de materiais cerâmicos e não-cerâmicos vem despertando muito interesse nos últimos anos, basicamente por permitir avanços no estudo de processos de não-equilíbrio e suas conexões com o conceito de criticalidade auto-organizada [1]. No presente trabalho reportamos e analisamos resultados de diferentes processos de fragmentação de placas delgadas de cimento, gesso e mistas, bem como, de azulejos comerciais. As fragmentações se processaram, na sua quase totalidade, segundo uma dinâmica de queda ao solo. Da análise dos dados obtidos, se tornaram evidentes leis de escala, principalmente na região de grandes fragmentos. Estas leis de escala são compatíveis com resultados, já publicados, de simulações numéricas de processos dinâmicos de fragmentação do plano [2]. Introduzimos um modelo teórico de particionamento do plano que explica razoavelmente bem os dados experimentais, na região de grandes fragmentos, para os azulejos.

[1] L. Oddershede, P. Dimom, and J. Bohr, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 3107(1993).

[2] K. Coutinho, S. K. Adhikari e M. A. F. Gomes, *J. Appl. Phys.* **74**, 7577(1993).

Coalescência de Trajetórias em Sistemas Complexos

L. M. DEZANETI, F. A. OLIVEIRA

Centro Internacional de Física da Matéria Condensada - CIFMC - UnB

O estudo de coalescência de trajetórias tem sido feito em sistemas simples tais como mapas caóticos.

Neste trabalho nós demonstramos que duas trajetórias, no espaço de fase, com condições iniciais diferentes, podem convergir para o mesmo resultado físico quando submetidas a uma mesma seqüência de ruídos externos. As condições para a coalescência de trajetórias são discutidas. dentre estas destaca-se o peso com que o ruído externo é colocado nas equações de movimento. Este peso, conhecido como *wind number*, é para alguns mapas caóticos simples um limite para o qual a seqüência de números gerada torna-se uma seqüência caótica (apresentando uma dimensão fractal) face o seu comportamento normal (apresentando uma dimensão não fractal).

A coalescência de trajetórias é um fenômeno importante no estudo de sistemas complexos, tais como, uma

cadeia linear de monômeros (polímeros) ou mesmo em sistemas de complexidade mais elevada - e.x. sistemas biológicos. Os resultados importantes nesses casos são, via de regra, a situação física para a qual esses sistemas evoluem, que segundo o previsto neste contexto de coalescência de trajetórias, em geral não depende das condições iniciais na qual os mesmos foram submetidos.

Criticalidade Auto-organizada em Modelos para a Proliferação de Virus.

GUSTAVO CAMELO NETO, SÉRGIO COUTINHO

Departamento de Física - Universidade Federal de Pernambuco.

Estudamos as propriedades de um modelo para a proliferação de vírus do tipo do Herpes Simples (HSV em inglês) que apresenta no regime de equilíbrio um comportamento crítico auto-organizado. Em um modelo estático para a proliferação do HSV, proposto por Landini *et al* [1] e posteriormente investigado pelos autores [2], mostrou-se que as úlceras formadas pelo HSV no tecido da córnea possuem contorno fractal. Neste caso, a dimensão fractal pode ser considerada como um novo parâmetro no diagnóstico da infecção. Baseados em trabalhos sobre *Criticalidade Auto-Organizada* (SOC do inglês de *Self Organized Criticality*) em modelos de incêndios florestais [3] introduzimos características dinâmicas no modelo estático, mencionado acima, para que apresentasse comportamento crítico auto-organizado. Dois métodos de análise foram empregados para estimar o valor da concentração de células infectadas em função dos parâmetros do modelo: simulação numérica e cálculos analíticos na aproximação de campo médio. Os resultados obtidos foram comparados e discutidos. Além disso, a dimensão fractal das úlceras formadas no regime de equilíbrio foi calculada usando-se o método da *contagem de caixas*.

[1] G. Landini, G. P. Mission e P. I. Murray, *Fractals in the Natural and Applied Sciences*, ed. M. M. Novak, North Holland (1994).

[2] Gustavo Camelo Neto e S. Coutinho, *Modelo Computacional do Espalhamento do Virus Herpes Simples*, XVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Caxambú, MG, 7-10 de junho de 1994;

[3] Per Bak, Kan Chen and Chao Tang, *A forest-fire model and some thoughts on turbulence*, *Phys. Lett. A* **147**, 297, (1990); B. Drossel, S. Clar and F. Schwabl, *Scaling laws and simulation results for the self-organized critical forest-fire model*, *Phys. Rev. E* **50**, 1009, (1994) e B. Drossel, F. Schwabl, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 1629, (1992).

DISTRIBUIÇÃO DE AUTOVALORES DA MATRIZ DE HOPFIELD ASSIMÉTRICAMENTE DILUÍDA

DANIEL ADRIAN STARIOLO, FRANCISCO ANTONIO
TAMARIT

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas/RJ

EVALDO MENDONÇA FLEURY CURADO

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas/RJ e Centro
Internacional de Física da Matéria Condensada/UnB*

Usando variáveis de Grassmann e uma analogia com a eletrostática bidimensional, nós obtemos a distribuição média de autovalores $\rho(\omega)$ de ensembles de matrizes $N \times N$ de Hopfield, assimetricamente diluídas, no limite $N \rightarrow \infty$. Encontramos que no limite de forte diluição a distribuição de autovalores é uniforme em um círculo no plano complexo.

FORMAÇÃO DE ESTRUTURA DISSIPATIVA EM BIOSISTEMAS

ANTONIO SERGIO C. ESPERIDIÃO

UFBA

AUREA R. VASCONCELOS, ROBERTO LUZZI

UNICAMP

Mostramos que em sistemas formados por grandes agregados de moléculas biológicas, inversão de população de portadores de cargas, por exemplo as produzidas por processos de fotoexcitação, pode ocorrer competitividade além de um nível crítica capaz de produzir estruturas espacialmente ordenadas (transição morfológica). Consideramos que a radiação eletromagnética transfere elétrons para estados ligantes em um continuum de estados anti-ligantes itinerantes em uma amostra dopada tipo-P. Neste sistema, a energia é fornecida continuamente por uma fonte externa, os processos coletivos e dissipativos são responsáveis pela formação de uma estrutura auto-organizada. O estudo tem como base o métodos do operador estatístico de não equilíbrio, mostrando que o mesmo fornece um formalismo mecânico-estatístico a nível microscópico para tratar estruturas dissipativas tipo Prigogine.

Complexidade, Diversidade, Entropia e Fragmentação

ANA TEREZA COSTA SILVA, MARCELO ANDRADE DE
FILGUEIRAS GOMES

UFPE

O conceito de diversidade vem sendo utilizado em inúmeros contextos da Biologia como na teoria da evolução, na demografia e na ecologia, entre outros. Recentemente, o conceito de diversidade de massa tem sido estudado quantitativamente através de simulações computacionais extensivas de dinâmicas de fragmentação e agregação em redes de vários tipos de

simetria e dimensionalidade. A diversidade de massa é uma medida da complexidade originada num processo dinâmico.

Neste trabalho usamos um método de contagem exata de configurações de sistemas de tamanho reduzido para calcular expoentes críticos que aparecem em relações de escala envolvendo a diversidade de massa. Os valores obtidos concordam dentro das incertezas estatísticas com aqueles encontrados através de simulações numéricas em grandes redes. Além disso, mostramos que no limite termodinâmico a diversidade média de um sistema que se fragmenta escala logicamente com o número de configurações de fragmentação permitidas. Esse comportamento da diversidade num processo de não-equilíbrio sugere algumas analogias importantes com a função entropia num sistema em equilíbrio.

Estudo do comportamento da auto-agregação no modelo "água-óleo" utilizando o método de Monte Carlo

CLAUDIO SABURO SHIDA, VERA BOHOMOLETZ

HENRIQUES

IFUSP

Modelos simplificados para a agregação de moléculas anfífilas representam-as constituídas de partículas de "água" e partículas de "óleos". Estes modelos são, em geral, simulados a concentração constante. No entanto, as características da simulação de Monte Carlo (MC) de sistemas em equilíbrio a concentração constante são pouco conhecidas. Estudamos um modelo "água-óleo" cujas propriedades são conhecidas, e com as quais os resultados da simulação numérica podem ser comparados. O modelo "água-óleo" é um modelo de rede baseado no modelo de Ising, que utiliza a dinâmica de Kawasaki, e é, ainda, análogo aos modelos de gás de rede e de ligas binárias. Neste modelo todos os sítios da rede são ocupados por moléculas de "óleo" ($S_i = -1$) e "água" ($S_i = +1$), e a interação é dada pela Hamiltoniana

$$\mathcal{H} = \sum_{i < j} S_i S_j$$

onde a dupla soma é sobre todos os pares de primeiros vizinhos e $J > 0$. Por simulação foram estudadas redes bidimensionais de até $L = 80$, com concentrações de óleo de 20 e 50%. A simulação a concentração constante implica em um tempo de relaxação grande (0,5 M Passos de MC) associado ao crescimento dos agregados. As simulações mostraram que ocorre a formação de agregados de óleo, que apresentam um tamanho médio característico, em temperaturas abaixo da temperatura de coexistência. O comportamento do volume médio total dos agregados de óleo com a temperatura mostra uma transição bem definida, entre uma fase agregada e uma fase homogênea. A concentração de moléculas de

“óleos” livres (monômeros) em função da temperatura apresenta um ponto de inflexão na região de transição e é marcadamente dependente do tamanho da rede para a concentração de 50%. Por fim, também foi determinada a capacidade térmica deste sistema, verificando-se que a temperatura de transição é fortemente influenciada pelo tamanho da rede.

PERFIS AUTO-AFINS GERADOS PELO AUTÔMATO CELULAR DE DOMANY-KINZEL

MARCELO LOBATO MARTINS

Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa

Após nosso trabalho (PRL vol.66, no.15, pg.2045, 1991) sabemos que o autômato celular (AC) de Domany-Kinzel apresenta três fases: congelada, ativa e caótica. Essas fases estão separadas por fronteiras críticas associadas a transições de fase contínuas no espaço de parâmetros $p(00/1)$, $p(10/1)$, $p(01/1)$ e $p(11/1)$, as probabilidades condicionais que definem a regra de evolução desse AC.

Nesse trabalho mapeamos o AC de Domany-Kinzel isotrópico ($p(10/1) = p(01/1)$) e legal ($p(00/1) = 0$), num modelo de deposição em substrato linear ao exigirmos que uma partícula seja depositada no sítio i sempre quando o correspondente sítio no AC assumir o valor 1 ao longo de sua evolução temporal a partir de uma configuração inicial aleatória. Através desse mapeamento simples obtivemos os perfis de crescimento correspondentes a cada uma das fases do AC de Domany-Kinzel e os caracterizamos através da cálculo de sua rugosidade. Além disso, estudamos o comportamento do expoente de rugosidade em função da probabilidade condicional $p(10/1)$ sobre um corte $p(11/1) = 0, 20$, fixo, que cruza as fronteiras críticas congelada-ativa e ativa-caótica.

CAOS TRANSIENTE EM AUTÔMATOS CELULARES UNIDIMENSIONAIS

JORGE ANDERSON PAIVA RAMOS, MARCELO

LOBATO MARTINS

Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa

Autômatos celulares (ACs) são sistemas dinâmicos totalmente discretos (espaço, tempo e número de estados discretos) que exibem a fascinante propriedade de geração espontânea de estruturas complexas. Mesmo ACs unidimensionais determinísticos, os mais simples possíveis, podem exibir padrões espaço-temporais complexos dotados de estruturas localizadas ou propagantes, com transientes arbitrariamente longos e serem,

talvez, capazes de computação universal. Tais ACs formam a classe IV no esquema de Wolfram e geram um problema crucial para essa classificação: sua indecidibilidade. É praticamente impossível decidir a qual classe pertence uma regra no caso de transientes muito longos.

Nesse trabalho investigamos um AC determinístico unidimensional de classe IV, a regra 46 ($K = 3$ e $r = 2$) na notação de Wolfram, com particular interesse em seus longos períodos transientes, após os quais a dinâmica do AC é periódica, típica dos ACs de classe II. A análise da propagação de danos, medida pela distância de Hamming, mostra que tais transientes são caóticos. Procuramos estabelecer uma lei de escala para o comprimento médio desses transientes em função do tamanho da cadeia linear do AC. Além disso investigamos qual a distribuição $\phi(\tau)$ que rege esses transientes caóticos, ou seja, qual a probabilidade de se observar um transiente cujo comprimento está no intervalo τ e $\tau + d\tau$.

SIMULAÇÃO MONTE CARLO DO MODELO SIR

VANDERLEI JOSÉ HAAS

FFCLRP-USP

ANTONIO CALIRI, MARCO ANTONIO ALVES DA SILVA

FCFRP-USP

Apresenta-se uma modalidade estocástica do modelo determinístico SIR (Suscetíveis, Infectados e Removidos), originalmente proposto por Kermack e McKendrick. Curvas epidêmicas são geradas por simulações Monte Carlo numa rede quadrada, a fim de obter-se previsões do espalhamento de uma epidemia entre seus sítios. O modelo empregado assume que a probabilidade por unidade de tempo, $W_{I \rightarrow R}$, é constante, enquanto que $W_{S \rightarrow I} \propto S \times I$. Outrossim, estuda-se a resposta do modelo a uma ampla combinação de seus dois parâmetros de entrada, o que permite a construção de um *diagrama de fase epidêmico*, onde cada ponto representa um experimento de simulação. Constata-se, então, a existência de duas fases no plano formado por esses dois parâmetros: uma epidêmica e outra não epidêmica.

Aprendizado e generalização em modelos de redes neuronais: O efeito do alcance dinâmico dos pesos sinápticos.

FORTUNATO S. DE MENEZES

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Estudamos aprendizado e generalização em modelos de redes neuronais no contexto da Mecânica Estatística. Apresentamos um formalismo geral que naturalmente interpola distribuições de pesos binários e contínuos (gaussianos). O caso $l = 1$ representa o peso binário padrão ($W_i = \pm 1$), e o caso $l \rightarrow \infty$ corresponde a uma distribuição gaussiana. Ilustramos o formalismo para o caso de um perceptron. Usando o método de réplicas, calculamos as curvas de aprendizado para valores específicos de l , e realizamos uma expansão $\frac{1}{l}$. Para valores finitos de l realizamos o primeiro passo de simetria de réplicas e comparamos os resultados com um método alternativo proposto recentemente[1].

[1] J.F. Fontanari, R. Meir J. Phys. A26 (1993) 1077.

APRENDIZAGEM E GENERALIZAÇÃO EM PERCEPTRONS MULTI-INTERAGENTES COM SAÍDAS CONTÍNUAS

IVALDO BOTELHO, RITA MARIA CUNHA DE ALMEIDA
UFRGS

Consideramos aprendizagem e generalização em redes neurais feed-forward sem camadas intermediárias (perceptrons) com interações sinápticas multineuronais e saídas contínuas. Definindo a priori a arquitetura do perceptron *professor* a partir de simetrias da função a ser aprendida, ajustamos os pesos sinápticos do perceptron *aluno* usando uma regra de aprendizagem obtida a partir da expansão em formas multilineares do mapeamento entrada-saída (conjunto de exemplos) gerado pelo professor. Para professores com sinapses descorrelacionadas, obtemos analiticamente as curvas de aprendizagem (treinamento e generalização) para funções ativação inversíveis, e mostramos que o aluno aprende a arquitetura do professor através de um algoritmo de diluição gerado pela própria regra de aprendizagem. Os resultados analíticos apresentam excelente concordância com as simulações numéricas.

GENERALIZAÇÃO NO MODELO DE HOPFIELD SIMETRICAMENTE DILUÍDO

PAULO ROBERTO KREBS
UFPEL
WALTER KARL THEUMANN
UFRGS

A capacidade de generalização em redes de neurônios atratoras tem sido objeto de estudo em trabalhos recentes. A generalização consiste na criação espontânea de estados atratores que representam as informações (conceitos) comum a um conjunto de padrões (exemplos). Neste trabalho estudamos o efeito da diluição simétrica na capacidade de generalização do modelo de Hopfield através da teoria de campo médio. A partir das equações para os parâmetros de ordem construímos os diagramas de fases (α, T) para vários valores de conectividade, caracterizando as fases de generalização, vidro de spin e paramagnética. Obtivemos as curvas de erro de generalização em função do número de exemplos para diferentes valores de correlação entre exemplos e conceitos, da temperatura, da capacidade de armazenamento ($\alpha = \frac{p}{Nc}$) e da conectividade (c). A diluição favorece a capacidade de generalização na medida que é necessário um número menor de exemplos para que a rede diluída atinga a fase de generalização. Outro aspecto interessante é o aumento do valor crítico da capacidade de armazenamento α_c no modelo com diluição.

Workshop: *Sistemas Quânticos (EST)* -
08/06/95

MODELOS QUÂNTICOS DE SPINS COMO FERRAMENTAS PARA O ESTUDO DE DINÂMICAS DE SISTEMAS CLÁSSICOS

FRANCISCO C. ALCARAZ
Dept. Física - UFSCar

Em processos de não equilíbrio a evolução temporal da distribuição de probabilidade é governada por uma equação mestra. Se interpretarmos tal equação como uma equação de Schrödinger, teremos associada à esta dinâmica (clássica) uma Hamiltoniana quântica de spins. Surpreendentemente os processos dinâmicos mais simples nos conduzem a Hamiltonianas quânticas bem populares na Mecânica Estatística do equilíbrio. Particularmente em uma dimensão, as cadeias de spins associadas são exatamente integráveis (via *ansatz* de Bethe) e o seu diagrama de fases (equilíbrio) nos informa sobre o tipo de dinâmica (não equilíbrio) do sistema associado.

No estudo de modelos exatamente integráveis sabe-se que álgebras associativas como as de Temperley-Lieb, Hecke, etc, desempenham um papel importante. Contudo as cadeias quânticas para serem expressas como soma de ger-

adores destas álgebras precisam de termos de borda não físicos (em geral complexos). Por outro lado as cadeias quânticas associadas a processos dinâmicos simples surgem de forma natural como a soma de geradores destas álgebras, o que nos indica que tais álgebras traduzem a física de processos dinâmicos simples.

Diagrama de fases do modelo de Bose-Hubbard

M. J. DE OLIVEIRA

USP

O modelo de Bose-Hubbard [1] na sua forma mais simples é definido pela hamiltoniana

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle} (a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i) - \mu \sum_i n_i + V \sum_{\langle ij \rangle} n_i^2$$

onde a_i e a_i^\dagger são operadores de destruição e criação de bósons, respectivamente. O modelo apresenta num diagrama de fases (t, μ) linhas de transição de uma fase isolante de Mott para uma fase superfluida. Usamos um método de Monte Carlo, introduzido recentemente [2], para determinar as propriedades desse modelo a temperatura zero e construir o diagrama de fases. Acredita-se que, em duas dimensões, o modelo possa descrever qualitativamente o comportamento de um filme de hélio.

[1] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman and D. S. Fisher, *Phys. Rev. B* **40**, 546 (1989).

[2] M. J. de Oliveira, *Phys. Rev. B* **48**, 6141 (1993).

Magnetism and Pairing in Hubbard Bilayers

RAIMUNDO ROCHA DOS SANTOS

Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense

We study the Hubbard model on a bilayer with repulsive on-site interactions, U , in which fermions undergo both intra-plane (t) and inter-plane (t_z) hopping. This situation is what one would expect in high-temperature superconductors such as YBCO, with two adjacent CuO_2 planes. Magnetic and pairing properties of the system are investigated through Quantum Monte Carlo simulations for both half- and quarter-filled bands. We find that in all cases inter-planar pairing with $d_{x^2-z^2}$ symmetry is dominant over planar pairing with $d_{x^2-y^2}$ symmetry, and that for t_z large enough pair formation is possible through antiferromagnetic correlations. However, another mechanism is needed to make these pairs condense into a superconducting state at lower temperatures. We identify the temperature for pair formation with the spin gap crossover temperature.

CÁLCULO DO CALOR ESPECÍFICO DO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO TORNA-SE POSSÍVEL FORA DA ESTATÍSTICA DE BOLTZMANN-GIBBS

LIACIR DOS SANTOS LUCENA, LUCIANO RODRIGUES DA SILVA

DFTE-UFRN Natal RN

CONSTANTINO TSALLIS

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Qualquer bom livro texto de Mecânica Quântica contém a solução exata de cinco sistemas físicos: a *Partícula Livre* (não relativística), o *Oscilador Harmônico*, o "spin 1/2" (na presença de um campo magnético externo), o *Rotor Rígido* e o *Átomo de Hidrogênio*. Os quatro primeiros também estão presentes em qualquer bom livro texto de Mecânica Estatística. Nunca o átomo de Hidrogênio! Pior que isto, na maioria desses livros, nenhuma palavra é dita sobre esta omissão. A razão está no fato de que o calor específico do átomo de Hidrogênio (não ionizado) não pode ser calculado dentro da Mecânica Estatística de Boltzmann-Gibbs, essencialmente porque sua função de partição **diverge**. Neste trabalho, usando o formalismo generalizado recentemente introduzido por um de nós ^[1], mostramos que esta dificuldade é superada para $q < 1$ (o índice q caracteriza a estatística; Boltzmann-Gibbs corresponde a $q = 1$). ^[1] C. Tsallis, *J. Stat. Phys.* **52**, 479 (1988)

Sistemas Dinâmicos (EST) - 08/06/95

Topology, Dynamics and Finite Size Effects of a Kinetic Growth Model

ROBERTO NICOLAU ONODY, UBIRACI PEREIRA DA COSTA NEVES

Departamento de Física e Informática Instituto de Física de São Carlos - USP

Ramified polymerization is studied through computational simulations on the square lattice of a kinetic growth model generalized to incorporate branching and impurities. The polymer configuration is identified with a bond tree in order to examine its topology. The fractal dimensions of the clusters are obtained at criticality. Simulations also allow the study of time evolution of clusters as well as the determination of time autocorrelations and dynamical critical exponents. In regard to finite size effects, a fourth-order cumulant technique is employed to estimate the critical branching probability b_c and the critical exponents ν and β . Finally, for the case when impurities are not present, the surface roughness is described in terms of the Hurst exponents.

CINÉTICA DA INTERFACE NEMÁTICO-ISOTRÓPICA FORA DO EQUILÍBRIO

JOSÉ MARCOS A. FIGUEIREDO, JAFFERSON KAMPHORST L. SILVA, OSCAR N. MESQUITA
UFMG

A transição de fase nemático-isotrópica em cristais líquidos é fracamente de primeira ordem. Um problema de interesse, tanto acadêmico como prático, é a determinação da velocidade de crescimento da fase estável

quando o sistema é inicialmente preparado em um estado metaestável. O objetivo desse estudo é comparar as previsões teóricas de uma teoria tipo campo médio, através da equação de Ginzburg-Landau (GL), com experimentos realizados em nosso laboratório. O experimento consiste em superresfriar (superaquecer) uma amostra do cristal líquido 8CB e medir a velocidade da interface planar, que separa fase estável da metaestável, através da técnica de videomicroscopia com análise digital de imagens. O superresfriamento é caracterizado pela diferença de temperatura $\Delta T = T_{NI} - T_i$, onde T_{NI} é a temperatura de equilíbrio nemático-isotrópica (40,5°C neste caso) e T_i é a temperatura real da interface. Da análise da equação GL a velocidade da interface é linear com ΔT (ΔT pequeno) e muda de sentido quando passamos da situação de superresfriamento para superaquecimento. Embora o superresfriamento possa atingir valores altos (da ordem de vários graus centígrados), prevê-se que o superaquecimento máximo é da ordem de 0,25°C. A teoria prevê a não existência da interface planar para superaquecimentos superiores a este valor. Experimentalmente, para valores de superaquecimento acima de 0,25°C, observamos que a interface planar quebra-se em múltiplas gotas da fase nemático dentro da isotrópica.

STEADY FOAM STATES

PEDRO LICINIO, JOSÉ MARCOS FIGUEIREDO
Dep. Física - ICEX - UFMG

Foams were produced by mixing air and water+extran solutions in a shaker. We measured bubble radius distributions as a function of the angular frequency ω of the shaker. We found the resulting histograms to scale as Gaussians or Boltzmann-like. Long time observations revealed that these distributions are stationary.

These findings suggest that the turbulent dissipation of shaker power creates a steady foam state where detailed balance is obeyed. They also point towards a natural decomposition of the foam state into uncorrelated "bubble-modes". We found a linear relationship between the shaker power and foam energy density above a threshold frequency, ω_0 , for the formation of foam. This limit corresponds to the onset of surface wave instabilities (breakups). We also observe an unexpected zero-point energy, ϵ_0 , at the threshold of foam development. The self-organized stationary distribution can be interpreted as resulting from the interplay between turbulent energy disposal and dissipation in the structure.

Experimental Studies of the Fingering Phenomena in Two Dimensions and Simulation Using a Modified Invasion Percolation Model.

ROBERTO NICOLAO ONODY

DFI, IFSC, USP.

ADOLFO NICOLAS DURAND POSADAS, SILVIO

CRESTANA

CNPq, EMBRAPA, São Carlos, SP.

Experiments of water infiltration in a vertical plane through layered soils were carried out in the laboratory. We have followed the fingering dynamics by using image techniques. The fractal theory has been applied to describe the fingering phenomena. We also have simulated a modified site gradient invasion percolation model where most of the physical ingredients relevant to the problem have been incorporated. Differently to what happens with the standard gradient invasion percolation model, we have found the formation of many fingers. Taking into account the bond number, the number of fingers and the wetted area of the experiments, we have fitted the parameters of our model. This opens the possibility of a theoretical predictions of the pore size distribution of the soil. The results are then compared with the experimental data.

TEORIA DA RESPOSTA LINEAR A PARTIR DA EQUAÇÃO DE FOKKER-PLANCK E SIMULAÇÃO NUMÉRICA.

TRIESTE FREIRE RICCI, CLAUDIO SCHERER

UFRGS

Desenvolvemos a Teoria da Resposta Linear a partir de uma classe de Equações de Fokker-Planck (FPE),

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \hat{L}(\vec{x}, t) \cdot W(\vec{x}, t)$$

onde \vec{x} é um vetor com N componentes, W é a densidade de Probabilidade e \hat{L} é o Operador de Fokker-Planck,

$$\hat{L} = -\partial_i A_i(\vec{x}, t) + \partial_i \partial_j D_{ij}(\vec{x}, t)$$

(estamos usando a convenção de Einstein para índices repetidos e $\partial_i = \frac{\partial}{\partial x_i}$). A classe especial referida é caracterizada por um Coeficiente de Arraste da forma $A_i = \gamma_{ij}(\vec{x}) H_j(\vec{x}, t)$, onde $\vec{H} = \vec{H}_0(\vec{x}) + \delta \vec{H}(t)$ é um campo interagente, e por Coeficientes de Difusão dados por $D_{ij} = D \delta_{ij}$, D sendo uma constante. Esta classe é geral o bastante para abarcar uma grande quantidade de fenômenos da Mecânica Estatística Clássica de Não-Equilíbrio. Conseguimos expressar a Função-Resposta $\Phi_{ij}(t)$ do sistema na forma

$$\Phi_{ij}(t) = \langle \gamma_{kj}(\vec{x}) \frac{\partial}{\partial x_k} \bar{x}_i^o(t | \vec{x}) \rangle_o$$

onde $\bar{x}_i^o(t | \vec{x})$ é a média de ensemble de x_i instantânea dado que em $t = 0$ a partícula se encontrava numa posição do espaço de fase termodinâmico dada por \vec{x} e o índice "o" significa que qualquer média de ensemble deve ser calculada na ausência da perturbação $\delta \vec{H}(t)$. Esta relação torna possível o cálculo numérico por Simulação Monte Carlo. O método foi aplicado a um modelo estocástico para Superparamagnetismo, desenvolvido anteriormente pelos autores, e alguns resultados numéricos são apresentados.

DYNAMICS OF THE TRANSVERSE ISING MODEL OF FOUR-SPIN INTERACTIONS

JOÃO FLORENCIO JR

Universidade Federal de Minas Gerais and Pennsylvania State University

OSIEL FERREIRA DE ALCÂNTARA BONFIM

Universidade Federal de Minas Gerais and Pacific University

FRANCISCO CESAR SÁ BARRETO

Universidade Federal de Minas Gerais

We consider a spin model in which four nearest neighbor spins interact with each other in the presence of a transverse field—the transverse Ising model of four-spin interactions. We use the method of diagonalization of finite chains to study the dynamics of the model. We consider finite chains of increasing size in order to determine the time-dependent correlation function as well as the longitudinal relaxation function of the infinite chain. We also obtain 8 exact and 5 approximate moments of the chain in the thermodynamic limit. The correlation function is oscillatory for large values of the transverse field and is monotonically decreasing for small values of the transverse field. The system undergoes a crossover from a collective mode excitation regime to a central mode type of dynamics as the strength of field is lowered. We also show that the present model does not allow a Gaussian decay for the correlation function.

Dinâmica, Caos (EST) - 08/06/95

**PROPAGAÇÃO DE DANOS E
SUSCEPTIBILIDADE NO MODELO
FERROMAGNÉTICO QUÂNTICO DE
HEISENBERG $S=1/2$**

URIEL MEDEIROS DE SOUZA COSTA
UFAL

IGOR ROJDESTVENSKI

University of Western Ontario - Canada

Sugerimos uma nova maneira de investigar as propriedades térmicas do modelo ferromagnético de Heisenberg quântico através da técnica de propagação de danos. A técnica de propagação de danos baseada no método Monte Carlo de Handscomb foi por nós introduzida anteriormente. Definimos uma "distância de Hamming com correlações cíclicas" e estudamos a dependência térmica desta quantidade em uma dimensão, em duas dimensões na rede quadrada, em um filme com duas camadas e em três dimensões na rede cúbica simples. Mostramos a correspondência da "distância de Hamming com correlações cíclicas" com a susceptibilidade para a ferromagneto de Heisenberg. Ilustramos nossa conclusão comparando nossos dados com vários resultados conhecidos para a susceptibilidade.

**ASSINATURA DE RUÍDO EM ESPECTROS
DE EXPOENTES DE LYAPUNOV.**

NESTOR NORIO OIWA, NELSON FIEDLER-FERRARA
IF/USP

Sinais experimentais encontram-se invariavelmente contaminados por ruído. Estudando-se os espectros de expoentes de Lyapunov em mapas, fluxos e sinal gerado por números pseudo-aleatórios, observa-se uma assinatura típica de ruído quando às séries temporais caóticas é adicionado ruído estocástico. Isso permite identificar perfis característicos para sinais caóticos e ruidosos. Os espectros de expoentes de Lyapunov foram estimados utilizando-se quatro diferentes métodos: Wolf *et al.* (Phys.16D, 285, 1985), Sano-Sawada (Phys.Rev.Lett.55, 1082, 1985), Eckmann-Ruelle (Phys.Rev.A34, 4971, 1986) e Brown *et al.* (Phys.Rev.A 43, 2787, 1991). Verificou-se que os métodos de Sano-Sawada e Brown *et al.* são os mais indicados para detectar esses perfis. Pelo método de Eckmann-Ruelle a assinatura de ruído é pouco visível e o algoritmo de Wolf *et al.* não possui sensibilidade suficiente para detectá-la. Constata-se também a presença dessa assinatura de ruído no espectro de expoentes de Lyapunov obtidos em sinais experimentais associados com flutuações de densidade eletrônica na borda do plasma do tokamak TBR-I.

CATASTROPHES IN SOLITON DYNAMICS

JORGE ALBERTO GONZALEZ

CIFMC-UnB

The influence of external forces and impurities on the properties of solitons in generalized Klein-Gordon equations is investigated. We have studied the existence of soliton solutions in these equations. We have found exact soliton solutions and we have solve exactly the stability problem. We have developed a catastrophe theory for solitons in a potential field and for the bifurcations of the system. The soliton behaves as an extended object. An inhomogeneous external force changes the spectrum of small oscillations around the soliton, and additional bound states can appear. The inhomogeneity can cause the translational mode to be stable, which means that the soliton is trapped by the impurity; or it can change its stability, which means that the soliton is repelled by the impurity. Moreover, it can occur that not only the translational mode is unstable but also higher bound states (shape modes) or even part of the continuum spectrum (the soliton is unstable against the interaction with phonons). All this leads to interesting phenomena like soliton explosions. We have found the existence of space-time attractors including strange attractors (i.e. chaotic solitons!). Power-law behaviors and complex dynamics are investigated.

**O MODELO DE ISING FERROMAGNÉTICO
BIDIMENSIONAL: PROPAGAÇÃO DE
DANOS E SEU CAMPO CONJUGADO**

FRANCISCO ANTONIO TAMARIT

Fa.M.A.F, Universidad Nacional de Córdoba

LADÁRIO DA SILVA

CBPF

A técnica de propagação de danos tem sido muito aplicada ao estudo das propriedades dinâmicas de modelos magnéticos. Em particular, quando aplicada no modelo de Ising ferromagnético na ausência de campo magnético encontra-se uma transição de fase dinâmica na temperatura crítica termodinâmica. Mas, na presença de campo magnético a transição de fase dinâmica persiste, entanto que a termodinâmica é destruída. Isto indica que o campo magnético não é o campo conjugado associado à transição dinâmica. Neste trabalho estudamos, numericamente, a propagação de danos no modelo de Ising ferromagnético bidimensional submetido a um novo tipo de campo externo h introduzido recentemente na literatura por Martins e Tsallis, no contexto de automata celulares. O campo é definido como sendo proporcional à frequência com a qual os números aleatórios usados para atualizar as duas réplicas são os mesmos. Mostramos que este destrói a transição de fase dinâmica e que a susceptibilidade associada diverge na temperatura crítica, ou seja, que é o campo conjugado ao dano.

DINÂMICA DA FORMAÇÃO DE MÚLTIPLAS GOTAS EM REGIME DE ALTA VAZÃO

ALBERTO TUFÁILE, REYNALDO DANIEL PINTO,
WHILK MARCELINO GONÇALVES, JOSÉ CARLOS
SARTORELLI
USP

Recente trabalho de Shi et al [1] mostrou a formação de múltiplas gotas de glicerina, cuja viscosidade está por volta de duas mil vezes a viscosidade da água [2] à temperatura ambiente. Em nossos experimentos com água [3] verificamos que em tórno de 40 gotas por segundo o fluxo torna-se contínuo no nível do sensor, porém há formação de múltiplas gotas numa posição 10 cm abaixo do sensor. Apresentando o movimento comportamento caótico. Serão apresentados gravações em vídeo mostrando a formação de múltiplas gotas, além de uma análise preliminar da dinâmica envolvida.

[1] X. D. Shi, M. P. Brenner, S. R. Nagel, *Science*, jul(1994)219;

[2] R. C. Weast, *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, CRC Press Inc, Florida, 1989;

[3] J. C. Sartorelli, W. M. Gonçalves e R. D. Pinto, *Phys. Rev. E*, mai(1994) 3963.

APLICAÇÃO DE ALGORITMOS PARA A CARACTERIZAÇÃO DE SÉRIES DE DADOS DA TORNEIRA GOTEJANTE EM REGIMES CAÓTICOS.

JOSÉ GUSTAVO MARQUES DA SILVA, JOSÉ CARLOS
SARTORELLI, WHILK MARCELINO GONÇALVES,
REYNALDO DANIEL PINTO
IFUSP

Estamos estudando a viabilidade da aplicação de diversos algoritmos para a caracterização de séries de dados gerados na experiência da torneira gotejante, com características caóticas. Os dados são compostos de intervalos de tempo entre uma gota e a seguinte, formando uma série temporal peculiar. Takens demonstrou ser possível reconstruir a dinâmica num pseudo-espaço de fases com as mesmas características topológicas do espaço do sistema dinâmico completo, com apenas uma variável. Baseado nisto, diferentes procedimentos foram desenvolvidos para se fazer esta reconstrução e a consequente caracterização da dinâmica do sistema. Estamos estudando a aplicação de diversos métodos de caracterização, para séries em regimes caóticos, como função de auto-correlação, informação mútua média, dimensão de correlação, método dos falsos-vizinhos e outros métodos. Estes métodos também possibilitam o estudo do nível de ruído associado a série. Resultados preliminares serão apresentados e discutidos.

ESTUDO DE MODELOS DE CRESCIMENTO EM SUBSTRATOS INICIALMENTE RUGOSOS

TALES JOSÉ DA SILVA, JOSÉ GUILHERME MOREIRA
UFMG

Para modelos de crescimento em que alguma regra imposta não permite grandes diferenças de altura, é válida a relação de escala

$$w(L, t) = L^\alpha f\left(\frac{t}{L^{\alpha/\beta}}\right)$$

onde w é a rugosidade do perfil, L o tamanho linear do substrato, t é o tempo de deposição de partículas e

$$f(x) \sim \begin{cases} x^\beta, & \text{para } x \ll 1; \\ \text{const}, & \text{para } x \gg 1. \end{cases}$$

Quando $x \ll 1$ ou $t \ll L^{\alpha/\beta}$, a rugosidade nos apresenta um comportamento dinâmico do tipo $w \sim t^\beta$ com $\beta < 1/2$. O valor $\beta = 1/2$ significa um crescimento sem correlações de altura. Agora, quando $t \gg L^{\alpha/\beta}$, a rugosidade estará se comportando como $w_\infty \sim L^\alpha$ sendo a interface de crescimento um fractal auto-afim. Mostraremos aqui o comportamento da relação de escala quando se varia as condições iniciais da rugosidade do substrato. Produzimos substratos bastante rugosos com o algoritmo SOS, onde não há correlação alguma entre vizinhos. Depositamos, então partículas de acordo com uma dinâmica RSOS (SOS com restrição) por cima do substrato previamente preparado e calculamos o tempo de decaimento desta, definido como o tempo em que os valores da rugosidade transitam de uma dinâmica a outra. Nos modelos RSOS pode-se controlar a diferença de altura entre vizinhos, sendo que a cada destas equivale a um valor de w_∞ . Estudaremos também as transições entre dois valores de w_∞ e seus tempos de decaimento.

Macroscopic Dissipation of Energy in Granular Systems: A First Principles Approach.

WELLES ANTÔNIO MARTINEZ MORGADO, PROF.
IRWIN OPPENHEIM

Massachusetts Institute of Technology

Granular Systems present a variety of behaviors depending on the external constraints upon them. For example a solid-like resistance to shear below a certain threshold of stress and liquid-like flow above that threshold. In the present work we analyze the inelastic flow of granular systems and compare our results (obtained with projection operator techniques) with a more phenomenological approach which assumes a coefficient of restitution for collisions between particles of

the system. We then study the steady state distribution properties using the inelastic Boltzmann equation obtained from a Fokker-Planck equation depending on the kinetic degrees of freedom of the system.

DIAGRAMA DE FASES DINÂMICO DE UM ANTIFERROMAGNETO DE ISING NUM CAMPO MAGNÉTICO VARIÁVEL.

GILBERTO LUIZ HOENICKE, PAULO CÉSAR T. D'AJELLO, WAGNER FIGUEIREDO
Departamento de Física, UFSC

Consideramos neste trabalho o comportamento dinâmico de um modelo de Ising antiferromagnético numa rede quadrada. O sistema está sob a ação de um campo magnético que varia senoidalmente com o tempo. Determinamos a evolução temporal da probabilidade associada ao sistema de spins através da equação Mestra, e aplicamos a aproximação de pares para descrever os estados estacionários desse sistema. Determinamos o diagrama de fases desse modelo no plano temperatura versus intensidade do campo magnético externo. Mostramos que a linha crítica, que separa as fases antiferromagnética e paramagnética, depende da razão entre as frequências do campo externo e de inversão dos spins no banho térmico que, neste caso, segue a prescrição de Glauber. Dependendo do valor dessa razão de frequências, o campo crítico estacionário pode ser maior ou menor que aquele observado no estado de equilíbrio. Além disso, se a frequência do campo externo for muito maior que a frequência de inversão dos spins o sistema permanece na fase antiferromagnética para qualquer valor da amplitude do campo.

RENORMALIZAÇÃO DINÂMICA EM REDES ANARMÔNICAS

FERNANDO ALBUQUERQUE DE OLIVEIRA
CIFMC-UnB

Em redes onde a interação entre os primeiros vizinhos é linear, em geral é possível obter uma relação recursiva para as equações do movimento. Entretanto, quando a interação é não linear, torna-se difícil associar um parâmetro de controle (comprimento) em relação ao qual a dinâmica do sistema seja invariante. Neste trabalho nós demonstramos que no processo de fratura uma rede anarmônica pode ser mapeada em uma rede linear com um defeito, sendo deste modo possível uma renormalização dinâmica. Estudando as propriedades da *Rede Transformada* nós obtivemos resultados analíticos, aproximados, para a função de correlação temporal, e para a memória do defeito. Estes resultados são comparados com os obtidos pela simulação. Obtivemos também resultados exatos para a decimalização do ruído.

PROPAGAÇÃO DE DANOS E DILUIÇÃO

E. S. DE SOUSA, F. D. NOBRE, A. M. MARIZ
UFERN
U. M. S. COSTA
UFAL

A técnica da propagação de danos tem sido recentemente empregada para estudar a evolução dinâmica de modelos estatísticos. Consiste essencialmente em comparar a evolução temporal de duas configurações de um dado sistema, medindo a sua "diferença", a distância de Hamming D . Neste trabalho esta técnica é usada para estudar o modelo de Ising ferromagnético, apresentando diluição temperada de sítios (sendo p a probabilidade de ocupação de um dado sítio) em uma rede quadrada. Utilizando a dinâmica do banho térmico para simular a evolução temporal do sistema, obtemos os resultados que descrevemos a seguir. (a) Para $p > p_c$ (probabilidade crítica de percolação), encontramos uma fase caótica ($D \neq 0$) para baixas temperaturas e uma fase congelada ($D = 0$) em altas temperaturas. Comparamos a temperatura de transição entre estes regimes ($T_D(p)$) com a temperatura crítica usual ($T_c(p)$). (b) Surpreendentemente, para $p < p_c$ o mesmo quadro está presente (nesta região não existe nenhum tipo de ordem de longo alcance, para qualquer temperatura). Discutimos brevemente estes aspectos do problema.

A GENERALIZED ONE-DIMENSIONAL OSCILLATOR AND CHAOS CONTROL

JOSÉ MAURICIO OLIVEIRA MATOS
Univ. Federal do Ceará

A simple mechanical system [1] is used to model one-dimensional linear and non-linear oscillators. By numerical experiments, the non-linear states both periodic and chaotic are studied via Poincaré maps and Lyapunov exponents. A particular case, the Duffing oscillator is studied as an example of the variety of non-linear systems that can be extracted from the model. Also, a route to chaos by bifurcation is presented for a high non-linear case of the model. Two different methods of control are applied to suppress and induce chaos on the system [2]. The methods used are the parametric perturbation [3] and a method that consists into applying a small time-dependent modulation to a chosen parameter of the system [4,5]. The Lyapunov exponents were computed from the Wolf's algorithm [6], and the

differential equations were solved by a fourth and fifth order Runge-Kutta solver [7]. References

- [1] J.Thomchick and J.P. McKelvey, Am. J. Phys., 46,41(1978)
- [2] T.Shinbrot, C.Greborgi, E.Ott and J.A.York, Nature, 363,411(1993)
- [3] R.Lima and M.Pettini, Phys. Rev. A, 41,726(1990)
- [4] A.Azevedo and S.M.Rezende, Phys. Rev. Lett., 66,1342(1991)
- [5] Y.Liu, J.R.Rios Leite, Phys. Lett. A, 185,35(1994)
- [6] A. Wolf, J.B.Swift, H.L.Swinney and A.Vastano Physica,16D,285(1985).

†Work partially financed by Brazilian Agencies CNPq and Finep.

SELF-CONSISTENT CHAOS AND ARNOLD DIFFUSION IN THE CYCLOTRON RESONANCE LASER ACCELERATOR

RENATO PAKTER, FLÁVIA O. COUTO, FELIPE B. RIZZATO

Univ. Fed. do Rio Grande do Sul

In this work, we search for the presence of chaos in a self-consistent model for the cyclotron-resonance maser accelerator, where an electron beam interacts with a strong magnetic field and a circularly polarized electromagnetic wave that propagates parallel to the guide magnetic field. The exponential divergence of trajectories is used in order to study the onset of chaos. Two characteristic regimes are identified: if the initial energy of the accelerating particles is small, there occurs phase-bunching, the particle population is therefore condensed into a single macroparticle in gyrophase-space, and the low-dimensional state thus formed is predominantly regular; for larger initial energies, however, there is no macroparticle formation, the system is high-dimensional, and chaos can be found. Arnold diffusion appears to be one of the ingredients of these chaotic states. A simple model is presented in order to verify the onset of diffusion.

Dinâmica de Populações

ACIRETE SOUZA DA ROSA SIMÕES, LEONARDO BRUNET
UFRGS

Estudamos a dinâmica de populações de uma rede ecológica considerando diferentes modos de interação entre estas populações. Simulamos uma rede onde, para cada sítio, atribuímos uma dinâmica (a tempo discreto e contínuo) não homogênea. Analisamos o comportamento do sistema pela variação das interações entre os sítios, considerando inicialmente conexões apenas entre os primeiros vizinhos e posteriormente, conexões globais. Investigamos a possibilidade de um comportamento coletivo emergente do caos local.

MODELING NEURONS BY SIMPLE MAPS.

OSAME KINOUCHI

IFUSP

MARCELO H. R. TRAGTENBERG

UFSC

We show that a simple perceptron with two inputs used in tapped delay mode has sufficient richness to model an excitable element of Fitzhugh-Nagumo type. The perceptron behavior is given by a two-dimensional map (which incidentally has been studied before in the context of spin systems with competitive interactions). We present dynamical phase diagrams in parameter space for the stationary behavior of the map and we study qualitatively the transient responses for instantaneous perturbations. These transient responses are similar to the presented by biological neurons if the system has parameters near a bifurcation surface which corresponds to a first order phase transition in the associated spin model.

PROPAGAÇÃO DE DANOS NO MODELO DE POTTS

MARTA FERNANDA DE ARAÚJO BIBIANO
UFPB/UFPE

FRANCISCO GEORGE BRADY MOREIRA
UFPE

ANANIAS MONTEIRO MARIZ
UFRN

O modelo de Potts com q estados associa a cada sítio da rede uma variável discreta $\sigma = 0, 1, 2, \dots, q-1$. Para $q \leq 4$ o modelo apresenta transição de fase de 2ª ordem, enquanto que para $q > 4$ a transição é de 1ª ordem. Realizamos simulações numéricas da propagação de danos em redes quadradas, com condições de contorno periódicas e calculamos a distância Hamming dada por

$$D(t) = (1/N) \sum (1 - \delta(\sigma_i^A(t), \sigma_i^B(t))),$$

onde $\delta(\sigma_i^A(t), \sigma_i^B(t))$ é a função delta de Kronecker. Utilizando as dinâmicas de Glauber e de banho térmico, calculamos $D(t)$ em função da temperatura, com valores de $q \leq 6$ e dano inicial $D(0) = 1/N$. No caso de $q = 2$ obtemos os resultados bem conhecidos do modelo de Ising. Para $q > 2$, na dinâmica de Glauber obtemos que o dano se propaga em $T > T_c(q)/2$, sendo independente do valor de q em $T < T_c(q)$ e igual a $(q-1)/q$ em $T > T_c(q)$. Na dinâmica de banho térmico obtivemos um dano não nulo na região em torno da temperatura crítica, contudo apenas quando $q \geq 5$ o dano se propaga na totalidade das amostras consideradas. Isto sugere que a taxa de sobrevivência pode estar relacionada com a ordem da transição de fase.

Transition to phase turbulence in coupled ordinary differential equations

LEONARDO GREGORY BRUNETT

IF-UFRGS

HUGUES CHATÉ, PAUL MANNEVILLE

CEA-Saclay

In a previous work (*Physica D* 78 (1994) 141) we have established the analogies and differences between a lattice of coupled Rössler systems and an associate Complex Ginzburg-Landau (CGL) equation. Studying the propagation of plane waves in the system we found the parameters of the equivalent CGL equation. In this work we explore this phase diagram through a generalization in the site connections of the coupled Rössler system. This way, changing one parameter, we cross continuously to the phase turbulent regime where there are no phase defects but also no stable plane waves.

TRANSIÇÃO NÃO TRIVIAL PARA CAOS EM SISTEMAS HAMILTONIANOS QUE APRESENTAM ILHAS DE RESSONÂNCIA TIPO NÃO PÊNDULO

GILBERTO CORSO, FELIPE RIZZATO

UFRGS

Sistemas Hamiltonianos comumente apresentam ressonâncias da forma ilhas tipo pêndulo. Tais ilhas transitam para o caos na forma de bifurcação em cascata infinita, similarmente a forma descrita por Feigenbaum. Por outro lado, determinada classe de Hamiltonianos apresenta ilhas de ressonância não pendulares, de aspecto aproximadamente triangular e não possuindo separatriz com pontos hiperbólicos. Estas ilhas podem apresentar transição para o caos tanto da forma tradicional, via bifurcação infinita, como através de bifurcação tipo tangente inversa. Para estas ilhas não-pêndulo é visto que o caminho escolhido na transição para o caos depende da variação de apenas um parâmetro no Hamiltoniano. São realizadas diversas simulações onde este fenômeno é visualizado com auxílio de seções de Poincaré. Paralelamente, é utilizado o algoritmo de Newton-Raphson que permite caracterizar o ponto elíptico interno a cada ilha de acordo com o tipo de bifurcação que ele venha a tomar.

ESTUDO DA DINÂMICA DE FORMAÇÃO DE GOTAS EM FUNÇÃO DA ALTURA DA COLUNA D'ÁGUA

REYNALDO DANIEL PINTO, WHILK MARCELINO

GONÇALVES, JOSÉ CARLOS SARTORELLI

USP

Temos observado comportamento periódico, caótico, intermitência [1], bifurcação de Hopf [2], em uma experiência da torneira gotejante, mantendo o nível do

reservatório a uma altura constante com uma válvula de bóia.

A variação de vazão tem sido obtida através da abertura de uma válvula de agulha comandada por um motor de passo. Neste caso, cada passo corresponde a 1/8 de grau de abertura da torneira, que embora sendo pequeno pode acarretar uma variação de vazão de tal maneira que um dado atrator não seja observado.

Fizemos um experimento no qual a abertura da torneira é mantida constante e a variação de vazão é obtida mantendo-se a válvula da bóia fechada. Para observarmos uma variação de 1mm na altura do nível são necessárias 1300 gotas, aproximadamente, portanto a variação de vazão é feita muito lentamente.

Serão apresentados resultados experimentais na forma de mapas de primeiro retorno a partir das séries pseudo-temporais formadas pelo tempo entre uma gota e a seguinte.

[1] J. C. Sartorelli, W. M. Gonçalves e R. D. Pinto, *Phys. Rev. E*, 49 3963 (1994).

[2] R. D. Pinto, W. M. Gonçalves, J. C. Sartorelli e M. J. Oliveira, *A Hopf bifurcation in a leaky faucet experiment*, a ser submetido no *Phys. Rev. Lett.*

INFLUÊNCIA DA FORMA DO BICO NA EXPERIÊNCIA DA TORNEIRA GOTEJANTE

WHILK MARCELINO GONÇALVES, REYNALDO

DANIEL PINTO, JOSÉ CARLOS SARTORELLI

USP

Para verificarmos a influência da forma do bico nos diversos regimes de gotejamento fizemos medidas nas mesmas condições experimentais com 3 bicos diferentes. Usamos 3 bicos de mesmo diâmetro interno mas com ângulo de abertura do cone externo de 0, 15 e 45° respectivamente.

Serão apresentados mapas de retorno feitos com o tempo entre uma gota e a seguinte (t_{n+1} vs t_n), para uma mesma região de vazão além de estudos preliminares comparativos de regimes periódicos, quasi-periódicos, caóticos e da estabilidade estrutural dos atratores.

[1] J. C. Sartorelli, W. M. Gonçalves e R. D. Pinto, *Phys. Rev. E*, 49 3963 (1994).

[2] R. D. Pinto, W. M. Gonçalves, J. C. Sartorelli e M. J. Oliveira, *A Hopf bifurcation in a leaky faucet experiment*, a ser submetido no *Phys. Rev. Lett.*

CAOS EM SISTEMAS ELETROQUÍMICOS

MAURICIO URBAN KLEINKE, LUIZ EDUARDO

MAINENTI PAGNEZ

Universidade Estadual de Campinas

A partir do desenvolvimento de uma técnica que permitiu a variação da reta de carga de um sistema eletroquímico, pode-se ressaltar uma região de oscilação de corrente na curva de eletrodissolução do ferro em

ácido sulfúrico. Os resultados foram obtidos através de um potenciostato PAR 273A ligado a um plotter HP7090A, ambos monitorados por um computador tipo PC486, via interface paralela HPIB. O trabalho desenvolvido, teve por objetivo caracterizar estas oscilações de corrente dentro do contexto da teoria do caos. O padrão apresentado pelas oscilações de corrente, era sensível ao potencial aplicado ao eletrodo. Fazendo-se amostras temporais da corrente em função deste potencial, foi observado, através do espectro de Fourier do sinal, o dobramento de período das oscilações, caracterizando o fenômeno da rota para o caos neste sistema. Avaliando as amplitudes do sinal monitorado, foi observado um comportamento com características similares a de uma bifurcação de Hopf.

DETERMINAÇÃO DA EVOLUÇÃO TEMPORAL DA FORMAÇÃO DE GOTAS

MÁRIO SANDRO FRANCISCO DA ROCHA, JOSÉ CARLOS SARTORELLI, WHILK MARCELINO GONÇALVES, REYNALDO DANIEL PINTO

IFUSP

Há menos de duas décadas (1977), Rössler sugeriu que o gotejamento de uma torneira poderia ser um exemplo de um sistema capaz de apresentar comportamento caótico mas, foi a partir de 1984, com o trabalho pioneiro de Shaw, que vários grupos experimentais começaram a realizar medidas precisas e a observar comportamento caótico, duplicação de período, crise e intermitências em experiências com uma torneira gotejante.

Neste trabalho, fazemos a caracterização da formação de gotas para baixa vazão, através do processamento e análises gráficas de imagens gravadas em vídeo, e comparação com a caracterização indireta feita pelo sistema de detecção a *laser*.

Para a digitalização (ou captura) das imagens gravadas em vídeo foram utilizados uma placa digitalizadora; e um vídeo cassete com resolução temporal de 1/60 s. Em cada captura, o programa controlador gera um arquivo no formato VSF. Para o processamento das imagens, os arquivos VSF são convertidos para o formato BMP.

O cálculo das grandezas associadas à cada gota em formação, tais como volume e centro de massa, é feito através de um programa específico que lê cada arquivo de imagem no formato BMP, e a partir das variações dos níveis de cinza da imagem, detecta o perfil da gota em formação. Os dados calculados através do processamento destas imagens são gravados em arquivos ASCII e posteriormente analisados.

Estudo de Perfis Auto-Afins Obtidos a Partir de Atratores Estranhos

ALCIDES VOLPATO CARNEIRO DE CASTRO E SILVA, JOSÉ GUILHERME MOREIRA

Departamento de Física - IEx - UFMG

Neste trabalho foram investigadas estruturas auto-afins cuja dimensão de imersão é $d = 2$, obtidas a partir de mapeamentos de atratores estranhos. É feito então, um estudo do coeficiente de Hurst para estes perfis, tendo assim a dimensão fractal do perfil. Foram usados dois atratores, que são bem conhecidos e estudados:

a) O Atrator de Hénon

$$x_{n+1} = 1 + y_n - ax_n^2$$

$$y_{n+1} = bx_n$$

onde $a = 1.4$ e $b = 0.3$

b) O Atrator de Feigenbaum

$$x_{n+1} = \mu x(1 - x)$$

onde $0 \leq \mu \leq 4$

Uma vez que os mapas obtidos através dos atratores acima descritos são objetos fractais, é interessante estudar o comportamento das variáveis envolvidas nesses processos. É provável que suas séries temporais bem como seu espectro de potências apresentem comportamentos de escala.

Simulação de desorção térmica de segunda ordem por Monte Carlo Dinâmico

SIEGHARD WEINKETZ, GUILLERMO CABRERA

Instituto de Física 'Gleb Wataghin', Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)

O processo de desorção térmica de uma espécie diatômica (desorção de segunda ordem) a partir de uma superfície quadrada é estudado dentro de um procedimento de Monte Carlo Dinâmico, em que a evolução temporal do sistema é obtida a partir dos processos locais de desorção e difusão, e suas multiplicitades, considerando-se o sistema como um processo de Poisson heterogêneo [Fichthorn e Weinberg, J. Chem. Phys. 95, 1090 (1991)]. A partir deste procedimento, obtém-se que o intervalo de tempo médio de um evento de desorção é proporcional à fração de sítos ocupados. Desta forma, a simulação corresponde à solução exata para os espectros de desorção térmica no limite não-interagente.

No caso não-interagente, com a presença de interações laterais e diagonais repulsivas entre as espécies adsorvidas, e no limite de difusão rápida em relação à difusão, é possível utilizar-se como aproximação o Método de Variação de Agregados (*Cluster Variation Method*) [R. Kikuchi, Phys. Rev. 81, 988 (1951)], permitindo uma boa comparação com os resultados da simulação. Em particular, obtém-se o surgimento de picos secundários nas regiões de alta cobertura, como uma redução na energia de ativação para desorção devido ao excesso de interações laterais.

CRITICAL DYNAMICS OF THE OPEN ISING CHAIN

JAFFERSON KAMPHORST L. SILVA, ADRIANA G.

MOREIRA, F. CÉSAR SÁ BARRETO
UFMG
 MOZART S. SOARES
PUCMG

The one-dimensional ferromagnetic Ising model with open boundary conditions within the Glauber dynamics is studied. From the behaviour of the order parameter of finite chains the dynamical critical exponent z is found. The z exponent is also obtained from mean-field renormalization group calculations.

STUDY OF COPPER ION DIFFUSION IN CuI BY THE MOLECULAR DYNAMICS METHOD.

M. CESAR DE OLIVEIRA, J. P. RINO
Departamento de Física, UFSCar

With the goal of better understand the physics of superionic conductors, in this work we study, through simulation by the Molecular Dynamics method, the properties of the compound CuI. As a model of ionic interaction, we use an effective pair-wise potential, consisting of a coulombic term, due to the charge transfer among ions, a charge-dipole interaction and a steric repulsion term. We study, as a matter of fact, the behavior of this system under ionic-superionic phase transition, obtaining thermodynamic and structural quantities in these two phases. Through dynamical correlations we obtain the vibrational spectrum of frequencies of CuI, evidencing the reduction of vibrational modes with the increment of temperature. These results are compared with experimental results of Raman excitation spectrum. By analysis of the self-diffusion coefficient and the charge diffusion coefficient, we obtain the Haven's ratio for some temperatures. The self-diffusion coefficient for Cu^+ in CuI, obtained through mean square displacement, shows good agreement with the experimental results of tracer diffusion.

PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E DINÂMICAS DE AGLOMERADO DE CARGAS EM DUAS DIMENSÕES

LADIR CÂNDIDO DA SILVA, JOSÉ PEDRO RINO,
 NELSON STUDART
Departamento de Física - UFSCar

O estudo da localização de aglomerados de íons ou elétrons em armadilhas tem atraído grande interesse recentemente tanto do ponto de vista teórico quanto experimental. Estas armadilhas são criadas de forma artificial através da imposição de um potencial de interação de confinamento. Armadilhas para íons e elétrons em plasmas, elétrons nas estruturas semicondutoras (pontos quânticos), elétrons adsorvidos em He líquido, que podem ser aprisionados em bolhas e anéis de armazenamento para íons-pesados, são alguns exemplos. Os dois últimos sistemas são descritos pela mecânica estatística

clássica devido à sua baixa densidade eletrônica, no primeiro caso, e devido à sua grande massa no segundo. É bem conhecido que um plasma de uma componente a baixas temperaturas sofre uma transição de fase formando um cristal de Wigner tanto em duas como em três dimensões. Neste trabalho, apresentamos um estudo detalhado (utilizando-se da dinâmica molecular) do sistema clássico bidimensional formado de um número finito de partículas (aglomerados de elétrons ou íons) que são confinados lateralmente por um potencial parabólico, ou por um potencial tipo parede dura. Especial ênfase é dada ao estudo da transição de fases estrutural do sistema.

Suporte financeiro : CAPES, FAPESP.

EFFECTIVE FIELD THEORY FOR HARD-SPHERE AND HARD-DISK FLUIDS

NELSON STUDART, HAMILTON V. DA SILVEIRA
*Departamento de Física, Universidade Federal de São
 Carlos, São Carlos, SP, 13565-905, Brasil*
 UMBELINO DE FREITAS

*Departamento de Física, Universidade Federal da Paraíba,
 João Pessoa, PB, 58051-970 Brasil*

We have developed an effective field theory based on the Singwi, Tosi, Land and Sjölander approximation for the density-density response function to investigate the properties of hard-sphere and hard disc fluids. Simple analytical expressions are provided for the effective potential, the static structure factor, the Fourier transform of the direct correlation function and the isothermal compressibility. As the theory is dynamic in nature, we have also calculated the collective modes. Our results are in good agreement with those obtained from molecular dynamics simulations at intermediate densities.

Polímeros, Caminhadas Aleatórias e Estruturas Fractais (EST) - 08/06/95

DIAGRAMA DE FASES DO MODELO DE ISING COM CAMPO EXTERNO EM UMA FAMÍLIA DE FRACTAIS

JOSÉ ARNALDO REDINZ
*Universidade Federal de Viçosa - UFV, MG e Centro
 Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF, RJ*
 AGLAÉ CRISTINA NAVARRO DE MAGALHÃES
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF, RJ
 RICARDO LUIS BRITTO COSTA
Universidade Federal Fluminense - UFF, RJ

O modelo de Ising sem campo externo definido na família de fractais do tipo Sierpinski Gasket com m folhas apresenta, a baixas temperaturas, uma fase não

usual onde as correlações entre spins decaem algebricamente com a distância (F. S. de Menezes e A. C. N. de Magalhães, Phys. Rev. B 46(1992)11642). Essa fase, no formalismo de Grupo de Renormalização (GR), está associada a um atrator localizado à uma temperatura finita não nula. Neste trabalho estudamos o diagrama de fases desse modelo com um campo magnético externo aplicado utilizando um formalismo exato de GR. O diagrama de fases fica então definido em um espaço de três parâmetros: um acoplamento K_2 entre primeiros vizinhos, um campo externo H e um acoplamento entre três spins K_3 (introduzido para manter fechado o espaço de parâmetros com a aplicação da transformação de GR). O sistema apresenta duas fases com ordem antiferromagnética e duas fases paramagnéticas (uma com campo H infinito positivo e outra com H negativo). Para uma dimensão fractal acima de uma certa dimensão crítica, o subespaço K_2 ($H = K_3 = 0$) apresenta, além das fases ferromagnética e paramagnética, a fase não usual com decaimento algébrico das correlações. Verificamos que a aplicação de um campo externo H , por menor que seja, destrói essa fase, tornando o sistema paramagnético. Além de obtermos o diagrama de fases completo, calculamos também os expoentes críticos do comprimento de correlação ν e de *crossover* associados às transições deste modelo.

Universalidade do Espectro de Singularidades de Medidas de Pureza Generalizadas.

MARCELO L. LYRA
UFAL

Neste trabalho o conjunto de funções de pureza generalizadas, as quais aparecem no problema de campos eletromagnéticos copropagando através de um meio Kerr, é caracterizado como uma família de medidas multifractais. Os espectros de singularidades destas medidas são obtidos e é mostrado que eles podem ser agrupados em três conjuntos distintos de acordo com um momento característico m . As medidas com $m < 3/2$ e $m > 3$ estão associadas a um espectro de singularidades universal, uma vez que a força das singularidades seja escalada apropriadamente. Para o conjunto de medidas com momentos intermediários, o espectro de singularidades exibe um comportamento não-universal. A forma do espectro de singularidades obtido neste trabalho é semelhante a dos "left-sided" espectros de singularidades que são obtidos para medidas cujos subconjuntos mais numerosos não exibem um comportamento de escala regido por uma lei de potência. Entretanto, as medidas estudadas neste trabalho contêm subconjuntos que obedecem a uma lei de escala bem definida no regime termodinâmico.

COLLAPSE TRANSITION OF BRANCHED POLYMERS IN TWO DIMENSIONS

UBIRACI PEREIRA DA COSTA NEVES, ROBERTO NICOLAU ONODY

Departamento de Física e Informática, Instituto de Física de São Carlos - USP

The phase diagram and the tricritical point of a collapsing branched polymer are studied through an extended series expansion of the isothermal compressibility k_T . As a function of the variables fugacity and Boltzmann weight, k_T is investigated using partial differential approximants technique. For different types of fixed points we have determined the corresponding characteristic flow pattern of partial differential approximants trajectories. We obtain satisfactory estimates for the tricritical fugacity $x_t = 0.024 \pm 0.009$ and temperature $T_t = 0.55 \pm 0.08$. Taking into account only linear scaling fields we were also able to get the scaling exponent $\gamma = 1.9 \pm 0.5$ and the crossover $\phi = 0.63 \pm 0.09$.

CORRELAÇÃO DE INFORMAÇÕES EM DISQUETES

GILNEY FIGUEIRA ZEBENDE, PAULO MURILO CASTRO DE OLIVEIRA

Instituto de Física da Universidade Federal Fluminense

Através do mapeamento em 1-D do Random Walk[1], estudamos correlações de longo alcance em disquetes. Como sabemos para o Random Walk

$$\xi \sim l^{\alpha=1/2}$$

onde ξ é o comprimento de correlação e l o número de passos dados pelo Random Walk. Este mapeamento foi utilizado em[1] com o objetivo de se estudar correlações de longo alcance em sequências de DNA, chamadas de DNA Walk. Baseado nesta idéia construímos o mapeamento pela contagem de zeros e uns do disquetes, desde o seu primeiro setor de dados, até o último. No mapeamento cada zero corresponderá a um passo "up" e cada um a um passo "down" do Random Walk. Com isto feito comprovamos a lei de escala, medimos o expoente α para vários tipos de disquetes (Real e Aleatório), mostrando que α depende do conteúdo e da forma com que o analisamos. Medimos também α em função do número de edições (de arquivos), demonstrando que α , dependendo de que tipo de edição, pode assumir diferentes valores.

[1]- C. K. Peng, S. V. Buldyrev, A. L. Goldberger, S. Havlin, F. Sciortino, M. Simons and H. E. Stanley, Nature 356 (1992) 168.

NÃO UNIVERSALIDADE EM UM MODELO DE RANDOM WALK COM ATRAÇÃO

FÁBIO D. A. AARÃO REIS

Universidade Federal Fluminense

Foi proposto recentemente um modelo de random walk generalizado em que a probabilidade de um passo é proporcional a $\exp(-nu)$, onde $n = 1$ para os sítios já visitados e $n = 0$ para os outros, com $u < 0$ (caso atrativo). Usando técnicas de enumeração exata, calculamos o deslocamento quadrático médio $\langle R_N^2 \rangle \sim N^{2\nu}$ e o número médio de sítios visitados $\langle S_N \rangle \sim N^s$ de caminhos de N passos, até $N = 35, 18, 14$ e 12 em redes de dimensões $D = 1, 2, 3$ e 4 , respectivamente. Em todas as dimensões o modelo apresenta difusão anômala ($\nu < 1/2$), e os expoentes ν e s variam continuamente com o parâmetro u , que mede a intensidade da atração. Os resultados são comparados com estimativas de simulações (em duas dimensões) e com resultados anteriores para modelos estáticos e dinâmicos de random walks generalizados (em uma dimensão), dos quais o presente modelo é um caso limite. O comportamento em duas e três dimensões pode ser útil para descrever difusão anômala em sistemas reais.

FINITE-SIZE SCALING PARA RANDOM WALKS EM FRACTAIS

FÁBIO D. A. AARÃO REIS
Universidade Federal Fluminense

Random walks em fractais são estudados através de simulações em escalas finitas de construção de redes fractais regulares. A dimensão do random walk (D_W) é calculada usando-se técnicas de finite-size scaling. Os resultados obtidos em redes em que o problema tem solução exata⁽¹⁾ provam a eficácia do método. Em fractais infinitamente ramificados, as estimativas de D_W diferem de estimativas anteriores baseadas em simulações que não eram tratadas levando em conta correções de tamanho finito⁽²⁾. A comparação com resultados para cadeias ideais⁽³⁾ (modelo de polímeros ideais) mostra que nestes fractais os dois modelos também não pertencem à mesma classe de universalidade, sendo em geral $D_W < D_{IC}$ (dimensão da cadeia ideal). Os efeitos das dimensões fractais (D_F), das lacunaridades e das ramificações das redes estudadas sobre D_W e D_{IC} são discutidos. Estimativas de D_W também são obtidas em fractais com D_F entre 2 e 3, onde difusão anômala ($D_W > 2$) também é observada. Sugerimos a aplicação deste método para outros modelos, por exemplo os self-avoiding walks.

- (1) A. Maritan, Phys. Rev. Lett. 62, 2845 (1989)
(2) M. H. Kim, D. H. Yoon e I. Kim, J. Phys. A26, 5655 (1993)
(3) F. D. A. Aarão Reis e R. Riera, Physica A208, 322 (1994)

DISTRIBUIÇÃO DE TAMANHOS DE CAVIDADES EM UM MODELO DE POLÍMEROS NA REDE.

CELIA ANTENEODO
CBPF

FERNANDO DE MAGALHÃES COUTINHO VIEIRA
Instituto de Biofísica - UFRJ

Diversos compostos químicos, incluindo gases e hidrocarbonetos apresentam solubilidade na água menor do que na maioria dos líquidos usuais. Modelos recentes sugerem que tal diferença provém do menor tamanho da molécula de água¹, o que teria como consequência uma maior variação de energia livre para a formação de cavidades necessárias para solubilizar as diversas substâncias. Neste trabalho estudamos um modelo de polímeros lineares de tamanho n com $1 \leq n \leq 10$ em uma rede $L \times L$. Os sítios ocupados constituem o "líquido", os sítios vazios formam as cavidades. A densidade de ocupação de sítios (ρ) é tomada acima do limite de percolação por sítios para tornar possível uma comparação com o comportamento de líquidos. Esta densidade garante, ao mesmo tempo, a não existência de cavidades de tamanho infinito. Investigamos a distribuição de tamanhos de cavidades para diversos valores de ρ . Para o caso de monômeros, $n = 1$, é possível calcular analiticamente a probabilidade de que um dado sítio vazio esteja em uma cavidade de tamanho s . Nossos resultados indicam um aumento no tamanho médio de cavidades com o aumento do tamanho dos polímeros, o que é consistente com as teorias recentes sobre solubilidade na água. Apresentaremos alguns outros resultados cuja relevância maior pode estar ligada ao estudo de polímeros bidimensionais recentemente sintetizados².

- [1] G. L. Pollack, Science, 251 (1991) 1323.
[2] S. I. Stupp, S. Son, H. C. Lin e L. S. Li, Science 259 (1993) 59.

TRANSIÇÃO DE FASE REENTRANTE EM SUSPENSÕES COLOIDAIS CARREGADAS: ESTUDO POR DINÂMICA MOLECULAR.

OSVALDO E. AIÉLLO, JOSÉ P. RINO
UFSCAR

Suspensões coloidais aquosas, eletrostaticamente estáveis, são interessantes devido a possibilidade da formação de várias fases condensadas da matéria meramente pela variação da concentração de impurezas de íons e da concentração de partículas. Recentemente uma transição de fase reentrante foi observada em suspensão aquosa de partículas de poliestireno (Physical Review Letters, 23, vol.60,1988). Até recentemente acreditava-se que a repulsão de Coulomb blindada era responsável pela ordem estrutural e que o potencial DLVO (Derjaguin-Landau-Verwey-Overbeek) poderia descrever as propriedades destes colóides. Simulações de Dinâmica Molecular de suspensões coloidais em meio aquoso, cujas partículas interagem por um potencial de pares efetivo são executadas para elucidar o mecanismo da transição de fase reentrante registrada nestes

sistemas. Os cálculos da função correlação de pares mostra que uma suspensão homogênea fracamente interagente se separa em fases densa e diluída e depois reentra em um estado homogêneo com ordem cristalina ou líquida quando diminuimos a concentração de impurezas. A distribuição de *clusters* indica a existência da fase densa para as concentrações intermediárias de impurezas justamente onde ocorre a separação de fases.

EXPANSÃO EM SÉRIE PARA SAWS EM FRACTAIS REGULARES

FABIO AUGUSTO DA COSTA CARVALHO CHALUB,
ROSANE RIERA

Pontifícia Universidade Católica - Rio de Janeiro, RJ

FABIO DAVID ALVES AARÃO REIS

Universidade Federal Fluminense - Niterói, RJ

O comportamento crítico de self-avoiding walks na classe dos fractais tipo Triângulo de Sierpinski Generalizados é analisado usando a técnica de expansão em série. Tais fractais são caracterizados por um parâmetro de geração b , onde $2 \leq b < \infty$. Quando b cresce sua dimensão fractal D_F aproxima-se de 2, dimensão da rede euclidiana. Demonstra-se que os coeficientes da expansão em série da função geratriz convergem um a um para o valor da rede triangular (euclidiana) quando $b \rightarrow \infty$. A partir da análise destes coeficientes pretendemos concluir sobre a continuidade dos valores dos expoentes críticos ν e γ quando $D_F \rightarrow 2$.

ADSORÇÃO DE CADEIA POLIMÉRICA POR PLANOS PARALELOS

RAIMUNDO NOGUEIRA DA COSTA FILHO, ADRIANO DE OLIVEIRA SOUSA, CARLOS ALBERTO CARNEIRO FEITOSA, ANTÔNIO FERNANDES SIQUEIRA

Universidade Federal do Ceará

O problema de uma ponte (bridging) entre dois planos paralelos formada por uma cadeia polimérica plana é analisado segundo um modelo de crescimento direcional anisotrópico. O modelo inclui aspectos de uma caminhada aleatória (Self Avoiding Walk) que modela o crescimento de uma cadeia polimérica real com interações de exclusão de volume. Cálculos numéricos do número de ligações de cada cadeia e do correspondente raio médio (radius of gyration R_G) exibem uma lei de escala do tipo $N \sim R_G^D$. Os expoentes D , denominados dimensão fractal, obtidos para várias caminhadas mostram uma dependência com as probabilidades de crescimento nas direções x e y . Para cada uma das caminhadas calculamos a "entropia" associada a cadeia resultante. Dois casos foram levados em consideração: a) interação atrativa entre os elos da cadeia-superfície e b) interação repulsiva entre os elos da cadeia-superfície. Os valores de D e o perfil da concentração dos elos da cadeia mostram-se compatíveis com aqueles valores encontrados usualmente na literatura.

Polidisperse Micellar Solution in the Ideal Gas Limit

CARLA GOLDMAN, VERA B. HENRIQUES
IFUSP

We derive thermodynamic properties of a polidisperse solution of micelles. In our treatment, a 2-D description is adopted in which micelles are viewed as bond-states of a certain hamiltonian [1] (P.B.H.) chosen to describe the effect of hydrophobic interactions after integration over solvent is performed. Internal micellar degrees of freedom are then accounted by P.B.H. whereas their external degrees of freedom are accounted by means of an ideal gas approximation within the McMillan-Mayer theory for multicomponent solutions [2].

We use the grand-canonical ensemble and assume chemical equilibrium between the diverse solution components. With these, we obtain that the average number \bar{n}_S of a micellar species of aggregation number S is controlled by a competition between its kinetics and potential contributions to the system partition function in such a way that $\bar{n}_S \simeq S \exp -KS$ with $K > 0$.

Moreover, we observe that the average density of amphiphile that remain unaggregated \bar{n}_1 is linear with respect to the total amphiphile concentration n_{amph} for low n_{amph} and changes its behavior at a certain finite value of $n_{amph} = n_{CMC}$, attaining an asymptotic value n_1^* for high n_{amph} . We derive n_1^* and n_{CMC} as functions of the P.B.H. parameters.

References: [1] - M. Peyrard, A.R. Bishop, Phys. Rev. Lett. 62, 2755 (1989); [2] - see for example, T.L. Hill, "An Introduction to Statistical Thermodynamics", Addison Wesley Publishing Co, Inc (1960).

Método da contagem de caixas na determinação de dimensões fractais: uma aplicação no estudo de bacias hidrográficas

ROBERTO FERNANDES SILVA ANDRADE

Instituto de Física - UFBA

WERNER VON BLOH

Potsdam Institute for Climate Impact Research - Potsdam - Alemanha

Neste trabalho usamos o método de contagem de caixas para analisar bacias hidrográficas em regiões que são assoladas por secas e estiagens. O propósito é o de introduzir um novo parâmetro quantificador para caracterizar a intensidade e os efeitos de estiagens na rede hidrográfica das regiões atingidas. O estudo de bacias hidrográficas identifica três dimensões características D_b, D_e e D_s , ligadas pela relação $D_b = D_e D_s$, onde os símbolos indicam, respectivamente: dimensão da bacia, dimensão da estrutura ramificada e a dimensão de sinuosidade dos ramos da estrutura. O método de contagem de caixas permite apenas a determinação de D_b .

Teóricamente tem-se que $D_b = 2$, já que toda a superfície a terra (considerada bi-dimensional) faz parte da bacia. No entanto para efeitos práticos, os rios são traçados até uma certa escala finita, de forma que $D_b < 2$. Analisamos as bacias do São Francisco, Parnaíba (Piauí), Paraguaçu (Bahia) e Jaguaribe (Ceará). O ponto de partida são os mapas digitalizados do Digital Chart of the World, contendo informações sobre a perenidade dos diversos elementos da bacia. Os resultados mostram que a seca é caracterizada por uma redução de D_b , principalmente no caso do Jaguaribe, onde o valor atingido é típico de D_e . Isto reflete o fato que a bacia fica praticamente reduzida à corrente principal. As outras bacias têm tributários de regiões não atingidas pela estiagem, de forma que D_b ainda reflete uma contribuição de D_e .

Simulação Computacional do processo competitivo das partículas na Eletrodeposição Fractal

FERNANDO LUÍS BARROSO DA SILVA, LUCILA MARQUES DOS REIS

Departamento de Química - Faculdade de Ciências - Unesp - Bauru Instituto de Física "Gleb Wataghin" - Unicamp

AGUINALDO R. DE SOUZA

Departamento de Química - Faculdade de Ciências - Unesp - Bauru Department of Chemistry and Biochemistry - UCSD - San Diego

A eletrodeposição de metais é um dos fenômenos importantes de agregação de partículas com muitas aplicações tecnológicas, como, por exemplo, na obtenção do Zinco e fabricação de baterias. Para simulação destes processos, utilizam-se modelos derivados do desenvolvido por Witten-Sanders para a agregação limitada por difusão (DLA). O principal parâmetro destes é a probabilidade da partícula se agregar ou não a superfície (*Probabilidade de Sticking*), sendo geralmente um valor constante. Neste trabalho, estudamos a competição entre as partículas de metal e calculamos a dimensão fractal do "cluster" obtido. O modelo utilizado é uma modificação do EDF-2 de Silva-Souza-Reis, onde a *probabilidade de sticking* é definida como uma função exponencial decrescente. Neste caso, é introduzida uma modificação: Quando uma partícula se agrega a superfície, todas as outras são descartadas, e um novo conjunto de partículas é randômicamente gerado, reiniciando-se os cálculos. Como resultado, obtemos a dimensão fractal do "cluster" e perfis de densidade.

Fapesp, CNPq e Capes

Multiafinidade de Perfis de Amostras de Papel Rasgado .

ISMAEL LIMA, JOSÉ GUILHERME MOREIRA
UFMG

O perfil de amostras de papel rasgado é um fractal

auto-afim. Em uma estrutura auto-afim a rugosidade w comporta-se como $w \sim \epsilon^\alpha$, onde ϵ é a escala de comprimento e α o expoente da rugosidade. Kertész *et al* [1] estudaram o perfil em amostras de vários tipos de papel e obtiveram um expoente da rugosidade α no intervalo de 0.63-0.72.

Recentemente o conceito de multiafinidade [2] tem sido aplicado para a análise de perfis auto-afins, com o objetivo de dar uma descrição mais completa da superfície fractal. O termo multifractalidade expressa o fato que pontos correspondentes a um dado tipo de distribuição formam um subconjunto fractal, cuja dimensão depende do momento da distribuição. A propriedade de multiafinidade de uma função auto-afim $h(x)$ pode ser investigado calculando-se a q -ésima ordem da função de correlação definida por

$$C_q(\epsilon) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [h(x_i) - h(x_i + \epsilon)]^q \sim k^{q\alpha_q},$$

onde ϵ é a escala, q é o momento da distribuição e α_q é o expoente que varia com q .

Neste trabalho nós vamos utilizar amostras de papel submetidas a uma tensão uniaxial até a ruptura com velocidade de deformação constante. Nosso objetivo é estudar o caráter multiafim nos perfis de fratura, ou seja, verificar como o expoente α_q varia com q .

[1] J. Kertész, V. K. Horváth e F. Weber, *Fractals*, 1 67 (1993).

[2] A. L. Barabási e T. Vicsek, *Phys. Rev. A* 44, 2730 (1991).

COEFICIENTE DE DIFUSÃO DE ATOMOS ADSORVIDOS

MAURÍCIO RIBEIRO BALDAN
INPE

LIAO YUAN CHEN

Univ. of Texas San Antonio

SEE CHEN YING

Brown University - Providence

Nós fizemos uma simulação numérica (Dinâmica Molecular) para investigarmos o coeficiente de difusão através de um sistema descrito por um potencial em duas dimensões, onde o movimento vibracional normal a superfície não é incluído. Através do cálculo da função de auto-correlação velocidade-velocidade, podemos observar que quando a temperatura é abaixada o comportamento do coeficiente de difusão varia de forma, indo de um movimento Browniano para a forma de Arrhenius, nós ainda verificamos que quando variamos o coeficiente de atrito a baixas temperaturas, o coeficiente de difusão muda de regime indo de um regime de múltiplos-saltos passando pelo regime de transição de estado até chegar ao regime de alto coeficiente de atrito.

RAIO QUADRÁTICO MÉDIO DE POLÍMEROS NA REDE DE BETHE.

JÜRGEN F. STILCK

UFSC

CLAUDETTE E. CORDEIRO

UFF

Calculamos exatamente o raio quadrático médio $\langle R^2 \rangle$ de polímeros semi-flexíveis com N passos inscritos numa rede de Bethe com coordenação par $q = 2d$. Para podermos definir a distância entre dois pontos da rede, imaginamos que a mesma esteja inscrita numa rede hipercúbica de tal forma que uma ligação que seja ortogonal a outra da geração anterior será também perpendicular a todas as ligações situadas em gerações anteriores da rede de Bethe. No limite termodinâmico, tal definição implica que a dimensionalidade dessa rede hipercúbica será infinita. Uma fugacidade z é associada a cada dobra no polímero. No limite rígido ($N \rightarrow \infty, z \rightarrow 0, Nz = \text{const.}$), o raio quadrático médio apresenta a forma de escala esperada $\langle R^2 \rangle \simeq N^{2\nu_r} F(zN^\psi)$, com expoentes clássicos $\nu_r = 1$ e $\psi = 1$. Observamos que a expressão que encontramos para $\langle R^2 \rangle$ é idêntica à obtida para caminhadas aleatórias numa rede hipercúbica em d dimensões sem retorno imediato a partir de uma expressão geral para o raio quadrático médio de polímeros semi-flexíveis devida a Flory. No momento, estamos procurando entender o cálculo para polímeros ramificados.

MODELO DE CAMPO MÉDIO PARA SUPERFÍCIES COM VÍNCULOS AMASSADAS AXIALMENTE

VIVIANE MORAES DE OLIVEIRA MARCELO

ANDRADE DE FILGUEIRAS GOMES

Universidade Federal de Pernambuco

VALDEMIRO DA PAZ BRITO

Universidade Federal do Piauí

A física estatística de superfícies amassadas em processos de não-equilíbrio possui grande interesse intrínseco e também devido à sua conexão com as propriedades conformacionais de membranas, vesículas, polímeros bidimensionais e modelos de crescimento. Podemos descrever a geometria de uma superfície aleatória de topologia arbitrária a partir de dois expoentes d_s e d_v , definidos por $S \sim R^{d_s}$ e $V \sim R^{d_v}$, onde S , V e R são a área da superfície, o volume englobado pela mesma e o raio de giração.

Neste trabalho, examina-se o comportamento crítico de copos de pvc e de latas amassados através da aplicação de uma deformação axial δ . Nosso objetivo foi o de encontrar os expoentes d_s , d_v , γ e β definidos por $S \sim R^{d_s}$, $v \sim R^{d_v}$, $v \sim V^\gamma$ e $(v/V) \sim (1 - \delta)^\beta$, onde V e v são, respectivamente, o volume máximo de líquido contido pela superfície aberta, e o correspondente volume após a deformação. S e R são as quan-

tidades definidas no parágrafo anterior. O comportamento crítico destas superfícies é comparado com o de outros sistemas como vesículas fluidas, poliméricas e membranas.

Desenvolvemos um modelo de campo médio desses processos de amassamento a partir do qual derivamos o expoente β obtido experimentalmente. Encontramos ainda, a partir deste modelo, a dimensão fractal das superfícies sujeitas a esse tipo de processo.

O "Box-Counting" como um Problema de Fragmentação

KATHIA MARIANE FEHSENFELD, MARCELO

ANDRADE DE FILGUEIRAS GOMES

UFPE

TSANG ING JYH

Univ. da Antuérpia - Belgica

O "box-counting" é um algoritmo para o cálculo da dimensão fractal de um conjunto baseado na sua cobertura com caixas d -dimensionais de tamanho ϵ . Em geral o menor número, $B(\epsilon)$, de caixas de tamanho ϵ necessárias para cobrir o conjunto escala como $B(\epsilon) \epsilon^{-D}$, onde D é a sua dimensão fractal.

Neste trabalho o "box-counting" é estudado de uma nova forma como um problema de fragmentação. Aplicamos esse método para um conjunto de pontos não-correlacionados sobre uma rede bidimensional (tamanho $L \times L$) com probabilidade p . Este processo é caracterizado por funções estatísticas como o número de fragmentos $N(\epsilon)$ e a diversidade, $\Delta(\epsilon)$, que obedecem a relação $\Delta(\epsilon) \leq N(\epsilon) \leq B(\epsilon) \leq M_0 = pL^2$. A lei de escala para $B(\epsilon)$ inicia-se em $\epsilon \approx p^{-1/2}$ e os máximos de diversidade ocorrem quando $\epsilon \approx (2p)^{-1/2}$. A relação $\Delta_{max} \sim (N_{max})^{1/2}$, encontrada em outros modelos de fragmentação, é válida somente para baixas probabilidades de ocupação. Com o aumento de p surgem oscilações em Δ_{max} e aparecem valores críticos p_n onde esta função passa por máximos e mínimos locais que estão ligados assintoticamente ($n \rightarrow \infty$) com o número de Feigenbaum, $\delta = 4.6692\dots$

MONTE CARLO SIMULATION FOR CHAINS: A FAST ALGORITHM

MARCO ANTONIO ALVES DA SILVA, ANTONIO CALIRI

FCFRP-USP

We show in this work that a set of eight unitary spatial vectors, are sufficient to build every polymer backbone constituted by atoms of carbon with single covalent bonding between them. Four vectors are reflections of the others, and the rule to construct the chain is the following: in each step is generated one vector, and the next has only three possibilities to be placed. The new vector never will be the reflection of the first. The construction is performed adding the vectors that appear in each step. With these vectors we easily construct

all possible configurations of small polymers, as fifteen monomers. Therefore all relevant thermodynamic quantities and excluded volume became exactly calculated. For long chains we use Monte Carlo simulation with enhanced performance.

CLASSES DE MOVIMENTOS EM SIMULAÇÃO MONTE CARLO DE POLÍMEROS LINEARES

ANTONIO CALIRI, MARCO ANTONIO ALVES DA SILVA
FCFRP-USP

Configurações de polímeros lineares, formado por carbonos sp^3 (como polistireno: $\dots -CH_2-CH_2-CH_2-\dots$), podem ser obtidas pela sucessão de 4 vetores linearmente independentes, mais o negativo de cada um deles. Esses vetores são, vetores tipo p : $r_1 = (0, 0, -1)$; $r_2 = (\sqrt{2}/3, \sqrt{6}/3, 1/3)$; $r_3 = (-2\sqrt{2}/3, 0, 1/3)$; $r_4 = (\sqrt{2}/3, -\sqrt{6}/3, 1/3)$; e mais os vetores tipo n : $-r_1$; $-r_2$; $-r_3$; e $-r_4$ (normalizados e com a direção de r_1 é arbitrária). Qualquer combinação de N desses vetores pode ser utilizada na construção das configurações de um polímero de $N + 1$ monômeros, com a seguinte restrição: os vetores devem ser escolhidos alternativamente, entre os tipos p e n , e para qualquer i , o vetor $-r_i$ não pode suceder ou preceder o vetor r_i . Fixando-se no espaço dois monômeros ao longo da cadeia, digamos, monômeros i e $i + \delta$, podemos facilmente descrever todos os possíveis *caminhos*, ou seja, seqüência de vetores que ligam os monômeros i e $i + \delta$. Desta forma podemos definir, em um referencial específico, todas as classes de movimentos de uma cadeia polimérica, para diferentes δ . Estas classes são importantes na simulação Monte Carlo dinâmica, na qual procura-se *mimicar* os possíveis movimentos reais de um polímero em solução. Adicionalmente mostramos, de forma genérica, a vantagem computacional (tempo de CPU) do nosso método em relação à técnica tradicional, que na *montagem* das configurações, utiliza o produto de matrizes na determinação dos ângulos diretores.

COMPETITION OF DIFFUSIVE PARTICLES

SAMUEL RODRIGUES GOMES JR, LIACIR DOS SANTOS LUCENA, LUCIANO RODRIGUES DA SILVA
UFRN

H. J. HILLHORST

LPTHE - Université de Paris XI - Orsay

We investigate effects caused by the competition between two random walkers in one dimension. Our purpose is to study the properties of the interfaces between the phases which are dominated by different species of walkers. We follow a simple rule: in an one-dimensional lattice with periodic boundary conditions we put the two walkers diametrically separated. Each time step one of walkers goes to a new site. If that site was never visited before, then it gets the characteristics (for exam-

ple, the site color) of the first visitor, in an irreversible way. The equilibrium state is achieved when all the lattice sites are visited at least once by one of walkers. Two-dimensional simulations we have done show that the majority of interfaces occurs in the initial period of the diffusion process. Another feature observed reveals that the number of interfaces increases when decreases the initial separation between the independent random walkers.

LOCALIZAÇÃO DE ANDERSON EM CAMINHADAS ALEATÓRIAS FINITAS

CARLOS ALBERTO CARNEIRO FEITOSA, ADRIANO DE OLIVEIRA SOUSA, RAIMUNDO NOGUEIRA DA COSTA FILHO, ANTÔNIO FERNANDES SIQUEIRA
Universidade Federal do Ceará

Neste trabalho consideramos caminhadas aleatórias sobre redes quadradas isotrópicas. Com base nestas condições impomos que as caminhadas se iniciem em qualquer ponto de uma parede da rede previamente definida. Como sabemos que para uma rede isotrópica uma caminhada com um número muito grande de passos fornece um deslocamento médio nulo, é mais provável que nestas condições a caminhada termine na sua posição inicial ou na parede de saída, que é o nosso caso. Devido a estas características, fazemos uma analogia com a localização fraca de Anderson. Em cada realização estudamos as caminhadas que retornam à parede de origem, não importando a trajetória. O número de passos das caminhadas é estudado, levando em consideração sua dispersão e alterações "estruturais" devido a alguma modificação das propriedades da rede, tais como: seu tamanho; presença e concentração de impurezas; presença de centros atrativos e ou repulsivos.

COMPORTAMENTO TERMODINÂMICO DE POLÍMEROS RAMIFICADOS NA REDE QUADRADA

KLEBER DAUM MACHADO, JÜRGEN FRITZ STILCK
UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA

Nós estamos interessados em obter o diagrama de fases para o modelo de polímeros com cruzamentos na rede quadrada. Admitimos sítios com coordenação 2 e 4 e eles têm atividades x e y respectivamente. Para obter o diagrama de fases do modelo, utilizamos a técnica de *finite-size scaling* associada com a idéia básica do grupo de renormalização fenomenológica (RF) para tiras de comprimento infinito e largura L . Como se sabe, essa hipótese consiste em assumir que na criticidade a razão entre os comprimentos de correlação ξ de dois sistemas finitos com larguras L e L' é igual à razão entre estas larguras ($\xi_L/\xi_{L'} = L/L'$). Assim, podemos estudar a tira de largura L através da aplicação sucessiva de uma matriz de transferência cujos elementos

são polinômios em x e y . Os dois maiores autovalores desta matriz estão relacionados com ξ e o que temos que fazer é procurar a região onde a condição da RF se verifica. Para a rede de Husimi, já foi obtido um diagrama de fases por Banchio e Serra[1], o qual apresentou um ponto tricrítico e um ponto crítico terminal. No nosso caso, estamos ainda iniciando os cálculos com larguras pequenas, não tendo um diagrama de fases totalmente definido. Os cálculos preliminares indicam a existência de três fases no diagrama: não polimerizada, polimerizada linear e polimerizada ramificada. A transição entre as duas primeiras fases é sempre de segunda ordem, mas a natureza do(s) ponto(s) multicrítico(s) que envolve(m) a terceira fase ainda não foi esclarecida.[1] Branched Polymers on Bethe and Husimi Lattices; A.J. Banchio, P. Serra - a ser publicado (1995).

POLÍMEROS RAMIFICADOS EM REDE TRIANGULAR

TÉRCIO DE LIMA SILVA, JOÃO MEDEIROS DE ARAÚJO, LIACIR DOS SANTOS LUCENA, LUCIANO RODRIGUES DA SILVA
UFRN

Nesse trabalho fazemos a simulação do crescimento de polímeros ramificados numa rede triangular com desordem. A desordem consiste de impurezas espalhadas aleatoriamente na rede. Lucena et al (PRL 72, 230 (1994)) trataram este problema na rede quadrada. Nosso objetivo é determinar com boa precisão o diagrama de fases e os expoentes críticos associados à fronteira crítica do diagrama. Este diagrama apresenta duas fases: a fase de crescimento finito e a fase de crescimento infinito quando o polímero, apesar do efeito de volume excluído e das impurezas, cresce indefinidamente. Nós calculamos os expoentes d_{min} , dimensão fractal do caminho mínimo entre dois pontos do aglomerado, d_f , dimensão fractal associada à distância química, e o expoente τ que caracteriza a distribuição de aglomerados de um certo tamanho. Com base nesses valores determinamos a classe de universalidade dos polímeros ramificados críticos.

Sistemas Complexos e Dinâmicos (EST) - 09/06/95

Criticalidade Auto Organizada em Regimes Pluviométricos

ROBERTO FERNANDES SILVA ANDRADE
Instituto de Física - UFBA
ALBERTO BRUM NOVAES, FRANCISCO CARLOS PATARO DE QUEIROZ
Instituto de Física e Programa de Pós-Graduação e

Pesquisa em Geofísica - UFBA

HANS-JOACHIM SCHELLNHUBER

Potsdam Institute for Climate Impact Research - Potsdam
- Alemanha

Investigamos a possível utilização do conceito de Criticalidade Auto Organizada (CAO) em regimes pluviométricos. Este conceito sido usado com sucesso na análise de avalanches em montes de areia e também em avalanches de água, isto é, no escoamento de gotas em superfícies sólidas planas e côncavas. Este último aspecto serve de motivação para o nosso trabalho, concebido a partir da identificação do fenômeno de precipitação como avalanches de água. Nosso trabalho é baseado na análise de registros de mais de 50 estações meteorológicas em diversas partes do mundo, com particular ênfase no nordeste brasileiro. Para cada uma delas determinamos a frequência relativa de três quantidades: i) quantidade diária de chuva; ii) intervalo de dias sem chuva; iii) intervalo de dias chuvosos contíguos. Fazemos a estatística do número de ocorrências em função de sua intensidade, medida em quantidade de chuva (em mm) ou valor do intervalo (em dias). Para todos os casos verificamos um decaimento hiperbólico (uni ou bi-modal), o que é uma condição necessária para a caracterização da CAO. Diferentes situações climáticas são claramente reveladas pelos expoentes que controlam o decaimento nos três tipos de estatística. Estudo de modelos simples procuram comprovar a pertinência deste conceito no fenômeno de precipitação.

NEW STUDIES OF THE BSP CELLULAR AUTOMATA - A HIGH-DIMENSIONAL SHAPE-SPACE MODEL FOR IMMUNE SYSTEM.

RITA MARIA ZORZENON DOS SANTOS
UFF
AMÉRICO TRISTÃO BERNARDES
UFOP

In the De Boer-Segel-Perelson (BSP) shape-space model to study the development of the B cells and antibodies repertoire, two receptors interact if they have complementary shapes. The interaction is maximum whenever the spatial coordinates (shape-space) are opposite and decays according to a Gaussian distribution for less complementary shapes. However the dimension of this space should be larger than 2 (used in BSP model), since each dimension represents an aspect involved in the idiotypic/anti-idiotypic interaction. Stauffer and Weisbuch (1992) have introduced a simplified version of the BSP model replacing the Gaussian interaction by nearest-neighbor interactions and B-cells concentrations are restricted to only 3 values representing: virgin ($B = 0$), suppressed ($B = 1$) and immune ($B = 2$) states. The automaton rule defines a window of activation for the sites depending on the number of $B = 2$ nearest-neighbors. This idea is based on the

function used to describe the proliferation of idiotypic clones, for which the definition of the activation threshold is crucial in order to generate the appropriate immune responses. Starting with a symmetric initial configuration (in $B = 0$ and $B = 2$), for $d \leq 3$ the system always evolves to stationary states, but for $d \geq 4$ there is a transition at a critical concentration of $B = 1$. For $x < x_c$ the systems always evolves to stationary states and for $x > x_c$ it ends up in a "chaotic" state, considered unrealistic from the immunological point of view. In this work we investigate the role of the activation threshold in the SW model. We show that periodic/"chaotic" transition is always present for $d \geq 2$, but for some conditions it disappears leading the system to exhibit only the stationary behavior. We also analyse the influence of the initial configuration type on the behavior of the system. All the simulations were performed in dimensions varying from 2 to 10.

**AUTÔMATO CELULAR PROBABILÍSTICO
PARA SISTEMA IMUNOLÓGICO :
ANÁLISE DE CAMPO MÉDIO.**

TÂNIA TOMÉ, J. R. DRUGOWICH
USP

Um sistema imunológico celular é descrito através de um autômato celular probabilístico. O modelo é definido numa rede regular e as regras de evolução do autômato simulam interações entre células biológicas sob condições de infecção parasítica. Cada sítio da rede pode estar em três estados correspondentes à ocupação do sítio por um entre três tipos de células biológicas. O sistema evolui no tempo de acordo com regras locais estocásticas até atingir estado estacionário. Construímos as equações de evolução estocástica para as densidades de cada tipo de células e as analisamos através de aproximação de campo médio dinâmica. A diferença entre as densidades de dois tipos de células determina a resposta imunológica do sistema: resistência a um dado parasita ou susceptibilidade a um dado parasita. Nossas análises mostram que o modelo apresenta transição de uma fase desordenada (respostas imunológicas com igual probabilidade) para uma fase ordenada (respostas imunológicas diferenciadas). A transição ocorre quando o parâmetro do modelo associado à taxa de infecção assume um valor crítico.

**Autômato Celular de Brass et al. para Sistema
Imunológico**

J. R. DRUGOWICH DE FELÍCIO
IFSC e Fac. de Filosofia, Ciências e Letras, Rib.
Preto-USP
TÂNIA TOMÉ
Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Investigamos um autômato celular definido em uma rede regular em D dimensões ($D = 1, 2$ ou 3), que se

propõe a explicar a polarização das células T-helper em nodos linfáticos. A predominância de células T_{H1} (ou T_{H2}) está associada à resistência ou susceptibilidade de ratos frente a infecções por parasitas (Leishmaníase, Toxoplasmose, etc.). No modelo, cada sítio da rede pode estar em um dos tres estados correspondentes às células do tipo 0 (antes de ser apresentada ao antígeno) 1 ou 2 (depois). A diferença entre as concentrações das células do tipo T1 e T2 ao final do processo, determina se o animal será imune ou sensível a determinado parasita. Nossa análise numérica mostra que a partir de $D = 2$, já ocorre transição de uma fase desordenada (concentrações iguais de células T1 e T2) para uma fase ordenada onde uma delas predomina. A transição pode ser sintonizada variando-se a taxa de infecção.

**FINITE SIZE SCALING DYNAMICAL
RENORMALIZATION GROUP**

MOZART S. SOARES

PUCMG

F. CÉSAR SÁ BARRETO, JAFFERSON KAMPHORST L.
SILVA
UFMG

A dynamical renormalization group approach based only on the finite size scaling hypothesis, with no further assumptions, is presented. Its main idea is to construct particular quantities scaling as L^0 in the thermodynamic limit $L \rightarrow \infty$, L being the linear size of the system. It is applied to obtain the critical dynamical behaviour of the two- and three-dimensional ferromagnetic Ising model, subjected to Glauber dynamics. We obtain the dynamical exponents $z = 2.12 \pm 0.01$ for $d = 2$ and $z = 1.96 \pm 0.05$ for $d = 3$.

**Algoritmos de cluster para simulações
numéricas do Modelo BEG**

MAURICIO BORGES BOUABCI, CARLOS EUGENIO
IMBASSAHY CARNEIRO
USP

O Modelo BEG é definido pela seguinte Hamiltoniana:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - K \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2 + \Delta \sum_i S_i^2 \quad S_i = \pm 1, 0,$$

onde as duas primeiras somatórias são sobre primeiros vizinhos e $J > 0$. Dependendo da razão K/J , diversos diagramas de fases podem ocorrer. De acordo com resultados de campo médio, enquanto a razão K/J for maior do que -1 , ocorrem fases ferromagnéticas e paramagnéticas, separadas por linhas de transição de 1ª e 2ª ordens. Quando a razão fica menor do que este valor, podem ocorrer fases ferrimagnéticas e antitetrupolares. O objetivo deste trabalho é estudar

as transições entre estas fases através de simulações de Monte Carlo, utilizando algoritmos de cluster. O algoritmo que desenvolvemos para o Modelo BEG reduz o problema da desaceleração crítica em transições de 2ª ordem de forma comparável ao algoritmo de Wolff para o Modelo de Ising. Além disto, verificamos também que o algoritmo pode ser utilizado para eliminar efeitos de histerese em transições de 1ª ordem. Com isto, a precisão dos nossos resultados aumenta muito, permitindo-nos uma determinação precisa dos diagramas de fases e um estudo mais cuidadoso dos pontos multicríticos. Acreditamos também que os clusters formados com este algoritmo têm um significado físico, podendo nos ajudar a entender e caracterizar as diferentes fases.

PROPAGAÇÃO DE DANOS E TRANSIÇÕES DE PRIMEIRA ORDEM NO MODELO DE ISING 3D COM CAMPO ALEATÓRIO

HEBER RIBEIRO DA CRUZ, URIEL MEDEIROS DE SOUZA COSTA
UFAL

Estudando-se a propagação de danos no modelo BEG, observou-se que quando havia uma transição de primeira ordem a curva da distância de Hamming versus temperatura era suave enquanto que na transição de segunda ordem a curva era abrupta. O estudo do modelo de Potts, que também apresenta transição de primeira e segunda ordens, no entanto, não revelou o mesmo comportamento. Aqui estudamos o modelo de Ising em 3 dimensões, com campo aleatório para tentar determinar a relação entre a forma da curva da distância de Hamming e a ordem da transição.

PROPAGAÇÃO DE DANOS NO MODELO DE HEISENBERG FERROMAGNÉTICO QUÂNTICO $S=1/2$

URIEL MEDEIROS DE SOUZA COSTA
UFAL

IGOR ROJDESTVENSKI
University of Western Ontario - Canada

Sugerimos uma nova ferramenta para investigar o processo do ordenamento ferromagnético no modelo de Heisenberg Quântico. Nós introduzimos a técnica de propagação de danos baseada no método Monte Carlo de Handscomb e a aplicamos ao modelo tri-dimensional de Heisenberg na rede cúbica simples. Estudamos a dependência térmica da "distância de Hamming gráfica" e discutimos as propriedades desta dependência com relação às outras funções termodinâmicas do modelo.

Sistemas Complexos Desordenados e Propriedades Termodinâmicas (EST) - 09/06/95

PERCOLAÇÃO INVASIVA COM CORRELAÇÃO

DANIEL FELINTO PIRES BARBOSA, FRANCISCO GEORGE BRADY MOREIRA
UFPE

Percolação invasiva é um processo dinâmico de crescimento de um único aglomerado através de sítios de menor resistência. Em sua forma mais simples, quando não há armadilhas, a relação existente entre este tipo de percolação e a percolação (estática) de sítios usual tem permitido a determinação precisa de expoentes e concentrações críticas de percolação em vários tipos de redes. Neste trabalho propomos a inclusão de correlações no problema de percolação invasiva de modo a relacioná-lo com a percolação de sítios com correlação, exatamente como nos casos usuais quando não há correlação. Nossa proposta é testada no caso do modelo de percolação correlacionada [de Aguiar, Brady Moreira e Engelsberg, Phys. Rev., B 33, 652, (1986)]. Resultados para a concentração crítica de percolação e a dimensão fractal do aglomerado são obtidos e concordam bem com os resultados calculados por outras técnicas. Discutimos ainda a aplicação do algoritmo para incluir outros tipos de correlação.

Interações competitivas em modelos de spins: efeitos da aperiodicidade

ROBERTO FERNANDES SILVA ANDRADE
Instituto de Física - UFBA

SÍLVIO ROBERTO SALINAS, MÁRIO TAMASHIRO
Instituto de Física - USP

Estamos desenvolvendo um programa de investigação dos efeitos de vários tipos de desordem (campos aleatórios, impurezas substitucionais, desordem nas ligações) sobre a estabilidade das fases moduladas de modelos de Ising com interações competitivas. O diagrama de fases na presença de um campo aleatório de um análogo do modelo ANNNI ("axial next-nearest-neighbor Ising model") na rede de Bethe apresenta um comportamento muito rico e complexo, que já prenunciava os efeitos drásticos dos elementos de desordem. Num trabalho paralelo, simulamos os efeitos da desordem através de uma estrutura fractal subjacente. Consideramos modelos de Ising com interações ferromagnéticas entre primeiros vizinhos e interações anti-ferromagnéticas entre segundos vizinhos ao longo de um dos eixos cristalinos. Além disto, consideramos uma estrutura fractal típica ao longo deste eixo, introduzindo

interações adicionais entre segundos vizinhos separados pelos "bicos" de uma curva de Koch. No caso de um modelo unidimensional, obtemos alguns resultados através da utilização de uma técnica de matrizes de transferência, adaptada à curva de Koch. Também estudamos as linhas paramagnéticas e a estabilidade do ponto de Lifshitz de um modelo mais interessante, definido sobre uma rede de Bethe de coordenação infinita. Neste último caso estamos tentando caracterizar as regiões moduladas do diagrama de fases (com as possíveis fases caóticas) através de uma técnica de aproximações sucessivas.

FRACTAL TO EUCLIDEAN CROSSOVER OF THE THERMODYNAMIC PROPERTIES OF THE ISING MODEL

BORKO STOŠIĆ

Departamento de Física - UFPE

TATIJANA STOŠIĆ

Vonca Institute for Nuclear Sciences, Belgrade, Yugoslavia

We develop a diagrammatic technique for determining the exact recursive relations for the Ising Model in a field, situated on finitely ramified deterministic fractal lattices. This procedure is equivalent to the real space renormalisation group (RG) spin decimation technique, but is more easily computerised. We first consider the Ising model on the Sierpiński gasket type of fractal lattices, with generators of side length b . We recover the known real space RG results for $b = 2$, $H \neq 0$, and $b = 3$ when $H = 0$, and obtain new results up to $b = 15$, for $H = 0$, and up to $b = 8$ for $H \neq 0$. We next consider the Ising model on the Checkerboard fractal family, and obtain exact results for the first two members (with generator length $b = 3$ and $b = 5$). Finally, we study the fractal lattice recently proposed for modelling the Diffusion Limited Aggregation. In all the studied cases we determine the temperature dependence of specific heat and susceptibility, and compare these functions with the known results for the corresponding underlying Euclidean lattices. This comparison demonstrates the difference between the standard thermodynamic limit and the Fractal to Euclidean crossover behavior.

FRATURAS EM UMA DIMENSÃO: EXISTE UMA SOLUÇÃO TRIVIAL?

FERNANDO ALBUQUERQUE DE OLIVEIRA

CIFMC-UnB

Através de simulação extensiva obtivemos resultados surpreendentes para a dinâmica de quebra de uma cadeia¹. Por exemplo, uma energia de ativação menor do que o mínimo permitido, e um tempo de quebra excessivamente longo, 300 vezes maior do que o predito por uma teoria de reações. Demonstramos que modelos mais elaborados são necessários para ex-

plicar toda diversidade de resultados observados² na dinâmica de quebra. Por outro lado, é um fenômeno conhecido em metalurgia, que fios finos de ferro podem permanecer em uma situação de equilíbrio metaestável, por um tempo bastante longo, até evoluir para uma situação de equilíbrio estável (delayed fracture). Nós estabelecemos² alguns elementos para uma teoria de reações em cadeias longas, e discutimos as modificações necessárias quando a complexidade da cadeia aumenta.

1- F. A. Oliveira and P. L. Taylor. *J. Chem. Phys.* 101, 10118 (1994).

2- F. A. Oliveira. To be published.

PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS E ELÁSTICAS DA FASE DE ALTA TEMPERATURA DO FULERENO C₆₀

VIATCHESLAV IVANOVITCH ZUBOV, NIKOLAI PAVLOVITCH TRETIAKOV, ÁLVARO DE ALMEIDA CAPARICA

UFG

JESUS FELIX SANCHEZ

Universidade Russa da Amizade dos Povos

Calculamos propriedades termodinâmicas e elásticas da fase sólida do fulereno C₆₀ com rede cúbica de faces centradas, que ocorre quando $T \geq 260$ K, em função da temperatura. O presente trabalho é a continuidade do trabalho [1], onde a distância interatômica, a densidade, a energia de ligação e o coeficiente de dilatação térmica foram calculados. Agora apresentamos o conjunto completo das propriedades termodinâmicas e elásticas do fulereno, que inclui, além das propriedades acima mencionadas, as capacidades térmicas C_p e C_v , os módulos de elasticidade B_T e B_S , o parâmetro de Gruneisen, os componentes dos tensores elásticos $C_{\alpha\beta}^T$ e $C_{\alpha\beta}^S$ e as velocidades do som. Nos cálculos das capacidades térmicas, os graus de liberdade vibracionais intramoleculares são considerados. Os potenciais intermoleculares de Girifalco [2] e Yakub [1] são utilizados. Os dois potenciais dão resultados muito próximos, excepto na vizinhança da temperatura de perda da estabilidade termodinâmica ($T \approx 1900$ K). Notamos a boa concordância com dados experimentais. O papel essencial da anarmonicidade no fulereno sólido é confirmado. Os valores grandes do parâmetro de Gruneisen são a consequência das interações intermoleculares de curto alcance. À temperatura de perda da estabilidade termodinâmica, o módulo isotérmico de elasticidade B_T anula-se. Diferentemente dos cristais de Van-der-Waals comuns, notamos o decréscimo drástico de C_{44} próximo desta temperatura. Apoio financeiro: CNPq. 1. V.I. Zubov, N.P. Tretiaikov et al, *Phys. Lett.* A194, 223 (1994). 2. L.A. Girifalco, *J. Phys. Chem.* 96, 958(1992).

**SOBRE A DEPENDÊNCIA DAS
PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DE
CRISTAIS EM RELAÇÃO À DIMENSÃO E
AO TIPO DA REDE**

VIATCHESLAV IVANOVITCH ZUBOV
UFG

IGOR VIATCHESLAVOVITCH MAMONTOV
Univers. Russa da Amizade dos Povos

O método correlativo do campo autoconsistente não simetrizado permite incluir na aproximação zero a contribuição básica dos principais termos anarmônicos. A teoria das perturbações é utilizada para tornar mais precisas estas contribuições, bem como para levar em conta anarmonicidades de ordens superiores. As propriedades termodinâmicas de cristais altamente simétricos com anarmonicidade forte até a quarta ordem se expressam através da solução da equação transcendental [1,2]

$$\beta = \frac{nx D_{-(n+1)/2} [x + (n+2)\beta/2nx]}{D_{-n/2} [x + (n+2)\beta/2nx]}$$

onde n é a dimensão espacial, D_ν são funções do cilindro parabólico e x é uma combinação adimensional da temperatura e dos coeficientes de força de segunda e quarta ordens, os quais dependem de n e do número de coordenação z . Fica assim estabelecida a dependência das propriedades termodinâmicas na aproximação zero, assim como nas suas correções, da dimensão e do tipo da rede. Esta dependência foi estudada detalhadamente para o caso de anarmonicidade fraca. Verificou-se que a precisão do método aumenta com o crescimento da dimensão e da densidade do empacotamento. As grandezas relativas das correções, por exemplo, decrescem como n/z . Apoio financeiro (V.I.Z.): CNPq.

1. V.I.Zubov, Ann.Phys.(Leipzig)24,31(1974).

2. V.I.Zubov, I.V.Mamontov and N.P.Tretiakov, Int.J.Mod.Phys.B6,197(1992).

Sistemas Desordenados (EST) - 09/06/95

**Nucleation and Growth in model for
microemulsion**

ALEXANDRE DIEHL, MARCIA C. BARBOSA
UFRGS

We analyze a lattice model for microemulsions. The model is equivalent to an Ising model with competing interactions. The phase-diagram exhibits five possible phases: a water-rich phase, a oil-rich phase, a disordered fluid phase, structured disordered fluid (microemulsion) phase and a modulated phase. We study the transition between the microemulsion phase and the modulated phase by means of Renormalization-group

up to second-order in $\epsilon = 4 - d$ expansion. We check that, even if the mean-field results indicate that this transition is continuous, given that the physical parameters are out of the domain of attraction of the stable fixed point, the transition should be first-order. Then, we analyze the phenomenon of induction of first-order transitions. We show that although the local densities of the original free energy functional of the system indicates a continuous transition, the interaction of fluctuations give rise to a new functional form that, in accordance with the Landau theory, has indeed a first-order transition. The process of nucleation leads to many different types of droplets. A dynamic mechanism for the droplets growth is proposed and checked by means of simulations.

**PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DO
MODELO DE ASHKIN-TELLER COM
ALCANCE INFINITO EM CAMPO
MAGNÉTICO ALEATÓRIO.**

LUIZ ANTÔNIO BASTOS BERNARDES
Univ. Estad. de Ponta Grossa - PR
SYLVIO GOULART ROSA JR
Instituto de Física de São Carlos

Estudamos o modelo de Ashkin-Teller com alcance infinito na presença de campo magnético aleatório com distribuição gaussiana. O diagrama de fases e a ordem das transições foram determinados a partir da análise da estabilidade das soluções que minimizam o funcional da energia livre e das expansões das soluções nas fases paramagnética e de Ising. As equações para as magnetizações, o calor específico e as suscetibilidades foram analisadas e resolvidas numericamente para valores especiais das interações de acoplamento.

**Propriedades Críticas do Vidro de Spin de
Ising Bidimensional com Campo Transverso.**

BEATRIZ BOECHAT, RAIMUNDO R. DOS SANTOS,
MUCIO A. CONTINENTINO
UFF

O diagrama de fases do vidro de spin com campo transverso foi obtido recentemente usando grupo de renormalização no espaço real ^a. O diagrama obtido apresenta uma boa concordância com os resultados experimentais conhecidos. Em temperatura finita o campo transverso causa apenas um deslocamento na temperatura crítica, sem alterar a classe de universalidade que continua a mesma do sistema clássico. Por outro lado, em temperatura zero o sistema sofre uma transição de fase quântica. Desenvolvemos em seguida uma teoria de escala nas vizinhanças deste ponto fixo de temperatura zero e encontramos que a transição permanece de segunda ordem, de mesma forma que a transição térmica ^b. Devido ao grande interesse que a transição quântica

deste sistema tem atraído, temos por objetivo neste trabalho calcular os expoentes críticos e obter um mapeamento completo do diagrama de fases do vidro de spin quântico bidimensional. Para isso iremos incluir competição ferromagnética e trabalharemos diretamente em temperatura zero.

^aBeatriz Boechat, Raimundo R. do Santos e Mucio A. Continentino, Phys. Rev. B 49 R6404, 1994

^bMucio A. Continentino, Beatriz Boechat e Raimundo R. dos Santos, *accito* no Phys. Rev. B

SIMULAÇÕES NUMÉRICAS DO MODELO DE BLUME CAPEL COM UM CAMPO CRISTALINO ALEATÓRIO

MARIA ELISA SARRAF BORELLI, CARLOS EUGÊNIO
IMBASSAHY CARNEIRO
USP

O modelo de Blume Capel com um campo cristalino aleatório (BCCCA) é descrito pela hamiltoniana

$$H = -J \sum_{ij} S_i S_j + \sum_i \Delta_i S_i,$$

onde a primeira somatória é sobre primeiros vizinhos, $S_i = \pm 1, 0$ e os Δ_i são variáveis aleatórias independentes, que obedecem à distribuição de probabilidades

$$P(\Delta_i) = p\delta(\Delta_i - \Delta) + (1 - p)\delta(\Delta_i).$$

O tratamento de campo médio deste modelo revela que o diagrama de fases muda drasticamente dependendo da concentração p . A topologia do diagrama pode ser muito diferente daquela do modelo de Blume Capel usual, obtido colocando-se $p = 1$. Em particular, para $p = 0.5$, o diagrama de fases no espaço $T \times \Delta$ apresenta uma única linha crítica que se estende até valores de Δ arbitrariamente grandes, separando a fase paramagnética de duas fases ferromagnéticas. Estas duas fases ferromagnéticas, por sua vez, estão separadas por uma linha de primeira ordem que termina em um ponto crítico. Para verificar se estas estruturas não são um artefato da aproximação de campo médio, estamos estudando o modelo BCCCA através de simulações de Monte Carlo. Empregamos um novo algoritmo de cluster, desenvolvido por M. B. Bouabci e C. E. I. Carneiro, que permite determinar as linhas de transição de fase com grande precisão.

ORIENTATIONAL ORDERING IN QUADRUPOLAR GLASS

VALERY BORISOVICH KOKSHENEV

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais

Formally, quadrupolar glass can be considered as an analog of random-bond spin glass with nonlinear pseudospin interaction placed in an external effective magnetic field. On the other hand, new features of the

orientational ordering, which have no analogs in spin glasses, have been derived from the low-temperature NMR experiments [1]. One of these is an incomplete orientational ordering (orientational order parameter does not achieve unity at zero temperature) and, as a consequence, effect of moderation of the ordering field and its disappearance at zero temperature [1]. To describe a microscopic mechanism of the orientational ordering we have employed a two-component vector model of quadrupolar glass in site-diluted hydrogen mixtures [2]. It is established that the collective process of quadrupolar glass orientational freezing is driven by the reaction Onsager field, strongly correlated with the local molecular field. It is shown that the effects of zero-temperature spatial correlations, specific to quadrupolar glass, give rise to incomplete orientational ordering. Financial support of FAPEMIG and CNPq is acknowledged.

[1] X. Li, H. Meyer and A.J. Berlinsky, Distribution Function For the Orientational Order Parameters in Solid H₂ and Solid D₂, Phys. Rev., v.37, 3216 (1988)

[2] V.B. Kokshenev, Does the Quadrupolar Glass Indicate a New Type of Spin Glass?, Sol. State Commun., v.92, 587 (1994)

Estudo das propriedades espectrais de sistemas harmônicos generalizados na abordagem de réplicas

EDSON DE PINHO DA SILVA

Departamento de Física, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro

YONATHAN SHAPIR

Department of Physics and Astronomy, University of Rochester

Utilizando o método de réplicas [1], nós calculamos a densidade de estados (DOS) vibracionais numa rede de Bethe na presença de desordem. Inicialmente nós estudamos para uma rede de Bethe pura, uma técnica que se baseia na construção de um funcional gerador [2], a exemplo do que se faz em teorias de campo, cujas derivadas funcionais fornecem as funções de Green e a partir daí, extraíndo-se sua parte imaginária, calcula-se a DOS. Generalizamos tal procedimento para o caso com desordem e usando réplicas para calcular a média na desordem, estudamos o comportamento da DOS nos casos simétrico por réplicas e com quebra de simetria de réplicas [4]. Em ambos os casos determinamos como a desordem altera a DOS, em particular seu comportamento crítico, i.e., seu comportamento próximo às extremidades das bandas permitidas de frequências.

[1] M Mezard, G Parisi e M A Virasoro em *Spin Glass Theory and Beyond*

[2] J M Langlois, A M S Trembaly and B W Southern, Phys. Rev. B 28 218 (1983)

[3] D Cassi, Phys. Rev. B 45 454, (1992)

[4] M Mezard e G Parisi, J. Physique II 809 (1991)

MODELO DE ISING DILUÍDO POR LIGAÇÕES NO NOVO GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO DE CAMPO MÉDIO

F. O. COELHO, J. A. PLASCAK
UFMG

O novo grupo de renormalização de campo médio (NGRCM) foi proposto recentemente e aplicado ao modelo de Ising e ao problema de percolação dirigida. Bons resultados são obtidos, tanto na localização da transição como nos expoentes críticos, mesmo para os blocos mais simples. Estudamos então o modelo de Ising diluído por ligações em d -dio NGRCM em sua forma usual. Obtivemos um comportamento qualitativo razoável da curva da temperatura crítica versus concentração, porém com uma concentração crítica muito diferente do resultado esperado, mesmo se comparado com outros tipos de aproximações. Este mesmo comportamento é também observado ao se utilizar o NGRCM via teoria de campo efetivo. Isto mostra que este método parece não ser adequado no tratamento de modelos diluídos à baixas temperaturas.

SIMULAÇÃO MICROCANÔNICA DE SISTEMAS ISING DILUÍDO EM REDES BCC

MARCELO PALMA GRILLON, FRANCISCO GEORGE
BRADY MOREIRA
UFPE

Apresentamos os resultados de simulações microcanônicas do modelo Ising com diluição de sítios, em redes cúbicas de corpo centrado (bcc) de tamanho $2 \times 40 \times 40 \times 40$. A dependência com a temperatura da magnetização, energia e susceptibilidade é obtida diretamente da simulação em redes com concentrações $p \geq 0.2$. O calor específico é calculado a partir da derivada numérica das curvas energia versus temperatura. Nossos resultados para a energia crítica e a temperatura crítica em função da concentração são comparados com resultados experimentais no composto $Co_pZn_{1-p}Cs_3Cl_5$.

UM ALGORÍTMO MONTE CARLO PARA PERCOLAÇÃO

PAULO ROBERTO DE ARAÚJO CAMPOS, FRANCISCO
GEORGE BRADY MOREIRA
UFPE

ADAUTO JOSÉ FERREIRA DE SOUZA
UFRPE/UFPE

Propomos uma nova dinâmica de crescimento para gerar um aglomerado conexo de sítios ocupados com probabilidade p . Várias propriedades geométricas do

objeto gerado são calculadas: dimensão fractal; raio de giração; massa (número de sítios no aglomerado).

Usamos este processo de crescimento para estudar o problema de percolação de sítios em redes quadrada e cúbica simples. Os parâmetros críticos são calculados através de uma técnica de escalamento com o tamanho finito proposta por Ruge et al. [Phys. Rev. Lett. 69, 2465 (1992)], na qual associa-se uma propriedade topológica (número de laços, l) ao aglomerado. A análise baseia-se na grandeza $r(p)$ definida como a razão entre uma dada propriedade (que apresenta *scaling*) do aglomerado avaliada para dois valores distintos de l . Valores precisos dos parâmetros críticos são obtidos uma vez que $r(p)$ é muito sensível à distância do ponto crítico.

Transições Ordem-Desordem Induzidas por Curvatura

VICENTE CARIRI

UFPE

FERNANDO MORAES

Institute for Advanced Study - Princeton

Vidros metálicos têm uma estrutura microscópica similar a do empacotamento denso de esferas. Sua ordem inerente está intimamente relacionada ao conceito de frustração geométrica. Da mesma forma que discos rígidos podem ser arranjados no plano em um empacotamento denso hexagonal, esferas são empacotadas em um espaço tridimensional com uma estrutura tetraédrica local; vinte deses tetraedros podem ser empacotados, com pequenas distorções, de maneira a formar um icosaedro. Mas não podemos estender essa ordem local icosaédrica de maneira a preencher perfeitamente o espaço. Curvatura alivia a frustração: icosaedros preenchem perfeitamente uma hiperesfera em um espaço Euclidiano quadridimensional. Portanto, frustração parece ser a regra para sistemas tridimensionais reais. Por outro lado, podemos introduzir frustração em um arranjo plano de discos rígidos variando a curvatura do plano. Neste trabalho, adaptamos o algoritmo de Bennet, para simular em computador o empacotamento de discos rígidos em uma superfície de curvatura negativa uniforme (o plano hiperbólico). Seguimos a evolução da desordem a partir da curvatura zero (plano Euclidiano), observando a conseqüente perda de correlação das posições relativas dos discos à medida que cresce a curvatura. Variando a curvatura ainda mais, a ordem vai reaparecendo gradualmente e o arranjo passa por um estado cristalino em uma curvatura específica. A evolução subsequente corresponde à alternância ordem-desordem. Para caracterizar este estudo, apresentamos a evolução da função de distribuição com a curvatura, bem como projeções dos arranjos de discos em curvaturas selecionadas. Finalmente, estudamos o grau de preenchimento do espaço através de medidas da dimensão frac-

tal dos arranjos. Seguindo a variação da dimensão fractal com a curvatura estamos aptos a medir a dimensionalidade efetiva do plano hiperbólico, a qual determinamos como sendo infinita em contraste com sua dimensão topológica 2.

Estudos da Inclusão de Campo Magnético no modelo de Sherrington-Kirkpatrick de Vidros de Spins

ALÉSIO CLARETE ISAAC VIEIRA, ANTONIO CARLOS DE FARIA

Departamento de Física UFG, C.P. 131

O modelo de Vidro de Spins de Sherrington-Kirkpatrick foi estudado e as propriedades Térmicas, como Energia e Calor Específico, foram calculadas por Faria et al. [A.C.Faria, M.A.A. da Silva and A. Caliri, Phys. Lett. A v.154, n. 5,6 (1991)287]. Neste trabalho, fizemos a inclusão de um Campo Magnético externo, um "Ghost Spin", e calculamos a Magnetização e Susceptibilidade Magnética. Para isto utilizamos a Teoria de Grafos para equacionar matematicamente o problema para então efetuar os cálculos através do estudo dos Zeros da Função Partição.

Classe de Universalidade do Modelo de Percolação de "Bootstrap" com $m = 3$ na Rede Cúbica

CLAUDIO FABIANO ALVES, CYNTHIA BEATRIZ SCHEFFER, NILTON DA SILVA BRANCO

Universidade Federal de Santa Catarina

Usando Grupo de Renormalização no Espaço Real e Escala de Sistemas Finitos, pretende-se calcular os parâmetros críticos do modelo de percolação de "bootstrap" com $m = 3$ na rede cúbica. Resultados anteriores [1], obtidos usando simulação de Monte Carlo, indicam o mesmo valor de ν que percolação usual mas um valor diverso de β . O método por nós utilizado permite a extrapolação para o limite termodinâmico, sendo menos suscetível a efeitos de tamanho finito, os quais podem ser a causa do resultado obtido em [1].

[1] Adler e Stauffer, J. Phys. A **23**, L1119 (1990)

Vidro-de-Spins de Ising com interações de curto alcance sob ação de campo magnético externo.

OSMUNDO DONATO DA SILVA NETO, SERGIO COUTINHO, JAIRO ROLIM L. DE ALMEIDA
UFPE

IVALDO M. FLEURY CURADO
CBPF

A magnetização e o parâmetro de ordem de Edwards-Anderson (EA) locais do modelo de vidro-de-spin de Ising com interações entre primeiros vizinhos e sob a ação de um campo magnético externo foram estudados

no âmbito da aproximação do grupo de renormalização de Migdal-Kadanoff (MK). As relações de renormalização de MK acopladas para os campos e constantes de intercâmbio foram calculadas exatamente para o caso de redes hipercúbicas d-dimensionais considerando-se celas tipo diamante generalizadas. No mesmo contexto, relações de recorrência exatas e acopladas para a magnetização local e para a função de partição de pares foram obtidas. Partindo-se de uma distribuição Gaussiana simétrica para os acoplamentos e de uma distribuição uniforme para o campo em cada sítio investigamos a estrutura da magnetização e do parâmetro de ordem de EA locais próximos da temperatura crítica e no interior da fase condensada, considerando-se a evolução das distribuições de acoplamentos e campos. Os comportamentos dessas estruturas em função da temperatura e do valor inicial do campo foram analisados e discutidos.

ESTUDO DE DINÂMICA MOLECULAR DE SEPARAÇÃO DE FASES EM MISTURAS BINÁRIAS

SEBASTIÁN GONÇALVES, GERARDO MARTÍNEZ, JOSÉ ROBERTO IGLESIAS

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Cristalização e separação de fases são dois fenômenos difíceis de observar em simulações numéricas, pois ocorrem em escalas de tempo normalmente inacessíveis ao computador. Porém, recentemente um estudo por dinâmica molecular de separação de fases num sistema binário de partículas de Lennard-Jones foi apresentado (Phys. Rev. Lett. **71**, 388 (1993)). Nele a separação de fases foi forçada escolhendo um potencial puramente repulsivo entre as partículas diferentes. No presente trabalho de simulação utilizamos outros tipos de interação entre as partículas diferentes para determinar a influência na separação de fases e estudamos também os efeitos de tamanho dos átomos no comportamento dinâmico da mistura binária.

Modelo para vidros de spins com interação quadrupolar aleatória

JOAO M. DE ARAÚJO, F. A. DA COSTA
UFRN

Neste trabalho consideramos o efeito de interações quadrupolares aleatórias em um modelo para vidros de spins. Trata-se de uma generalização do modelo Sherrington-Kirkpatrick para vidros de spins com interações de alcance infinito. Nosso trabalho considera a possibilidade de cada spin poder ocupar três estados, representados por uma variável $S = -1, 0, +1$. Assim, o termo de interação quadrupolar entre dois spins é representado no hamiltoniano por $K_{ij} S_i^2 S_j^2$, onde K_{ij} é uma variável aleatória temperada com média zero e

variância K/\sqrt{N} . Apesar dos consideráveis progressos feitos para solucionar o modelo SK , poucos modelos foram estudados com a inclusão do estado $S = 0$. A experiência com sistemas puros (onde não existem desordem temperadas), nos tem mostrado uma enorme riqueza para modelos magnéticos com três estados, com respeito aos fenômenos críticos que estes sistemas apresentam. Recentemente notamos que alguns sistemas com interações aleatórias compartilham certos aspectos desta riqueza. Em particular, notamos que existem análogos para vidros de spins que exibem fenômenos tais como pontos tricríticos, tetracríticos e fases reentrantes. Também em tais sistemas, podem ocorrer novos efeitos relacionados à chamada quebra de ergodicidade (no caso de vidros de spins associada a quebra de simetria entre réplicas). Estes efeitos estão intimamente ligados às condições de estabilidade para estes modelos. Desta forma, nosso objetivo é analisar o modelo em termos das variáveis Temperatura e K , explorando diversas possibilidades com respeito às fases que este sistema apresenta, bem como existência de pontos multicríticos no diagrama de fases correspondente.

Universalidade e Multifractalidade no Vidro de Spins de Ising com Interações de Curto Alcance

EDVALDO NOGUEIRA JR, SÉRGIO COUTINHO, JAIRO
ROLIM L. DE ALMEIDA
UFPE
FERNANDO DANTAS NOBRE
UFRN
EVALDO CURADO
CBPF

Uma teoria satisfatória para descrever os vidros de spins com interações de curto alcance não é até este momento bem estabelecida. O estudo de tais sistemas em redes hierárquicas pode em muito ajudar na sua compreensão. As redes hierárquicas são aquelas onde a aproximação do grupo de renormalização de Migdal-Kadanoff é exata. Neste trabalho, a aproximação de Migdal-Kadanoff é usada para investigar as propriedades críticas do modelo de vidro de spins de Ising em redes hierárquicas tipo diamante com dimensão $d=3$. Para diferentes distribuições de probabilidades das constantes de acoplamento (bimodal, exponencial, gaussiana e retangular) o parâmetro de ordem de Edwards-Anderson (EA) local do modelo apresenta uma estrutura multifractal, no ponto crítico e na fase condensada. A função $f(\alpha)$ que caracteriza o comportamento multifractal é calculada numericamente para as diferentes distribuições. Neste contexto, os expoentes críticos do parâmetro de ordem EA e da magnetização local são estimados e discutidos. Analisamos a validade das regras tradicionais de universalidade para estes sistemas.

Modelo m-Vetorial para Vidro de Spins na Presença de um Campo Magnético Aleatório

EDVALDO NOGUEIRA JR, SÉRGIO COUTINHO, JAIRO
ROLIM L. DE ALMEIDA
UFPE
FERNANDO DANTAS NOBRE
UFRN

Modelos de vidros de spins na presença de campos magnéticos aleatórios foram inicialmente propostos como sistemas apropriados para descrever misturas de materiais ferroelétricos com antiferroelétricos, conhecidos como vidros de prótons ou de deuteronos; tais sistemas são os correspondentes elétricos dos vidros de spins magnéticos. Estes modelos podem também exibir efeitos interessantes como, por exemplo, uma mudança de comportamento ("crossover") entre os regimes de vidros de spins e de campo aleatório, análogo ao observado em certos antiferromagnetos diluídos na presença de um campo magnético externo. Neste trabalho, investigamos o vidro de spins m-vetorial, com interações de alcance infinito, na presença de um campo magnético aleatório obedecendo uma distribuição de probabilidades gaussiana (média h_0 , largura Δ). Obtemos a solução com simetria entre réplicas e analisamos o diagrama de fases para $h_0=0$ e diversos valores de Δ . Uma atenção particular é dedicada ao estudo da linha de Gabay-Toulouse (abaixo da qual as componentes transversas do parâmetro de ordem são diferentes de zero) com $h_0 \neq 0$, para distintos valores de Δ .

Abordagem D-Vetorial ao Modelo SBC com Contribuição de Segundos-Vizinhos

DOUGLAS F. DE ALBUQUERQUE, J. R. DE SOUSA, I.
P. FITTIPALDI
Departamento de Física - UFPE

O modelo de sítio-ligação correlacionada (SBC) é estudado dentro do esquema de grupo de renormalização de campo médio na perspectiva do modelo de spins D-vetoriais. Neste trabalho fazemos uso da interação $J_{ij} = J_{ij}(\epsilon_i, \alpha)$ entre primeiros-vizinhos (NN) onde ϵ_i é uma variável aleatória ($=0,1$) e α é o parâmetro de correlação do sistema; e da contribuição dos sítios próximos-primários-vizinhos (NNN). O estudo é feito com cluster $N = 1$ e $N' = 2$ spins. Dentro deste aspecto o diagrama de fase no plano $T - p$ é abordado para o sistema $KNi_pMg_{1-p}F_3$ [1] e observa-se uma boa concordância com os dados experimentais obtidos para o mesmo por meio de ressonância nuclear magnética (RMN).

[1] J.A.O. de Aguiar, M. Engelsberg e H.J. Guggenheim, J. Mag. Mag. Mat. **54-57**, 107 (1986).

MODELO DE ISING COM SPINS MISTOS EM UM CAMPO ALEATÓRIO[†]

CARLOS ALBERTO PEREIRA DA SILVA

UESPI

LINDBERG LIMA GONÇALVES

UFC

É considerado o modelo de Ising ferromagnético em uma rede favo de mel com spins de magnitudes $1/2$ e $3/2$. Cada conjunto de spins ocupa uma das duas sub-redes equivalentes da rede favo de mel. O campo aleatório satisfaz uma distribuição recozida e, é obtido usando o mesmo procedimento desenvolvido por Gonçalves & Horiguchi[1]. O modelo é resolvido exatamente para distribuições simétricas de campo, transformando-o no modelo de Ising Uniforme com spin $1/2$ na rede triangular. A solução exata é determinada para campo aleatório com e sem vínculo [1]. Também é considerado o efeito da anisotropia uniaxial no comportamento crítico do sistema, correspondendo a uma extensão dos resultados obtidos recentemente para o caso em que a rede favo de mel era preenchida com spins $1/2$ e 1 [2]. O diagrama de fase é explicitamente apresentado para distribuições discretas de campo, onde este admite os seguintes valores $0e \pm h$, com probabilidades p e $(1-p)/2$ respectivamente. É mostrado que, para campo aleatório com vínculo, o sistema apresenta o fenômeno de reentrância para determinados valores dos parâmetros que caracterizam o modelo e, neste caso existem probabilidades críticas, p_c , não-universais.

[1] L. L. Gonçalves & T. Horiguchi, *Int. J. Mod. Phys. B* **4**, 1693 (1990)

[2] C. A. Pereira & L. L. Gonçalves, *J. Magn. & Magn. Mater.*, 140-144(1995)

[†] Trabalho financiado parcialmente pelas agências CNPq e Finep.

Diagrama de Fase de Redes Duais Aleatoriamente Decoradas.

EDINA MARIA DE SOUSA LUZ

Universidade Estadual do Piauí

ANTÔNIO FERNANDES SIQUEIRA

Universidade Federal do Ceará

Estudamos um modelo de Ising com decoração "annealed" nas redes kagomé e duced. Os sítios das redes originais são ocupados com spins do tipo spin- $1/2$ enquanto as decorações nas ligações são do tipo spin- 1 . Entre os spins nodais apenas interações ferromagnéticas são levadas em conta na rede kagomé enquanto interações antiferro são também consideradas na rede duced. As decorações são aleatórias e sobre os spins decoradores consideramos um campo de anisotropia uniaxial. Os diagramas de fase foram obtidos e os resultados são analisados levando-se em conta tanto as concentrações dos spins decoradores quanto o parâmetro de anisotropia sobre a temperatura crítica

do sistema. Observam-se para a rede kagomé duas concentrações que levam a temperatura crítica a se anular enquanto para a rede duced existem quatro valores da concentração. Estes valores são obtidos analiticamente e dependem exclusivamente da função de correlação de pares de primeiros vizinhos. Mostra-se além disso que o parâmetro de anisotropia tem o mesmo efeito que o de diluição de ligações.

RANDOM ONE-DIMENSIONAL KINETIC ISING MODEL[†]

LINDBERG LIMA GONÇALVES

UFCE

The one-dimensional kinetic Ising model (closed chain, N sites), with random exchange interactions, is studied in the framework of Glauber dynamics¹. The random variables are considered to satisfy the annealed distribution $\mathcal{P}(J_j) = p\delta(J_j - J_1) + (1-p)\delta(J_j - J_2)$, so that the exchange interaction is given by $J_j = J_1 n_j + J_2(1 - n_j)$, where $n_j = 0, 1$. The probability function¹, $P(\sigma_1, \dots, \sigma_N, t)$, of finding the system at time t in a given spin configuration, $\{\sigma_1, \dots, \sigma_N\}$, satisfies a master equation and the bond configurations, $\{n_j, \dots, n_N\}$, are assumed to be time-independent and controlled by the temperature only. These configurations are found by introducing a pseudo-chemical potential, which is determined by imposing the distribution $\mathcal{P}(J_j)$ for the random exchanges. The transition probabilities are obtained in the usual way, by making the asymptotic probability function equal to the equilibrium probability function. Under these conditions the model is exactly soluble, and all dynamic properties obtained. The long-time behaviour of the magnetization is determined and the results compared to the known ones for the quenched case². The critical dynamic exponent z is also obtained and the dynamic universality discussed³.

[1] R. J. Glauber, *J. Math. Phys.* **4**, 294 (1963).

[2] D. Dhar and M. Barma, *J. Stat. Phys.* **22**, 259 (1980).

[3] J. K. Leal da Silva, *Phys. Lett.* **119A**, 37 (1986).

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

ONE-DIMENSIONAL LATTICE GAS WITH RANDOM INTERACTIONS[†]

ANDRÉ DE PINHO VIEIRA, LINDBERG LIMA

GONÇALVES

UFCE

The one-dimensional lattice gas¹, closed chain (N sites), with random short- and long-range interactions is considered. The problem is studied in the framework of the bond and site problems, and the random variables are considered to satisfy bimodal annealed distributions which are adjusted by introducing pseudo-chemical potentials for each case. For the bond problem the dis-

tribution of the short-range interactions $\epsilon_{j,j+1}$ is explicitly given by $\mathcal{P}(\epsilon_{j,j+1}) = p\delta(\epsilon_{j,j+1} - J_1) + (1 - p)\delta(\epsilon_{j,j+1} - J_2)$, and the long-range interactions are considered in two cases, namely, satisfying a strongly correlated distribution² and, in the second case, satisfying a constraint which connects all interactions. For the site problem, it is considered the case where the lattice sites are occupied by particles with probability p . The model is exactly solved by mapping it onto the random Ising model and its solution is obtained by using the functional integral method and the transfer matrix technique. The phase diagram is obtained for various probabilities of the random interactions and the results are compared to the ones obtained for the non-random model³. The results are also compared to the ones obtained for the Frankel-Thompson disordered magnetic lattice gas⁴.

[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, *Condens. Matter Phys. (UA)* (1995) to be published.

[4] S. Inawashiro, N.E. Frankel and C.J. Thompson, *Phys. Letters* **84A**, 205 (1981).

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

Modelo Estocástico para o Crescimento de uma Cultura de Bactérias

ADRIANO DE OLIVEIRA SOUSA, ANTONIO FERNANDES SIQUEIRA

Universidade Federal do Ceará

Descrevemos o crescimento de uma população de bactérias admitindo que cada indivíduo possua uma probabilidade p de sobrevivência com reprodução, enquanto que possa morrer com probabilidade r . Neste caso existe uma probabilidade crítica p_c , para a qual existirá um número infinito de gerações. No caso mais realista, em que seja permitida a sobrevivência sem reprodução em uma dada geração, ocorrendo com probabilidade q , observa-se que se fizermos q variar ao longo das gerações, poderemos obter um comportamento característico do tipo "predador-presa". No primeiro caso em que $q = 0$, obtem-se o mesmo resultado de uma árvore de Cayley. No entanto, se $q \neq 0$, mas varia em gerações sucessivas, voltamos a obter o mesmo tipo de comportamento e, novamente, obtemos a mesma probabilidade crítica p_c . Os resultados obtidos, em ambos os casos, permite-nos concluir que o crescimento de uma cultura de bactérias está na mesma classe de universalidade que a percolação em uma árvore de Cayley, com número de coordenação três. Além disso, reproduz os resultados de Jacques Monod [1] para o crescimento de uma colônia de bactérias.

[1] Monod, Jacques, *Annual Review of Microbiology* **3**, 371 (1949)

Sistemas Quânticos e Simulações (EST) - 09/06/95

Um Modelo Hierárquico para a Cadeia Antiferromagnética de Heisenberg

NESTOR OIWA, JOSÉ RODRIGO PARREIRA, OSCAR BOLINA

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

Modelos Hierárquicos foram desenvolvidos no final da década de sessenta com o objetivo de estudar modelos magnéticos com interações de longo alcance, sem todavia que fossem reproduzidos os resultados, considerados triviais, provenientes das formulações de campo médio. Posteriormente sua importância se tornou maior, dado que foram redescobertos, agora no contexto de idéias do Grupo de Renormalização, uma vez que possuíam a desejável propriedade de que as transformações de escala necessárias para a implementação desta técnica se mostravam exatas. Apresentamos agora uma formulação hierárquica da cadeia antiferromagnética de Heisenberg, cujo objetivo é o estudo da conjectura de Haldane (para cadeias de spin inteiro). Neste trabalho apresentamos nossos primeiros resultados, concernentes a cadeias de spins semi-inteiros, onde diagonalizamos exatamente a matriz de energia obtida para cadeias de até oito spins e verificamos o comportamento do gap de energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado à temperatura zero para diferentes parâmetros de acoplamento.

OS ESTADOS COERENTES E AS DISTRIBUIÇÕES DE PROBABILIDADES EM ESPAÇOS DE DIMENSÃO FINITA.

MARCELO APARECIDO MARCHIOLLI

UFSCar

DIÓGENES GALETTI

IFT-UNESP

Recentemente, D. Galetti e A.F.R. de Toledo Piza [1] utilizaram as bases de operadores unitários de Schwinger com o intuito de incorporar às transformações de Weyl-Wigner, o espectro quântico discreto. Outro importante aspecto é a base de operadores unitários utilizada pelos autores: esta possui uma estrutura pré-simplética e define um espaço discreto que apresenta as características de um espaço de fase quântico. Posteriormente, B. Hiley e N. Monk [2] estudaram o problema de como a estrutura do espaço-tempo ou energia-momento, pode ser abstraída da álgebra dos operadores unitários. No entanto, os aspectos algébricos da base de operadores unitários não foram

totalmente explorados, implicando em uma margem reduzida de possíveis aplicações na física. Desta forma, este trabalho tem por objetivo realizar uma extensa revisão da estrutura algébrica da base simétrica de Schwinger, bem como suas possíveis implicações. Como aplicação, introduzimos o conceito de estados coerentes e obtemos as distribuições de probabilidades no espaço de dimensão finita. Também investigamos, para os resultados obtidos, o limite do contínuo.

[1] D. Galetti and A.F.R. de Toledo Piza, *Physica A* **149**, 267 (1988) D. Galetti and A.F.R. de Toledo Piza, *Physica A* **186**, 513 (1993)

[2] B. Hiley and N. Monk, *Mod. Phys. Lett. A* **8**, 3625 (1993)

METAESTABILIDADE EM UM SISTEMA DE FÉRMIONS E BÓSONS INTERAGENTES

D. G. BARCI, E. S. FRAGA, C. A. A. DE CARVALHO
Universidade Federal do Rio de Janeiro

Apresentamos um estudo sobre o efeito da presença de uma densidade finita de férmions sobre o processo de decaimento térmico de bósons metaestáveis. Analisamos um sistema de bósons e férmions interagentes nos casos de uma, duas e três dimensões espaciais. Utilizando-nos de um formalismo fora de equilíbrio, estudamos o decaimento de estados metaestáveis por meio da nucleação de bolhas obtendo, por fim, resultados explicitamente dependentes do tempo.

O efeito dos férmions sobre o sistema está contido no determinante fermiônico. Dado que a física de um decaimento, em geral, é determinada pelas flutuações de longos comprimentos de onda (momenta pequenos), podemos fazer uma expansão em gradientes deste determinante.

Para os casos de $D=1+1$ e $D=3+1$, o efeito dos férmions é gerar uma "estabilização quântica", ou seja, o surgimento de bolhas metaestáveis, além das bolhas instáveis ("sphalerons") presentes no caso puramente bosônico. Já para o caso de $D=2+1$, o potencial efetivo sofre uma alteração qualitativa, afastando-se de um sistema de dois níveis.

COMENTÁRIO SOBRE A CONDUTIVIDADE DE UM METAL DESORDENADO, CARACTERIZADO POR CORRELAÇÕES QUE DECAEM ALGEBRICAMENTE COM A DISTÂNCIA.

MARIA CRISTINA VARRIALE, ALBA THEUMANN
UFRGS

Investigando a localização fraca em um sistema d -dimensional de elétrons não interagentes, na presença de potenciais aleatórios caracterizados por correlações $W(\vec{r}) = W_0\delta(\vec{r}) + W_1r_{-(d+\sigma)}$, onde σ é um parâmetro, calculamos as correções quânticas à condutividade

metálica, no regime fracamente desordenado, para valores arbitrários de σ , através de um tratamento perturbativo até primeira ordem em W_1 . Nossos resultados confirmam a exatidão da forma universal para o Cooperon, proposta previamente por outro autor¹, com base em princípios gerais, e constituem uma prova rigorosa da validade desta forma universal para potenciais com correlações do tipo inverso de potência. Outrossim, observamos que o sistema exibe um comportamento de longo ou de curto alcance, dependendo se σ é negativo ou positivo, respectivamente, o que confirma nosso resultado anterior², quando, através de uma abordagem de grupo de renormalização, investigamos a transição de localização de Anderson neste sistema.

[1] M.T. Béal-Monod, *Phys.Rev.B* **47**, 3495(1993)

[2] M.C. Varriale e A. Theumann, *J.Phys.A: Math.Gen.* **23**,L719(1990)

ESTATÍSTICA GENERALIZADA DO PROBLEMA QUÂNTICO DE N-CORPOS

SERGIO CURILEF

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, RJ, Brasil

Não-extensividade ou não-aditividade são conceitos muito importantes em algumas áreas da física. Uma interessante generalização de conceitos tradicionais foi proposta por Tsallis na sua Estatística de Boltzmann-Gibbs generalizada, inspirada em multifractais, para sistemas não-extensivos. Neste trabalho usa-se a entropia generalizada para derivar a função de distribuição e a função de partição, válidas para sistemas abertos que podem trocar calor e matéria com o ambiente, desta forma, a energia e o número de partículas podem flutuar. Porém, ambos os valores; a energia média e o número médio de partículas são fixos para sistemas em equilíbrio (ensemble grand-canônico). Isto é particularmente importante porque quando a função de distribuição ou a função de partição de um sistema é conhecida, então é possível calcular os valores médios de todas as quantidades termodinâmicas, como por exemplo, energia, calor específico, magnetização, etc. A função de partição generalizada acha-se usando o método variacional e as funções de distribuição generalizadas para as estatísticas de Fermi-Dirac, Bose-Einstein e Maxwell-Boltzmann acham-se usando a transformação de Hillhorst.

Finalmente, o formalismo aplica-se a um sistema de fermions de D dimensões, estudando como depende o potencial químico com a temperatura, e o nível de Fermi com o parâmetro que caracteriza a teoria e a dimensão do sistema.

RELAÇÃO DE DISPERSÃO DE FILMES FINOS COM INTERAÇÕES DIPOLARES E DE ÍON ÚNICO.

ALBERTO SEBASTIÃO DE ARRUDA

Departamento de Matemática, UFMT

WAGNER FIGUEIREDO

Departamento de Física, UFSC

NORBERTO MAJLIS, SILVIA SELZER

Instituto de Física, UFF

Calculamos a relação de dispersão de filmes finos, especialmente com ênfase nas mono e bicamadas. Os filmes são descritos pela hamiltoniana de Heisenberg acrescida de termos que representam interações dipolares de longo alcance e interações de íon único. A anisotropia de íon único favorece predominantemente o alinhamento dos spins ao longo do eixo de quantização z . Utilizamos o esquema das funções de Green para escrever as equações de movimento dos operadores de interesse. O desacoplamento das equações de movimento é realizado pela aplicação da aproximação das fases aleatórias aos termos de intercâmbio e dipolares. Por outro lado, as funções de Green relacionados ao termo de íon único são resolvidas exatamente utilizando o esquema elaborado por Devlin (J.F. Devlin, Phys.Rev. B 4, 136 (1971)). Obtemos expressões para a frequência dos magnons em função dos parâmetros dipolares e de íon único. Nossos resultados mostram uma dependência da frequência dos magnons em função do ângulo entre o vetor de onda e a magnetização do sistema. No caso das monocamadas, quando o termo de íon único é desprezado, recuperamos as expressões de Yafet e colaboradores (Y.Yafet, J.Kwo e E.M. Gyorgy, Phys. Rev. B 33, 6569 (1988)) que mostram que um filme dipolar é ferromagneticamente estável.

FRONTEIRAS DE FASES DE SISTEMAS ANTIFERROMAGNÉTICOS UNIAXIAIS EM REDES SEMI-INFINITAS.

JOAQUIM NESTOR BRAGA DE MORAES, WAGNER FIGUEIREDO
UFSC

Consideramos um modelo de Heisenberg anisotrópico em uma rede semi-infinita. Além da anisotropia uniaxial presente no termo de intercâmbio, consideramos também uma anisotropia uniaxial de íon único. Um campo magnético externo é aplicado ao longo do eixo fácil desse sistema. Inicialmente, consideramos a estabilidade termodinâmica e dinâmica desse sistema para a temperatura nula. Mostramos que o campo crítico paramagnético, entre as fases paramagnética e spin-flop pode ser maior que aquele que ocorre quando não temos uma superfície livre. Em particular, mostramos que na ausência de anisotropias uniaxiais, o campo crítico paramagnético é maior que o de volume, se o acoplamento de intercâmbio da superfície for 1.25 maior que o acoplamento do volume. Esse resultado é o mesmo observado, na aproximação de campo médio, para a existência de magnetização de superfície de um modelo ferromagnético em uma rede semi-infinita. Mostramos ainda, que na transição de primeira ordem entre as

fases antiferromagnética e spin-flop, o campo crítico termodinâmico entre essas fases pode ser menor que aquele observado em sistemas sem quebra de simetria translacional. Esse resultado depende da razão entre as anisotropias uniaxiais de íon único presentes na superfície e no volume.

SIMULAÇÃO DE MONTE CARLO EM UM SISTEMA COM DINÂMICAS COMPETITIVAS DE GLAUBER E KAWASAKI.

BARTIRA CABRAL DA SILVEIRA GRANDI, WAGNER FIGUEIREDO
Departamento de Física, UFSC

Neste trabalho consideramos um modelo de Ising ferromagnético onde os spins do sistema estão sujeitos a dois tipos de estatísticas competitivas. Devido ao contato com o banho térmico consideramos transições entre os diferentes estados através da inversão de um spin de cada vez, o que é simulado pelo processo de Glauber. Como consideramos também um fluxo de energia sobre o sistema, utilizamos o processo de Kawasaki para representá-lo, pois neste processo spins vizinhos são permutados sempre que ocorre um acréscimo na energia do sistema. Esse modelo, quando estudado através da equação Mestre, na aproximação de pares, apresenta o fenômeno da auto-organização (T.Tomé e M.J. de Oliveira, Phys.Rev.A 21,6643 (1989)). Mesmo em uma dimensão esse modelo apresenta transição de fases estacionária em temperatura não nula. Mostramos que simulações de Monte Carlo realizadas neste sistema fornecem resultados qualitativamente diferentes daqueles previstos através da aproximação de pares. Em particular, a transição de fases correspondente ao estado estacionário unidimensional desaparece completamente.

Quantum Fluctuations of Solitons in Two-Dimensional Anisotropic σ Models

* AFRÂNIO RODRIGUES PEREIRA

Antônio Sérgio Teixeira Pires,

MARIA ELIZABETH DE GOUVÊA

Departamento de Física - ICEx - UFMG

We study the quantum fluctuations about static soliton solutions for the two-dimensional anisotropic σ models. Particularly, for the XY-like anisotropy, we find that quantum corrections induce an internal degree of freedom and lower the soliton's classical energy. For Ising-like anisotropy, quantum corrections raise the classical energy of the soliton. In both cases, the corrections are proportional to the anisotropy parameter and depend on the size of the soliton.

NEW RESULTS IN THE DYNAMICS OF THE ISING MODEL IN A TRANSVERSE FIELD

Ji IL KIM, VALERY BORISOVICH KOKSHENEV,
MARIA CAROLINA NEMES

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais

A new solution for the spin-1/2 Ising model in an external transverse field in the case of three-dimensional nearest-neighbor interactions is obtained in the framework of the Green-function method. This suggests a new dynamic description of the disordered phases of crystals undergoing soft-mode-type structure phase transitions. In the scope of Tyablikov's scheme the chain of equations for high-order Green functions has been decoupled and consistently reduced to the closed system of equations for low-order Green functions. Thereby, we focused on quantum short-range correlation effects caused by atoms involved in small compact clusters. The system obtained has been solved exactly with taking into account all site-permutative properties of symmetry of interactions between atoms involved in clusters. A comparison of macroscopic energy-spectrum characteristics, which follow from the solution found in Mori's continued fraction method is given. An application of new results to the problem of short-range thermal fluctuations (intrinsic mechanism of the central peak phenomena) in the order-disorder phase transitions in terms of the dynamic instability of the soft-mode excitations is also discussed. Financial support of FAPEMIG and CNPq is acknowledged.

ON THE DYNAMICAL INSTABILITY OF QUADRUPOLAR SYSTEMS NEAR THE ORIENTATIONAL PHASE TRANSITION

LOBO CESAR

Departamento de Física, Universidade Federal de Santa Maria

VALERY BORISOVICH KOKSHENEV, MARIA
CAROLINA NEMES

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais

Quadrupolar interaction dominates in molecular and liquid crystals. We extend our recent results[1] obtained for the instability of the disordered phase of three-dimensional dipolar-type systems to the case of quadrupolar-type systems undergoing order-disorder phase transition. After linear transformation of quadrupolar dynamic variables the quadrupolar Hamiltonian is effectively linearized in terms of pseudospin operators, which act in a subspace of $S=1$. Then we develop a Green-function method for the quadrupolar system. The chain of equations for higher order Green functions is decoupled in the scope of Tyablikov's scheme and consistently reduced to the closed system of equations for low-order Green functions. New so-

lutions for critical temperatures are obtained for the case of cubic symmetry. A phase diagram, which includes isotropic and anisotropic quadrupolar phases, is discussed. Financial support of FAPEMIG and CNPq is acknowledged.

[1] V.B. Kokshenev, J.L. Kim and M.C. Nemes, On the Dynamics of the Three-Dimensional Spin-1/2 Ising Model In a Transverse Field, submitted to *Physica A: Statistical and Theoretical Physics*

Modelo tight-binding na curva de Koch com diferentes auto-energias

ROBERTO FERNANDES SILVA ANDRADE

Instituto de Física - UFBA

HANS-JOACHIM SCHELLNHUBER

Potsdam Institute for Climate Impact Research - Potsdam - Alemanha

Consideramos um modelo de elétrons na aproximação tight-binding sobre a curva de Koch descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathbf{H} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \lambda t(n) |n\rangle \langle n| + \sum_{n \in \mathbb{Z}} [|n\rangle \langle n-1| + |n\rangle \langle n+1|], \quad (1)$$

λ indica a auto-energia, e a função $t(n)$ vale 1 para os sítios nos "bicos" da curva de Koch e 0 para todos os outros sítios. O modelo é analisado pelo método das matrizes de transferência, dentro do esquema de aproximações periódicas sucessivas. Através de um mapa bidimensional que relaciona os elementos de matriz de uma geração periódica em função dos da anterior conseguimos informações exatas sobre o caráter dos estados quânticos (estendido, localizado ou crítico) em função do número de rotação κ . Uma comparação com um modelo similar já bastante estudado [1] indica que este modelo é mais rico, já que admite a existência dos três tipos de estados. A informação sobre o caráter dos estados é corroborada pela integração numérica da equação de Schrödinger.

O modelo de Potts com 3 estados e interações mistas ferro anti-ferro magnéticas na rede quadrada

SABINO JOSÉ FERREIRA NETO

UFMG

ALAN D. SOKAL, GUSTAVO MANA

New York University

Através de simulações numéricas com algoritmos de cluster do tipo Wang-Swendsen-Kotecký (WSK) estudamos o comportamento crítico do modelo de Potts com $q = 3$ estados em uma rede quadrada onde as interações são ferromagnéticas em um das direções ($\beta_x >$

0) e anti-ferro na outra ($\beta_y < 0$). Nossos resultados parciais mostram que no limite $J_y \rightarrow \infty$ o modelo apresenta um comportamento crítico tipo Kosterlitz-Thouless. O comprimento de correlação na direção x se comporta como:

$$\xi_x \approx \exp(\beta_{crit} - \beta_x)^{-0.5}$$

onde $\beta_{crit} = 3.0$, comportamento semelhante ao apresentado pela susceptibilidade χ . Além disto verificamos que a função correlação de dois spins ao longo da direção x tem um decaimento algébrico com a distância para $\beta_x \geq \beta_{crit}$.

TRANSIÇÕES DE FASE INDUZIDAS POR CAMPO: SIMULAÇÃO MONTE CARLO

NAZARENO GETTER FERREIRA DE MEDEIROS,
MARCELO PALMA GRILLON, FRANCISCO GEORGE
BRADY MOREIRA
UFPE

Neste trabalho apresentamos os resultados de simulações numéricas no ensemble microcanônico de sistemas Ising, com interações antiferromagnéticas entre primeiros vizinhos J , na presença de um campo magnético externo H . Obtemos a dependência da magnetização e da energia com a temperatura do sistema para diversos valores da razão H/J . O diagrama de fases no plano H/J versus T/J é então obtido e comparado com resultados disponíveis na literatura.

SOBRE A POSSIBILIDADE DE COLAPSO ELETROMAGÉTICO NAS EXPERIÊNCIAS COM EXPLOSÕES DE FIOS METÁLICOS

NIKOLAI PAVLOVITCH TRETIAKOV
UFG

A possibilidade da realização da autocontração de descarga elétrica [1], com a energia por partícula $\geq 10^3$ ev, durante a explosão elétrica de um fio metálico fino, foi avaliada. Sob essas condições, as perdas da energia por radiação podem superar as perdas ôhmicas, portanto a pressão do campo magnético da corrente elétrica cresce mais rapidamente do que a pressão do plasma. A contração continuará até o surgimento de um novo estado, no qual a degenerescência dos elétrons é o fator essencial. A contração só vai parar sob a ação da pressão do gás dos elétrons degenerados. Forma-se uma nova fase. Neste estado todos os elétrons estão na banda de condução. Esta banda de condução formou-se mediante alargamento e superposição dos níveis eletrônicos sob ação da pressão alta. 1. Meierovitch B.E., Soviet Phys. - Uspekhi, v.149, 221-258 (1986).

Diagramas de Fase de cadeias quânticas de Heisenberg, com spin-2

JUAN PABLO NEIROTTI, MÁRIO JOSÉ DE OLIVEIRA

Instituto de Física, Univ. de São Paulo

Estudam-se as propriedades do estado fundamental ($T = 0$) de cadeias de Heisenberg com spin-2, as quais têm uma dinâmica regida pelo Hamiltoniano

$$H(A, D) = \sum_{i=1}^N S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + AS_i^z S_{i+1}^z + D(S_i^z)^2,$$

com condições periódicas de contorno. A é o parâmetro de anisotropia uniaxial e D é o parâmetro de campo cristalino. Usando o algoritmo de Lanczôs[1] se calculam os valores do gap de energias ($E_1(A, D) - E_0(A, D)$) para valores de N pequenos. Para tamanhos maiores do sistema, se utiliza uma generalização do método de Monte Carlo desenvolvido por M. J. de Oliveira[2]. Resultados aproximados são obtidos pelo método de ondas de spin [3, 4], com os quais se desenham diagramas de fase preliminares. O tratamento dos dados obtidos se realiza seguindo o trabalho de [5] para spin-1.

[1] Adv. N. Phys 9 123 (1977)

[2] Phys. Rev. B 48 6141 (1993)

[3] Phys. Rev. B 42 2589 (1990)

[4] Phys. Rev. 117 117 (1960)

[5] Phys. Rev. B 30 215 (1984)

Grupo de Renormalização por Escala de Sistemas Finitos Aplicado ao Modelo de Heisenberg Anisotrópico

NILTON DA SILVA BRANCO

Universidade Federal de Santa Catarina

O método do Grupo de Renormalização por Escala de Sistemas Finitos foi introduzido recentemente e aplicado com sucesso a modelos clássicos [1]. Neste trabalho, aplicamos o método ao modelo de Heisenberg anisotrópico ferro e antiferromagnético na rede quadrada. Resultados preliminares concordam quantitativamente com resultados anteriores (alguns exatos) para o caso ferromagnético. O diagrama de fases T_c (temperatura crítica) $\times \Delta$ (parâmetro de anisotropia) para o modelo antiferromagnético apresenta fenômeno de reentrância e concorda qualitativamente com resultado anterior, obtido usando o Grupo de Renormalização para Sistemas Quânticos [2].

[1] ver de Oliveira *et al*, J. Stat. Phys. 78, 1619 (1994) e referências lá citadas;

[2] de Souza, Phys. Rev. B 48, 3744 (1993)

Mean-Field Monte Carlo modificado : uma alternativa para Metrópolis?

VALTER LÍBERO

Instituto de Física de São Carlos - USP

J. R. DRUGOWICH DE FELÍCIO

IFSC e Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras, Rib. Preto-USP

O método de Netz e Berker (Phys. Rev. Lett.66,377(91)) é revisitado e uma nova conexão com o algoritmo de Metrópolis estabelecida. Modelos como o Ising ferromagnético na rede quadrada, Ising anti-ferro na rede triangular, Ashkin-Teller com 2 e 3 cores são utilizados para tentar estabelecer comparações entre os métodos, inclusive ao nível do histograma. O trabalho de Henriques, Henriques e Salinas (PRB,1995) se mostra de grande valia no entendimento dos efeitos da hard spin condition. Finalmente, o MFMC é utilizado para levantar diagramas de fases para modelos com vários graus de liberdade.

ESTATÍSTICA FRACIONÁRIA E DEFEITOS EM SÓLIDOS

CLAUDIO FURTADO, FERNANDO MORAES

UFPE

EUGENIO BEZERRA DE MELLO

UFPB

Neste trabalho estudamos a interação de partículas com defeitos em sólidos. Os defeitos são tratados sob o ponto de vista da teoria de Katanaev -Volovich[1]. Nesta teoria os defeitos são estudados como Soluções das equações de Einstein-Cartan para gravitação em 2+1 dimensões, onde euclidianizamos o tempo e obtemos soluções para defeitos em sólidos. As propriedades dos defeitos são introduzidas na Métrica do espaço. Estudamos elétrons e buracos na presença de deslocamentos tipo Hélice. Mostramos o aparecimento de fase s tipo Aharonov-Bohm na função de onda das partículas. O sistema partícula-defeito tem estatística fracionária devido ao fato de que ao transportarmos a função de onda paralelamente em torno do defeito ela nem é simétrica nem antisimétrica, comparamos tal sistema com o sistema carga fluxo estudado por Wilczek[2]

[1]M. O. Katanaev e I. V. Volovich, Ann. Phys.(N.Y.) 216 (1992) 1

[2] F. Wilczek, Phys Rev. Lett. 49 (1982) 957

EFEITOS NÃO-MARKOVIANOS EM ABSORÇÃO ÓPTICA.

GILBERTO A. PRATAVIERA, SALOMON S. MIZRAHI

Dep. de Física - Universidade Federal de São Carlos

JOSÉ R. BRINATI

Dep. de Física - UFRJ

A descrição de um processo não-Markoviano é apresentada e é obtida a solução assintótica da equação mestra generalizada para um átomo de dois níveis excitado por campo elétrico externo dependente do tempo. São analisados efeitos de memória e de temperatura na curva de absorção de energia, na entropia (de Shanon) e no parâmetro de coerência do sistema atômico. Foi constatado que a entropia decresce monotonicamente em função do "detuning" para um processo Markoviano enquanto que nos processos não-Markovianos

ela é caracterizada por apresentar um mínimo. Essa diferença permite a diferenciação entre os dois processos. Outro resultado interessante é que para processos não-Markovianos existe uma temperatura crítica na qual a curva de absorção sofre uma transição de fase, mudando de um único para dois máximos de absorção.

FUSÃO QUÂNTICA POR RESFRIAMENTO DE PEQUENOS AGLOMERADOS ATÔMICOS

ALEX ANTONELLI

UNICAMP

EFTHIMIOS KAXIRAS

Harvard University

Será apresentado um novo tipo de fusão ocasionado pelo resfriamento, à temperaturas finitas, de pequenos aglomerados atômicos. Este tipo de fusão é um efeito de natureza puramente quântica, devido a delocalização resultante do aumento do comprimento de onda de De Broglie dos átomos com o abaixamento da temperatura. Serão apresentados resultados de simulações *Path Integral Monte Carlo* para um aglomerado de 9 átomos de berílio, que exibe este tipo de fusão a uma temperatura ao redor de 30 K. Será dada uma interpretação deste fenômeno baseada no potencial efetivo dependente da temperatura de Feynman-Hibbs.

DENSITY MATRIX RENORMALIZATION GROUP STUDY OF THE HEISENBERG CHAIN

GERARDO MARTÍNEZ

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

KAREN A. HALLBERG

Max-Planck Institut für Physik komplexer Systeme,

D-01187 Dresden, Germany

PETER HORSCH

Max-Planck Institut für Festkörperforschung, D-70569

Stuttgart, Germany

We use the density matrix renormalization group technique to calculate the spin-spin correlation functions for antiferromagnetic isotropic Heisenberg chains of spin 1/2 up to 70 sites using periodic boundary conditions. These new methods are being used to prove theories and conjectures since they allow higher accuracy for bigger clusters than exact diagonalization approaches. From this fact it is possible to extract detailed information of some interacting models. In our case the asymptotic correlation function and the magnetic structure factor for the 1D Heisenberg model show non-universal logarithmic corrections consistent with $(1/\ell)\sqrt{\ln(c\ell)}$ as a function of the distance ℓ between the spins. The constant c is related to the cut-off dependent coupling constant used in quantum field theory.

ENTROPIA DE SISTEMAS DE SPINS POR CÁLCULO DE MONTE CARLO.

RICARDO ANDREAS SAUERWEIN, MÁRIO JOSÉ DE OLIVEIRA
IFUSP

Algoritmos de Monte Carlo usuais são capazes de estimar qualquer grandeza que possa ser escrita na forma de média de alguma função de estado, entretanto este não é o caso da entropia ou da energia livre. É possível recorrer a métodos indiretos que envolvam a integração numérica dos dados obtidos na simulação de Monte Carlo ou métodos diretos que relacionam a entropia e a energia livre a quantidades que possam ser avaliadas na simulação. Neste trabalho usamos um novo método de Monte Carlo para calcular diretamente a entropia e a energia livre do modelo de Ising antiferromagnético submetido a um campo externo nas redes triangular e cúbica de face centrada (FCC). O antiferromagneto de Ising na rede triangular é conhecido por ser desordenado a qualquer temperatura e por ter entropia residual. Na presença de um campo externo H há uma fase ordenada ferrimagnética a baixa temperatura enquanto o campo for menor que seu valor crítico H_c . A temperatura nula este ponto é altamente degenerado apresentando, portanto, entropia residual. O antiferromagneto de Ising na rede FCC tem sido investigado intensivamente devido à sua relação com o ordenamento de ligas binárias como as de cobre e ouro. A campo nulo o sistema exibe uma transição de primeira ordem a temperatura não nula T_1 . Na presença de um campo H surgem três linhas de transição de primeira ordem que se encontram em um ponto triplo. Uma linha termina a temperatura nula e $H = 0$, enquanto as outras duas terminam a temperatura nula e campos críticos H_1 e H_2 . Nestes dois pontos terminais existe entropia residual.

SIMULAÇÃO MONTE CARLO DE FLUIDOS: ALGORÍTMO LINEAR COM O NÚMERO DE PARTÍCULAS

LUIZ FAUSTINO OLIVEIRA ROCHA
FFCLRP-USP

ANTONIO CALIRI, MARCO ANTONIO ALVES DA SILVA
FCFRP-USP

Métodos tradicionais em simulação Monte Carlo (MC), para calcular todas as interações de pares em um *ensemble* de N partículas, requerem um tempo real proporcional a N^2 . Recentes desenvolvimentos possibilitam um tempo proporcional a $N \ln N$ ou, ainda, a N . Neste trabalho, apresentamos uma nova alternativa para simulação MC de fluidos, cuja quantidade de trabalho requerido é proporcional a N . Nosso método utiliza um processo recursivo na determinação dos vizinhos de cada partícula, sendo de fácil implementação para diferentes dimensões. É feita uma generalização, para o contínuo, do conceito de *primeiros vizinhos* (v_1),

fixando um volume imaginário de raio ρ ao redor de cada partícula. As partículas dentro deste volume são classificadas como v_1 da partícula em seu centro. Após o movimento de cada partícula, os seus eventuais novos v_1 's são os v_1 's de seus v_1 's. Este método é útil para o estudo de fluidos densos e homogêneos. Para potenciais de curto alcance, ρ pode ser estabelecido em função do *cutoff*. Como uma aplicação do método, apresentamos os resultados para um sistema de esferas duras em $2 - D$. Em particular, calculamos a distribuição de distâncias, menores que ρ , entre pares de esferas e a frequência média de *primeiros vizinhos*.

On the non-concentric bicircular billiard in a magnetic field

VALDECIR MARVULLE
EFEI-ICI

RICARDO EGYDIO DE CARVALHO
UNESP - Rio Claro

We investigate the effect of the structure of a mixed (regular and chaotic) phase-space on the quantum process. This is done by studying a billiard with an annular domain bounded by two non-concentric circles. The free electrons case was presented in another work (Nuclear Physics A560 (1993) 197-200) and now we show the first results about the same billiard in a magnetic field.

TWO-DIMENSIONAL ELECTRON LIQUID AT ANY DEGENERACY

UMBELINO DE FREITAS

Departamento de Física, Universidade Federal da Paraíba,
João Pessoa, PB, 58051-970 Brasil

HAMILTON V. DA SILVEIRA, NELSON STUDART
Departamento de Física, Universidade Federal de São
Carlos, São Carlos, SP, 13565-905, Brasil

We have applied the dielectric formulation to the study of the two-dimensional electron gas through the full range of thermal degeneracy. The system is characterized by two dimensionless plasma parameters related to the interaction coupling and degeneracy in such a way that the formalism can describe the properties of electrons in two-dimensional semiconductor heterostructures and well electrons on the surface of helium films in an unified way. The interaction effects and quantum degeneracy effects are taken into account in the random phase approximation. The structure factor is expressed in terms of the non-interacting density-density correlation function which is now temperature dependent. We also calculate other quantities like the total energy and plasma oscillations.

Annealing Simulado para Contar**Automaticamente Núcleos de Condensação**

KLEITON DO CARMO MENDES, MURILO PEREIRA DE ALMEIDA
 UFC

É apresentado um algoritmo para contar gotículas de água no interior da câmara do CCNC (Cloud Condensation Nuclei Counter) iluminadas por um feixe de raio laser e vistas em uma imagem digitalizada. A imagem observada é uma matriz $Y = \{Y_{ij} : (i, j) \in \Lambda\}$, onde Y_{ij} é a intensidade no pixel (i, j) , que após um pré-processamento assume o valor 0 ou 1, e Λ uma janela finita do Z^2 .

O algoritmo busca uma configuração de discos $X = \{X_{ij} : (i, j) \in \Lambda\}$, onde X_{ij} é o raio do círculo centrado em (i, j) , que gera uma imagem $I = \{I_{ij} : (i, j) \in \Lambda\} = F(X)$, minimizando, através do "Annealing" Simulado uma energia que mede a disparidade entre Y e I bem como o número de colisões dos círculos em X e o próprio número de círculos.

A energia a ser minimizada é

$$E = \sum_{(i,j) \in \Lambda} \left\{ \alpha_D |Y_{ij} - \phi(I_{ij})| + \alpha_C \psi(I_{ij}) + \alpha_N \frac{1}{X_{ij}^2} \right\}$$

onde

$$\phi(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x = 0 \end{cases}$$

$$\psi(x) = \begin{cases} x - 1, & x \geq 1 \\ 0, & x = 0 \end{cases}$$

e α_D , α_C e α_N são constantes inversamente proporcionais à temperatura T que, vai sendo reduzida ao longo do processo iterativo do Annealing Simulado. São apresentados resultados experimentais obtidos

MONTE CARLO SIMULATION FOR FIRST ORDER TRANSITIONS: POTTS MODEL

PAULO MURILO CASTRO DE OLIVEIRA, SUZANA MARIA MOSS DE OLIVEIRA, CLAUDETTE ELISEA CORDEIRO

UFF

DIETRICH STAUFFER

UFF (permanent address: University of Cologne)

The finite size algorithm based on bulk and surface renormalization of de Oliveira (1992) is tested on q -state Potts models in dimensions $D = 2$ and 3 . Our Monte Carlo data clearly distinguish between first- and second-order phase transitions. Continuous- q analytic calculations performed for small lattices show a clear tendency of the magnetic exponent $\mathcal{Y} = D - \beta/\nu$ to reach a plateau for increasing values of q , which is consistent with the first-order transition value $\mathcal{Y} = D$. Monte Carlo data for larger lattices confirm this trend.

MODELO DE HUBBARD ESTENDIDO 1-D

DAISY MARIA LUZ, RAIMUNDO R. DOS SANTOS
 UFF

Resolvemos numericamente o modelo de Hubbard estendido 1D, incluindo o hopping correlacionado K .

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{i, \sigma} \left[-t + K(n_{i, -\sigma} n_{i+1, -\sigma}) \right] (c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + \text{H.c.}) \\ & + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \\ & + V \sum_i n_i n_{i+1} \end{aligned} \quad (2)$$

Este modelo possui uma solução exata, para $V = K = 0$, e queremos saber como a inclusão destes termos altera a física dos resultados já conhecidos. O hopping correlacionado K , pode ser visto como salto eletrônico entre dois sítios vizinhos i e j , dependente do número de ocupação destes sítios. Quando $K=t$, os processos do hopping tradicional e do hopping correlacionado interferem de tal forma que o número de sítios duplamente ocupados se conserva. Nestas condições temos a solução exata, proposta por R. Strack e D. Vollhardt (Phys. Rev. Lett. 70, 2637, 1993). Apresentaremos o diagrama de fases e as funções de correlação de carga, de spin, singlete e triplete supercondutor para diferentes valores de U, V, K .

FLUIDOS COMPLEXOS

Workshop: Problemas de Ancoramento em CL
(FCX) - 08/06/95

SURFACE PROPERTIES AND ANCHORING IN NEMATIC LIQUID CRYSTALS

G. BARBERO

Dipartimento di Fisica, Politecnico di Torino, Italy

We analyse the effect of a Langmuir-Blodgett (LB) multilayer on the surface properties of a nematic liquid crystal (NLC). We show that the easy axis of the LB-NLC interface coincides with the one of the LB-solid surface interface. On the contrary, the effective anchoring energy of the LB-NLC interface is lower than the one associated to the LB-solid substrate interface. We show in a first approximation that the anchoring energy characterizing the NLC may be separated into three contributions: one connected to the interaction between the LB film and the solid substrate, one due to the direct LB-NLC interaction and the other one having an elastic origin. Nevertheless, to be more precise one has to consider also the term associated to the interaction energy between NLC the substrate, which is screened by the LB film. The elastic contribution is of the order of the elastic constant of the LB film over the thickness of the multilayer. This quantity is estimated to be of the order of 10^{-2} - 10^{-1} erg/cm², as experimentally observed. Possible extensions of our model are also discussed.

Ancoragem em Mostradores de Cristal Líquido Nemático Torcido

ALAIDE PELLEGRINI MAMMANA

Laboratório de Mostradores de Informação - Instituto de Microeletrônica - Fundação Centro Tecnológico para Informática

O processo de alinhamento, responsável por estabelecer o ângulo de ancoragem e de torção molecular em mostradores de informação, é importante na determinação das características eletro-ópticas e da visibilidade destes dispositivos, afetando diretamente sua curva de transmissão óptica e seu contraste em função do ângulo de observação. Particularmente o ângulo de ancoragem (pretilt) influe na curva de transmissão em função da tensão aplicada ($T \times V$), alterando sua tensão de limiar e sua inclinação, com consequências diretas no contraste e nas taxas de multiplexagem em que os mostradores podem operar. Neste trabalho são discutidas estas questões, apresentando-se as técnicas e materiais mais comumente empregados na obtenção e tratamento da camada de alinhamento em LCDs-TN, bem como os métodos para determinação do ângulo de ancoragem. Discutem-se ainda os problemas normalmente enfrentados neste processamento e suas consequências na qualidade final dos dispositivos.

Fluidos Complexos (FCX) - 08/06/95

COMPUTER SIMULATIONS OF ELASTIC PROPERTIES OF NEMATIC LIQUID CRYSTALS.

LECH LONGA
CIFMC-UnB

We report NVT and NPT molecular dynamics simulations of a Gay-Berne nematic liquid crystal [1] using the generalization of an algorithm recently proposed by Toxvaerd [2]. On the basis of these simulations the Oseen-Zohrer-Frank elastic constants (bulk and surface) have been calculated *ab initio* from the direct pair correlation function. It was found that the values of the surface elastic constants are about an order of magnitude smaller than the bulk constants. Furthermore,

they differ by more than an order of magnitude from all previous calculations. The simulations also yield negative values for the surface constant K_{13} indicating on the possibility of surface instabilities in a thin, free standing Gay-Berne nematic liquid crystal.

[1] J. Stelzer, L. Longa and H. -R. Trebin, *J. Chem. Phys.*; in press.

[2] S. Toxvaerd, *Phys. Rev. E* 47, 343 (1993).

BOND ORIENTATIONAL ORDER IN CHIRAL LIQUID CRYSTALS

LECH LONGA
CIFMC-UnB

The structure of the Blue Fog is an unsolved problem of liquid crystal physics. Following the experiments of

Pierański *et al.* [1], where crystallites of the cubic Blue Phases of chiral liquid crystals were oriented by an electric field, we observe that the system possess a strong nonlinear dielectric susceptibility $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta}$ of cubic symmetry. The corresponding order parameter is thus a cubic bond-orientational tensor. Based on the free energy expansion which incorporates this tensor in addition to the standard alignment tensor field $Q_{\alpha\beta}(\mathbf{r})$, we have calculated the the temperature- chirality phase diagrams of the Blue Phases [2]. A possible structure of the Blue Fog that emerges from the calculations is that of a liquid with a cubic bond-orientational order, while any long-range spatial periodicity is absent. The transition from ordinary cubic Blue Phases to the Blue Fog is thus understood as a reduction of a cubic space group symmetry to its octahedral factor group.

[1] P. Pierański, P. E. Cladis, T. Garel and R. Barbet-Massin, *J. Phys. (Paris)* **47**, 139 (1986).

[2] L. Longa and H. -R. Trebin, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2757 (1993).

Fluidos Complexos (FCX) - 08/06/95

DEFORMAÇÕES SUPERFICIAIS EM NEMÁTICOS.

G. BARBERO

Politecnico di Torino, Itália

L. R. EVANGELISTA

UEM

S. PONTI

Politecnico di Torino, Itália

As contribuições da superfície à energia livre total de uma amostra líquido cristalina na fase nemática (CLN) provêm de duas fontes. Uma delas é a interação CLN-substrato e a outra é uma propriedade intrínseca do CLN, que pode ser devida à interação incompleta entre as moléculas, à variação espacial do parâmetro de ordem escalar e aos termos elásticos de volume que podem ser integrados à superfície. Esses últimos termos são $k_{24} \text{div}(\vec{n} \text{div} \vec{n} + \vec{n} \times \text{rot} \times \vec{n})$ e $\overline{k_{13}} \text{div}(\vec{n} \text{div} \vec{n})$, onde k_{24} é a constante elástica de "saddle-splay", $\overline{k_{13}}$ é a constante elástica de "splay-bend" efetiva e \vec{n} é o diretor. Enquanto que a natureza do primeiro termo é clara e não apresenta dificuldades para a abordagem variacional, a do segundo vem sendo objeto de amplos debates na literatura dos CLN. Em particular, discute-se a existência ou não de deformações superficiais ligadas ao segundo termo. Neste trabalho analisamos essa problemática desde um ponto de vista molecular. Apresentamos um modelo reticular para as interações intermoleculares responsáveis pela fase nemática. A análise

mostra que, no caso da lei de interação de Maier-Saupe ($\overline{k_{13}} = 0$), o perfil do diretor é descrito por uma função suave em toda a amostra. Para a lei de interação dipolo induzido-dipolo induzido ($\overline{k_{13}} \neq 0$) o perfil do diretor apresenta uma forte deformação nas vizinhanças da superfície. Demonstramos, assim, que a constante elástica de "splay-bend" efetiva é a responsável pela deformação superficial. Os resultados de nossos cálculos são comparados com teorias elásticas recentemente propostas para os CLN. Apresentamos, também, uma possível generalização do modelo para o caso de outras leis de interação intermolecular.

WALL'S LENGTH IN FREDERICKS TRANSITION

MANUEL SIMOES FILHO

Universidade Estadual de Londrina

L. R. EVANGELISTA, A. J. PALANGANA

Universidade Estadual de Maringá

We study the periodicity of the walls that appear in samples of Liquid Crystal when a magnetic field is applied perpendicularly to the director direction. We measured the dependence of this periodicity on the magnetic field and made a model to understand the experimental results. We shown that the square of the inverse of the length of the periodicity is proportional to the magnetic field, but also depends on the angle of the Fredericks transitions associated with the experiment.

Estudo da estabilidade dos modos orientacionais de DOBAMBC.

PAULO CESAR GOMES LEITE PITANGA

UFRJ

KLEBER CARLOS MUNDIM

UFBA

Nos Cristais líquidos ferroelétricos com superfície estabilizada (SSFLC), o acoplamento do campo magnético externo com a polarização espontânea, ocasiona uma rotação do diretor molecular usada na modulação da luz. As instabilidades eletrohidrodinâmicas induzidas pelo campo externo podem causar distorções na orientação do diretor molecular, produzindo como consequência distorções na transmissão da luz através da amostra. Portanto é interessante obter as condições de estabilidade do meio ótico formado pelo cristal líquido. No presente trabalho estudamos as condições de existência e estabilidade dos estados orientacionais, sob campo magnético externo, na fase C^* de DOBAMBC, um protótipo de cristal líquido ferroelétrico. Obtemos uma expressão para o tensor dielétrico em função do campo magnético externo, válida dentro dos limites da

aproximação linear. Mostramos a existência de um conjunto de estados termodinamicamente estáveis em uma pequena faixa de temperatura ($\Delta T = 1^\circ K$), situada entre a fase A e a fase C^* ordinária. Mostramos também a existência de estados caóticos para campo magnético da ordem de 87 % do campo de Lifshitz. Estes estados caóticos correspondem às soluções caóticas de um sistema hamiltoniano espacial com dois graus de liberdade. Com é bem sabido no regime caótico, as soluções são extremamente sensíveis às condições iniciais. Assim duas soluções correspondentes à condições iniciais infinitesimalmente próximas, comportam-se de modos completamente diferentes assintoticamente. Estas condições iniciais correspondem ao ancoramento da estrutura molecular. Concluimos que as dificuldades encontradas para um alinhamento uniforme, em SSFLC, para espessura de célula $d > 2\mu m$ é devido a existência de tais soluções caóticas. Assim o estudo do controle do caos hamiltoniano pode contribuir para a superação deste importante problema tecnológico.

PHYSICAL AND CHEMICAL CHAOS IN HOMOGENEOUS AND HETEROGENEOUS SYSTEMS: A BRIEF REVIEW

JOSÉ INÁCIO COTRIM VASCONCELLOS

Instituto de Física "Gleb Wataghin", Unicamp

A series of recent results on physical and chemical chaos in two-variable and three-variable homogeneous systems are considered as well as some homogeneous solution-phase reactions. In the two-variable systems we consider the Salkinik model, the Brusselator model, the FONI model and the Oregonator model. In three-variable, systems are concentrated on the Corrette-Taylor turbulence and some more general patterns in chemically pure systems. But a number of more complex patterns (9 patterns) in colloidal fluids are discussed showing the distributions of the disperse phase. We present also some new results of heterogeneous catalysis and inhomogeneous systems like Liesegang Rings and Turing Structures. Chaos in some biochemical systems (horseradish peroxidase reaction and in-

tercell systems, for example) are also briefly discussed. We summarize briefly the field giving an outline of the main lines of research today.

PARAMETRIZAÇÃO DA TURBULÊNCIA EM UM MODELO BIDIMENSIONAL DE NUVEM QUENTE

ALEXANDRE ARAÚJO COSTA, ANTÔNIO JOSÉ DA COSTA SAMPAIO

UFC

No presente trabalho, desenvolvemos um modelo numérico de uma nuvem quente. A simetria é axial, o que é adequado à simulação de nuvens isoladas e livres do efeito de cisalhamento. Para a solução das equações da dinâmica, é definida uma vorticidade e uma função de corrente. A equação diferencial parcial elíptica que as relaciona é resolvida mediante um procedimento fortemente implícito. Na avaliação da advecção, utilizamos uma interpolação semi-lagrangeana cubic spline. A turbulência é assumida como isotrópica e é parametrizada segundo a definição de um coeficiente de difusão turbulenta. Os processos microfísicos, pelos quais as gotículas de nuvem se convertem em água precipitável, são avaliados levando-se em conta os termos de autoconversão e coleta. São mostrados os resultados relativos a várias simulações, através das quais fica evidenciada a importância da turbulência, e, particularmente, da magnitude do coeficiente de difusão turbulenta. Demonstra-se que variando-se este coeficiente, altera-se sensivelmente a evolução da nuvem, especificamente com respeito aos valores de velocidade vertical e de taxa de precipitação.

Workshop: Técnicas Fototérmicas em Fluidos Complexos (FCX) - 09/06/95

Thermal Lens Spectrometry: New Perspectives of Application in Liquid Cristal.

M. L. BAESSO, A. C. BENTO, L. R. EVANGELISTA, A. J. PALANGANA

Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá.

Thermal lens spectrometry (TLS) is a transient technique which has been increasingly used to investigate the thermal transport properties of transparent materials. The TL effect is created when the excitation laser beam passes through the sample and the absorbed energy is converted into heat, changing the optical path length and producing a lens-like optical element. The propagation of a probe beam laser through the TL will result in either a spreading or a focusing of the beam center. The two beam mode mismatched TLS is a configuration arranged to have different spot sizes for the two laser beams at the sample. A recently developed aberrant model provides a simple analytical expression for absolute measurements of both optical and thermal properties. Earlier experiments with TL in liquid cristal (LC) were performed with single beam or mode matched configurations, which are much less sensitive than the mode mismatched, being necessary to introduce dyes to the samples in order to improve the

optical absorption, and therefore obtain a detectable TL signal. The TL in LC can produce either laser beam self-focusing or defocusing, depending on the anisotropic behaviour of the sample. The refractive index dependence on laser intensity is associated with Kerr effect, electrostriction, non linear electronic polarization and thermal heating, and each one of these effects can be investigated varying the time scales for the experiments. In this work, we have studied a nematic LC by using the mode mismatched TL configuration. The high sensitivity of this configuration allowed the experiment to be performed without addition of dyes to the sample. An Argon laser was used as the excitation beam (514.5 nm) and a Helion Neon laser (632.8 nm) as the probe beam. The sample was aligned for 4 hours in a magnetic field (8 KGauss) and the excitation beam was polarized in parallel to the liquid crystal director. As a preliminary result the thermal diffusivity of the sample is reported. The perspective of using thermal lens measurements in the investigation of LC non linear behaviour will be discussed.

HIDRODINÂMICA DO PROCESSO DE OSMOSSEDIMENTAÇÃO

CAMILO RODRIGUES NETO, MÁRIO ALBERTO TENAN
UNICAMP

Métodos de sedimentação e centrifugação são importantes métodos de separação, com muitas aplicações em laboratórios e na indústria. Dentre esses métodos encontra-se o da osmosedimentação, que conjuga os efeitos osmóticos de uma membrana semipermeável aos da centrifugação. O propósito desse trabalho é fazer uma análise teórica desse processo e mostrar a influência dos parâmetros característicos do sistema na velocidade de sedimentação. A interação entre a difusão e o movimento macroscópico do fluido é levada em conta através das equações que relacionam as forças termodinâmicas de não equilíbrio e os fluxos. Considerando-se o sistema como uma mistura binária e viscosa (newtoniana), propõe-se um modelo para o processo de osmosedimentação baseado nas equações de balanço de massa e de quantidade de movimento, com apropriadas condições de contorno e iniciais. A solução das equações mostra que é possível obter (i) uma descrição hidrodinâmica da circulação do fluido em cada semicela e (ii) informações úteis sobre a influência que o coeficiente de difusão, a permeabilidade da membrana e a largura da cela podem ter no processo de sedimentação do soluto.

Fluidos Complexos (FCX) - 09/06/95

Automatização da Técnica de Espectroscopia de Deflexão Fototérmica para estudo e caracterização de ferrofluidos.

ENIO RIBEIRO SALLES, SUHAILA MALUF SHIBLI
Instituto de Física da USP - Departamento de Física Experimental

Este trabalho tem por objetivo implementar a técnica experimental de espectroscopia de deflexão fototérmica para estudo e caracterização de ferrofluidos, cristais líquidos e ferronemáticos. A técnica se resume na incidência de um feixe de luz monocromático pulsado na amostra, que converterá a energia absorvida em energia térmica. Isso acarretará uma variação do índice de refração na amostra e na sua superfície (efeito miragem). Determinaremos essa variação através de um feixe de teste que será desviado nessa região de interface e relacionaremos esse desvio com o coeficiente de absorção do material. O nosso trabalho é fazer com que todo o processo de controle da experiência, aquisição e tratamento de dados seja automatizado, para tanto utilizaremos o seguinte conjunto de equipamentos: - Fotodiodo detector de posição: detecta a variação de posição do feixe

de teste, tanto na vertical como na horizontal, transmitindo essas informações para a eletrônica associada. - Eletrônica do fotodiodo: alimenta o fotodiodo com tensão de 15V e recebe os sinais do fotodiodo fazendo a interface entre o fotodiodo e o lock-in; nela podemos escolher se mandaremos o sinal de $V(x)$ (variação horizontal) ou $V(y)$ (variação vertical) para o Lock-in. - Fonte, lâmpada de Arco de Xenônio e lentes: conjunto que fornece um feixe de luz branca de alta potência (75W inicialmente) para o monocromador. - Monocromador: seleciona o comprimento de onda da luz que incidiremos na amostra. - Chopper: modula a luz na forma de pulsos contínuos com frequência pré-determinada. - Lock-in: interpreta o sinal de variação de posição vindo da eletrônica do fotodiodo; controla o Chopper através de uma sinal de tensão variável; eventualmente usaremos uma entrada analógica para aquisições em tempo real. - Computador: será usado para realizar a aquisição dos dados e o controle de todos os equipamentos, além de analisar e representar os dados recebidos. Podemos assim, programá-lo para aquisições com variação de todos os parâmetros envolvidos (automatização total).

Síntese de Novos Fluidos Magnéticos a base de Ferrita de Níquel e Ferrita de Cobre.

F. A. TOURINHO, M. H. SOUSA, L. G. MACEDO, P. C. MORAIS
UnB

Fluidos magnéticos são suspensões coloidais de partículas magnéticas (ferritas do tipo espinélio) dispersas estericamente em meios não aquosos ou eletrostaticamente em água. Este novo material, líquido e magnético ao mesmo tempo, é atualmente empregado em inúmeras tecnologias de ponta, na pesquisa em física e mais recentemente na biomedicina. Em cada caso de aplicação contudo é necessário sintetizar um fluido magnético particular, com propriedades e comportamento bem definidos - concentração, tipo de ferrita, natureza do lido carreador, tamanho do grão. Enfim, o domínio da síntese de fluidos magnéticos é fundamental para o sucesso no estudo de suas propriedades e aplicações. Nós apresentamos neste trabalho a síntese de dois novos fluidos magnéticos a base de ferrita de níquel e de ferrita de cobre, ainda não citados na literatura. As partículas de ferrita são obtidas por coprecipitação de uma mistura de sais de Cu(II) ou Ni(II) e Fe(III) em meio alcalino e em seguida peptizadas em meio ácido ou alcalino. As partículas sintetizadas são aproximadamente esféricas e polidispersas com uma distribuição em tamanho do tipo log-normal. O tamanho das partículas (3 - 30nm) depende de parâmetros ajustáveis durante a coprecipitação: - Concentração dos cátions - Natureza do meio alcalino - pH e temperatura Os novos fluidos magnéticos assim obtidos podem atingir altas concentrações de até 25% em fração de volume.

Fluidos Complexos (FCX) - 09/06/95

Estudo da variação da Força iônica em Fluidos Magnéticos por Ressonância Paramagnética Eletrônica.

PAULO CESAR DE MORAIS, F. A. TOURINHO
UnB
G. R. R. GONÇALVES, F. PELEGRINI
UFGO

Ressonância magnética é a técnica utilizada neste trabalho para estudar o efeito da força iônica em fluidos magnéticos iônicos. A largura de linha de ressonância magnética é sensível a variação da força iônica do sistema, dentro do limite de estabilidade do fluido. A técnica de ressonância magnética tem sido utilizada com sucesso para o estudo de interações elétricas e magnéticas entre nanopartículas componentes dos fluidos magnéticos. A análise dos resultados experimentais tem sido feita com a utilização do método dos mo-

mentos de Van Vleck, considerando a interação dipolar como o principal mecanismo para a determinação da largura de linha de ressonância. Amostras de um fluido magnético à base de ferritas de manganês foram preparadas, com forças iônicas crescentes, porém, mantendo a mesma concentração de partículas no meio. Mudanças na largura de linha de ressonância, à temperatura ambiente, são analisadas como sendo decorrentes de mudanças no raio hidrodinâmico das partículas. O raio hidrodinâmico altera-se em virtude de modificações na densidade de carga superficial das partículas magnéticas. Os processos de carga e descarga e de modificação da partícula, devido a alterações na força iônica do fluido, são discutidos neste trabalho.

METAMORFOSE TOPOLÓGICA EM DIAGRAMAS DE FASE DE CRISTAIS LÍQUIDOS LIOTRÓPICOS

P. TOLÉDANO
ESPCI - Paris (França)
A. M. FIGUEIREDO NETO
IFUSP

A mudança na forma de micelas biaxiais influencia sobremaneira as características dos diagramas de fase de sistemas liotrópicos nemáticos e colestericos. O modelo usual para as transições nemática-nemática necessita ser completado^[1], considerando-se um parâmetro de ordem adicional não crítico, que exprima a mudança na forma das micelas e produza a metamorfose topológica do diagrama de fases usual. Essa transformação resulta em uma drástica reestruturação do diagrama de fases. Os processos de ordenamento e deformação micelares estão associadas a dois parâmetros de ordem: um parâmetro de ordem de dimensão 6, correspondendo a um tensor de segunda ordem e traço não nulo, e um parâmetro de ordem escalar. O modelo usual que não considera a modificação da anisotropia das micelas em função da temperatura, não permite a obtenção da fase isotrópica a baixas temperaturas, encontrada nos diagramas de fase dos liotrópicos. Apenas um ponto de Landau é previsto pela teoria, no encontro das duas linhas de transição nemática-nemática (da 2ª ordem) com a linha de transição nemática-isotrópica (de 1ª ordem). Quando nos afastamos do ponto de Landau, as duas linhas de segunda ordem se separam e não voltam a se encontrar. A introdução do parâmetro de ordem escalar (levando-se em conta também que o tensor do parâmetro de ordem não pode ter traço nulo no caso dos liotrópicos) possibilita a metamorfose topológica do diagrama de fases, de modo que as duas linhas de transição de segunda ordem voltem a ser encontrar num segundo ponto de Landau a baixas temperaturas. Dessa

forma, a transição nemática-isotrópica a baixas temperaturas aparece naturalmente. [1] P. Tolédano and A.M. Figueiredo Neto, Phys. Rev. Lett. 73, 2216-2219 (1994). Apoio financeiro: FAPESP

PROCESSOS DE ORIENTAÇÃO NA INTERFACE DE UM CRISTAL LÍQUIDO LIOTRÓPICO NAS FASES NEMÁTICAS UNIAXIAL E BIAXIAL

ROZANE DE FÁTIMA TURCHIELLO, ELISABETH ANDREOLI DE OLIVEIRA
USP

Investigamos o processo de orientação superficial, induzido por um campo magnético, em um cristal líquido liotrópico nas fases nemáticas uniaxial (N_C) e biaxial (N_{BX}). Através da medida de transmitância da amostra entre polarizadores determinamos o tempo característico do processo de orientação superficial τ_s e observamos que τ_s tem uma dependência linear com a temperatura T em ambas as fases nemáticas. Os resultados obtidos demonstram que o modelo proposto, que prevê o deslizamento do diretor na superfície de contorno, pode ser aplicado ainda na fase N_{BX} , embora já não seja mais válido na região próxima à transição para a fase nemática discótica (N_D).

Observamos ainda, que na fase N_{BX} , $\Delta\tau_s/\Delta T$ é cerca de 5 vezes maior que na fase N_C , e que essa razão tende a um valor constante para campos magnéticos mais intensos. A estrutura microscópica na interface também é influenciada pela temperatura, intensidade do campo magnético e concentração relativa dos componentes da mistura liotrópica. Na fase N_C , observamos que a área ocupada pelos agregados anfífilos, para uma dada temperatura, aumenta bastante para campos magnéticos bastante intensos.

BIRREFRINGÊNCIA INDUZIDA POR FLUXO EM MISTURAS LIOTRÓPICAS NA FASE ISOTRÓPICA.

PAULO RICARDO GARCIA FERNANDES, ANTÔNIO MARTINS FIGUEIREDO NETO
IF-USP

A partir de medidas de transmitância da amostra em função do tempo, determinamos a birrefringência (δn) induzida na fase isotrópica de um cristal líquido liotrópico. As mesofases são misturas de Laurato de potássio, decanol e água. Elas apresentam transições LAM (8,5 °C) ISO (47,9 °C) LAM, onde LAM e ISO são fases lamelar e isotrópica, respectivamente. A mistura é colocada numa cubeta de quartzo com dimensões

$a=1$ cm, $b=1$ cm e $c=2$ cm. Os eixos de referência do laboratório são definidos como: x , y e z paralelos a a , b e c , respectivamente. A amostra é colocada num sistema com temperatura controlada ($\approx 0,5$ °C) fixado numa mesa óptica. Uma placa de aço com dimensões $a' = 0,8$ cm, $b' = 0,1$ cm e $c' = 0,8$ cm, com $a' \parallel a$, $b' \parallel b$ e $c' \parallel c$, é colocada no interior da cubeta. Um campo magnético ($H \approx 200$ G) mantém a placa no plano xz ($y=0$). Quando o campo é desligado, a placa cai mantendo sua superfície no plano xz . O movimento da placa ao longo da direção z ($\delta z \approx 0,2$ mm) produz um cisalhamento no cristal líquido em contato com a mesma. Um feixe de laser (He-Ne, $\lambda = 6328$ Å) é posicionado na direção x (eixo de polarização a 45° segundo a direção z) tangenciando a superfície da placa de aço. A luz transmitida pela amostra, durante todo o processo, é detectada por um fotodiodo após passar pelo analisador (eixo de polarização a 90° do eixo do polarizador). Os gradientes de velocidades, gerados pelo movimento da placa induz uma birrefringência por fluxo. Quando o fluxo cessa, o vetor diretor relaxa e a amostra retorna à fase isotrópica. Para obter os tempos característicos (τ) ajustamos uma função do tipo exponencial. A viscosidade da amostra foi medida utilizando um reômetro Brookfield (cone e placa). Seus valores divergem próximo às transições isotrópico-lamelar. No meio da fase isotrópica, a viscosidade apresenta um comportamento monotonicamente crescente. O aumento de τ próximo às transições é um indicativo de maior correlação intermicelar nesta região. Um aumento de τ também foi verificado próximo a 24 °C. Este máximo em τ no meio da fase isotrópica pode indicar a existência de uma fase nemática virtual⁽¹⁾ (VNP). (1)P.R.G.Fernandes and A.M.Figueiredo Neto, Physical Review E, 51,N.1, p. 567 (1995).

Anomalous Diffusion in Gel Networks

PEDRO LICINIO
Depto. Física - ICEx - UFMG

Polymeric gels can be prepared at low densities, forming a single, macroscopic network, as a complex spiderweb. Dynamics in such media is poorly known, in contrast to single polymers where internal modes have long been modeled. We present measurements of dynamics in PMMA (PolyMethylMetaAcrylate) gels in dioxane solvent taken with photon correlation techniques. These light scattering experiments clearly show non-exponential decays. Correlogram analysis reveal a slow power-law decay at large times, persisting after collective diffusion has died out. We interpret these results as coming from anomalous sub-diffusion due to network constraints. Theory has shown that this process could be detected provided some polydispersity is present. We have also performed Brownian dynamics simulations in order to test our hypothesis. Under model simplifications, we obtain qualitative agreement,

and prove that anomalous self-diffusion is indeed a feature of gel network dynamics.

Fluidos Complexos (FCX) - 09/06/95

DEFEITOS DE SUPERFÍCIE E FORÇAS EM AMOSTRAS NEMÁTICAS LIMITADAS

FABIANO C. CARDOSO, L. R. EVANGELISTA

Universidade Estadual de Maringá

Uma amostra nemática limitada por duas superfícies planas é considerada. Na ausência de campos externos e distorções volumétricas, a orientação molecular média de um meio nemático, descrita pelo diretor \vec{n} , tende a acompanhar a direção imposta pelo tratamento superficial (direção fácil). As superfícies que aqui consideramos são caracterizadas por direções fáceis diferentes (Φ_1 e Φ_2) e são arranjadas em diversas situações de interesse experimental. Fazendo uso de um modelo teórico recentemente proposto^[1] nós investigamos o comportamento das paredes de orientação induzidas no sistema a partir das inhomogeneidades superficiais. Em particular, calculamos a força entre os defeitos superficiais e determinamos o seu comportamento em função da defasagem entre as superfícies, que caracterizam o arranjo experimental. Analisamos o comportamento do sistema na presença de um campo externo aplicado perpendicularmente às superfícies da amostra. Finalmente, analisamos os limites para detecção experimental das paredes e discutimos a mensurabilidade dessas forças.

[1] L.R. Evangelista e G. Barbero, Phys. Rev. **E48**, 1163(1993); **E50**, 2120(1994)

ANCHORING STRENGTH OF A LYOTROPIC NEMATIC LIQUID CRYSTAL

A. M. RIBAS, L. R. EVANGELISTA, A. J.

PALANGANA

Universidade Estadual de Maringá

E. A. OLIVEIRA

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

Surface effects are widely used to obtain uniform orientation of liquid crystal films either for physical investigations or technological applications. The main feature of the surface treatment is to produce an easy axis \vec{n}_0 , along which the molecules tend to align. In analogy to Mayer-Saupe theory, the form of the anisotropic surface energy proposed by Rapini and Papoular is given: $F_s = \frac{1}{2}W(\vec{n}_0 \cdot \vec{n})^2$ where \vec{n} is the director and W is the anchoring strength. For dimensional reasons the anchoring strength is characterized by the extrapolation length $L = K/W$, where K is a curvature elastic constant. The purpose of this work is to evaluate the

anchoring strength of a nematic lyotropic liquid crystal in the calamitic nematic phase with glass boundary surfaces. The sample holder is a microslide $200\mu\text{m}$ thick (Vitro Dinamics) whose inner surfaces present some grooves introducing an easy axis. The technique used is based on the determination of the critical magnetic field for a Frederiks transition. The values determined are $W \cong 10^{-3}\text{erg/cm}^2$ and the extrapolation length $L \cong 6\mu\text{m}$. These results obtained are in the range of the values reported in literature for thermotropic liquid crystals.

ESTUDO DA VARIAÇÃO DO COEFICIENTE BETA EM UM DIAGRAMA DE FASES E DOPAGEM DE CRISTAIS LÍQUIDOS COM POLÍMEROS

LEILA THOMAZELLI THIEGHI, SUHAILA MALUF

SHIBLI, ANTONIO MARTINS FIGUEIREDO NETO

Instituto de Física da USP

Este trabalho tem como primeira etapa a verificação de uma possível variação do expoente crítico do parâmetro de ordem (β) ao longo de um diagrama de fases de um cristal líquido liotrópico composto de laurato de potássio (27,20% wt), decanol (7,10% wt) e água (65,70% wt). Partimos de uma composição que apresenta somente a fase nemática-calamítica e variando a composição da água e do laurato de potássio chegamos em uma fase nemática-discótica, obtendo valores de β nas regiões onde a fase nemática-biaxial aparecia através de medidas de birrefringência óptica. Verificamos que com o aumento de água os valores de β evoluem de 0,38 para 0,50.

Numa segunda etapa, realizamos a dopagem destes cristais com polímeros. Já foi observado que o aumento gradativo da concentração de poli-etileno-glicol [PEG]^[1] nestes cristais provoca uma evolução da fase inicial nemática-calamítica para uma transição biaxial-reentrante e daí para uma fase nemática-discótica. Notamos também que o β evoluía de 0,38 para 0,50 com o acréscimo de PEG, e quando já era 0,50 sem PEG permanecia assim^[1]. Acreditamos que as transições de fase nemática-calamítica para nemática-discótica, que ocorrem com o

acréscimo de PEG, podem ser causadas pelo fato de o PEG ter um radical (OH) em sua estrutura, o que faz com que estas transições ocorram. Para verificarmos isto tomaremos cristais líquidos liotrópicos com composições na fase nemática-calamítica e faremos dopagens com polímeros diferentes, no caso álcool-poli-vinílico (PVA) e óxido de poli-etileno (PEO), sendo que o primeiro tem o radical

(OH) e o segundo não. Ainda, apresentaremos os resultados das dopagens com PEG, PVA e PEO e faremos comparações entre estes resultados^[1].

[1] L.T.Thieghi, "Phase transitions induced by a polymer on the lyotropic liquid films", apresentado na Con-

ference on Complex Fluids, Universidade de Brasília (1994).

DETERMINAÇÃO DE ENERGIA DE ANCORAMENTO PARA CRISTAIS LÍQUIDOS LIOTRÓPICOS EM SUPERFÍCIES DE VIDRO

VIVIANE MORAES ALVES, ELISABETH ANDREOLI DE OLIVEIRA
USP

O objetivo deste trabalho é a determinação da energia de ancoramento W em cristais líquidos liotrópicos utilizando-se porta-amostras (microslides comercialmente disponíveis) de diferentes dimensões. O cristal líquido é introduzido através de fluxo nos microslides, o que resulta em uma orientação preferencial ao longo da direção de escoamento do líquido. Um campo magnético intenso é aplicado nessa mesma direção para se garantir essa orientação. A experiência consiste em aplicarmos campos magnéticos H de diferentes intensidades na direção perpendicular à da orientação inicial, o que provoca uma deformação periódica na amostra, que, quando observada em microscópio de luz polarizada nos permite medir o passo d dessa deformação. Admitindo um ancoramento fraco na superfície, é possível determinar a energia de ancoramento W através de valores de d^{-2} e H . Para microslides de $100\mu\text{m}$ de espessura por 1mm de largura encontramos uma energia de ancoramento W da ordem de 10^{-3} erg/cm². Estamos ainda investigando o valor dessa energia W para microslides de $400\mu\text{m} \times 4\text{mm}$, onde supõe-se um ancoramento mais fraco, pois sua superfície interna é lisa, enquanto que microslides de $100\mu\text{m} \times 1\text{mm}$ apresentam superfície interna rugosa.

COMPORTAMENTO TERMOTRÓPICO DO FOSFOLIPÍDEO DMPG EM ÁGUA

ALESSANDRA MENDONÇA CARDOSO, ELISABETH ANDREOLI DE OLIVEIRA
Instituto de Física - USP

Neste trabalho utilizamos técnicas ópticas e de radiocristalografia para investigar algumas propriedades da mistura do fosfolipídeo dimiristoil-fosfatidilglicerol (DMPG) em água. Esse fosfolipídeo quando diluído em água organiza-se em membranas e formam vesículas, sendo que a espessura da bicamada é da ordem de 45Å [1].

Preparamos amostras com concentrações de 1, 10 e 70mM , que apresentam-se opticamente isotrópicas no intervalo de temperatura entre 12 e 37°C . Para temperaturas entre 20 e 24°C há um grande aumento de viscosidade e a amostra com concentração 70mM apresenta o fenômeno de birrefringência induzida por fluxo bastante intenso, o que indica uma ordem orientacional

induzida por fluxo. A distância média entre vesículas ($c/T = 22^\circ\text{C}$ e concentração 70mM) obtida através de difração de raios X é da ordem de 60Å , demonstrando a proximidade entre as vesículas. Estão sendo feitos experimentos para determinação da viscosidade em função da temperatura e do comprimento de difusão, que permitirão uma maior compreensão das propriedades físicas desse sistema.

[1] I. Pascher, M. Lundmark, P.G. Nyholm and S. Sundell, *Bioch. e Biophysica Acta* **1113**, 339 (1992).

ESTUDO DE FERROFLUIDOS E FERRONEMÁTICOS ATRAVÉS DA TÉCNICA DE ESPECTROSCOPIA DE DEFLEXÃO FOTOTÉRMICA

SUELENE DA SILVA, ENIO RIBEIRO SALLES, MARCELO AMÉRICO PATTA, SUHAILA MALUF SHIBLI
Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Espectroscopia Fototérmica é uma técnica versátil, pois permite o estudo de um vasto intervalo de coeficientes de absorção em diversos tipos de materiais. Isto ocorre devido à absorção do feixe opticamente excitado provocar uma mudança no índice de refração da região da amostra opticamente aquecida. Vários tipos de geometria podem ser utilizados na montagem dos equipamentos, a escolha dependerá do material a ser analisado e do detector a ser utilizado. No caso dos ferronemáticos, que são transparentes, e dos ferrofluidos, que são materiais muito absorventes, a geometria mais adequada será a que nos fornece o conhecido "efeito Miragem". Neste trabalho o objetivo é apresentar e discutir o sistema de fototérmica que está sendo montado no GRUPO DE ÓPTICA DE CRISTAIS LÍQUIDOS DO IFUSP.

Neste sistema a luz de uma lâmpada de Xenônio, que emite um feixe pulsado, é focalizada de maneira a passar por um monocromador. Para modular o citado feixe um "chopper" mecânico é utilizado, e então, este feixe é focalizado sobre a amostra. O efeito que a incidência deste feixe provoca na superfície da amostra é verificado através de um feixe de prova, proveniente de um laser de He-Ne de 5mW . Para determinar a amplitude e a fase de deflexão do feixe de prova usamos um fotodiodo detector de posição, que está acoplado a um amplificador "lock-in". A tomada e análise dos dados experimentais é feita através de um microcomputador. A varredura do monocromador, em comprimento de onda, é feita por um motor de passo que também é controlado pelo microcomputador. A configuração deste sistema poderá ser alterada conforme o material a ser analisado. Estas alterações serão apresentadas e discutidas. Este projeto conta com o apoio da FAPESP (projeto 94/3657-8).

ESTUDO DA BIRREFRINGÊNCIA INDUZIDA EM MISTURAS REVERSAS DE AOT/DOT/H₂O

MÁRCIA MAGALHÃES, ANTONIO MARTINS
FIGUEIREDO NETO
Instituto de Física da USP

Muitos materiais termotrópicos na fase isotrópica apresentam birrefringência induzida em torno da temperatura de transição. Este efeito já foi observado e estudado em misturas liotrópicas com estruturas diretas (micelas cujo interior contém a parte apolar do anfifílico) de laurato de potássio/1-decanol/H₂O. Verificamos que este efeito surge também, em misturas liotrópicas com estruturas reversas (micelas formadas por anfifílicos que têm a parte polar voltada para o seu interior) de AOT (di (2-etilhexil) sulfossuccinato de sódio)/DOD (1-dodecanol)/H₂O, com concentrações relativas (16,59/64,03/19,38% molar). Determinamos o tempo de relaxação para esta mistura através da transmitância de luz laser. Esta experiência consiste em deslizar uma placa no interior de uma cubeta de quartzo contendo a amostra, enquanto um feixe de luz laser atravessa a cubeta e atinge um fotodiodo. A cubeta se localiza entre dois polarizadores cruzados. Verificamos através do ajuste de funções exponenciais à transmitância de luz em função do tempo, a existência de dois tempos de relaxação: $\tau_1 = 19s$ e $\tau_2 = 88s$. Observamos que estes tempos são 10^3 vezes maiores para micelas reversas que para as diretas. Experiências de difração de raios X, em andamento, devem revelar qual a origem dos dois tempos de relaxação obtidos. Estes tempos podem estar relacionados com efeitos de superfície, volume ou rotações das micelas.

Apoio financeiro CNPq - RHAÉ

**ESTUDO DA REVERSIBILIDADE DA
BIRREFRINGÊNCIA DE FERROFLUIDOS
IÔNICOS EM FUNÇÃO DO CAMPO
MAGNÉTICO.**

CELSO YUJI MATUO, ANTONIO MARTINS
FIGUEIREDO NETO
Instituto de Física da USP

Neste trabalho são estudadas amostras de ferrofluido iônico de Maguemita, utilizando dois tipos de porta-amostras. Utilizamos uma cubeta de quartzo de 10mm de caminho óptico e outra de 5mm de caminho óptico. Utilizando um modulador fotoelástico foram realizadas medidas de birrefringência em função do campo magnético da amostra de ferrofluido iônico de Maguemita utilizando as duas cubetas. Essas medidas foram realizadas de duas formas. Na primeira foram feitas medidas de birrefringência com campos crescentes, iniciando com campo nulo, até atingirmos campos da ordem de 500G. Em seguida, a partir deste valor de campo magnético, foram feitas medidas de birrefringência com campos decrescentes, até finalizarmos com campo nulo. Foi verificado que sistematicamente o valor da birrefringência para campos decrescentes não retorna ao seu valor inicial a campo nulo. Foi verifi-

cado também que utilizando uma amostra de ferrofluido que já havia sido submetida a campo magnético na cubeta com caminho óptico de 10mm, o valor medido da birrefringência a campo nulo é menor do que o valor medido utilizando uma amostra que nunca havia sido submetida a campo magnético na cubeta com caminho óptico de 5mm. Neste trabalho foi estudada também o comportamento da birrefringência a campo nulo em função da concentração de ferrofluidos surfactados. Foi verificado que o valor da birrefringência a campo nulo para este tipo de ferrofluido não se altera com a sua concentração.

Apoio financeiro: FAPESP

**Ressonância Magnética em Nanopartículas e
Pequenos Aglomerados.**

PAULO CESAR DE MORAIS, MARIA CRISTINA F. L.
E LARA, FRANCISCO AUGUSTO TOURINHO
UnB

Propriedades magnéticas de nanopartículas e pequenos aglomerados tem atraído a atenção da comunidade de magnetismo por várias décadas. O interesse em tais sistemas vai desde a proposição de modelos teóricos bastante sofisticado até uma gama bastante variada de aplicações tecnológicas. No presente trabalho resultados obtidos por ressonância magnética serão apresentados para ambos os casos, isto é, nanopartículas magnéticas monodispersas em uma matrix dielétrica e aglomerados constituídos das mesmas partículas. Do ponto de vista experimental serão analisadas as variações das larguras de linha de ressonância magnética com a temperatura para dois casos de sistemas. Os resultados experimentais para partículas monodispersas serão tratados como decorrentes primariamente de interação dipolar, de acordo com o método dos momentos de Van Vleck. Para os aglomerados, os resultados experimentais serão tratados dentro de um modelo que considera a presença de ondas de spin no aglomerado. Os dois limites serão discutidos e comparados com os resultados experimentais.

**Efeito do tamanho de Nanopartículas sobre a
Anisotropia Magnetocristalina.**

A. F. BAKUZIS, P. C. MORAIS, F. A. TOURINHO
UnB

A característica marcante de sistemas mesoscópicos é a forte dependência de muitas de suas propriedades físicas em relação às suas dimensões. Em particular, os fluidos magnéticos são compostos de nanopartículas, monodômios magnéticos, suspensas em um fluido carreador, que tanto pode ser uma matrix polar quanto uma matrix apolar. A anisotropia magnetocristalina das nanopartículas é uma das propriedades de maior relevância para os fluidos magnéticos. Isto está lig-

ado diretamente à enorme variedade de aplicações tecnológicas, em sua maioria dependentes de valores elevados para a anisotropia magnetocristalina. A dependência da anisotropia magnetocristalina com o diâmetro das partículas tem sido motivo de controvérsias, em parte devido à ausência de resultados experimentais confiáveis. Neste trabalho estaremos apresentando evidências da dependência da constante de anisotropia magnética em função do diâmetro de partículas de ferritas de manganês em fluidos magnéticos iônicos. Amostras contendo partículas de diferentes diâmetros foram estudadas por ressonância magnética a baixas temperaturas. A determinação da constante de anisotropia magnética pode ser obtida por medidas de variação angular.

Utilização de Sondas Paramagnéticas para o estudo de Fluidos Magnéticos

GERALDO JOSÉ DA SILVA, PAULO CESAR MORAIS,
MARIA CRISTINA F. L. E LARA, FRANCISCO
AUGUSTO TOURINHO
UnB

Fluidos magnéticos são sistemas compostos de nanopartículas, monodomínios magnéticos, dispersas em um fluido carreador e estabilizadas contra aglomeração. O fluido carreador pode ser de natureza polar ou apolar, sendo portanto diferentes os processos de estabilização do sistema. Sondas paramagnéticas de metais de transição do tipo Fe(3+), Co(2+) e Cu(2+) são utilizadas para estudar o campo magnético na vizinhança de partículas finas em fluidos magnéticos à base de ferritas de cobalto. A posição das linhas de ressonância paramagnética de metais de transição utilizados como sondas são sensíveis ao tamanho médio das partículas do fluido magnético. Estudos de variação angular das linhas de ressonância das sondas paramagnéticas, em presença do fluido magnético, a exemplo da anisotropia magnetocristalina. Tais estudos são realizados a baixas temperaturas com o sistema congelado em presença de campos magnéticos elevados.

ESTUDO COMPARATIVO DOS DIAGRAMAS DE FASES DAS MISTURAS BINÁRIAS AMÔNIO PENTADEC AFLUORO OCTANOATO/ÁGUA (APFO/H₂O) E AMÔNIO PENTADEC AFLUORO OCTANOATO/ÁGUA DEUTERADA (APFO/D₂O)

GERSON R. OURIQUES, RENE B. SANDER
UFSC

Estudamos comparativamente o comportamento das fases e a topologia dos diagramas de fases da mistura binária do surfactante APFO com água deuterada e com água tridestilada. É idéia geral na comu-

nidade científica que a substituição de água por água deuterada não provoca qualquer alteração na topologia e nas temperaturas de transição das fases líquido cristalinas. Entretanto, constatamos que existe uma diferença crucial quando água comum (tridestilada) é substituída pela água deuterada. Qualitativamente estes diagramas de fases podem ser considerados idênticos pois mostram duas fases líquido cristalinas estáveis, a nemática e a lamelar, que estão intercaladas entre uma fase isotrópica a altas temperaturas e a fase sólida a baixas temperaturas. Quantitativamente os diagramas não são idênticos: as temperaturas das transições de fase variam de até 10 graus centígrados ao longo da linha de transição Isotrópico/Nemático e Nemático/Lamelar. Apoio Financeiro: Funpesquisa-UFSC

DISPERSE AND LIQUID CRYSTALLINE PHASES IN THE TERNARY SYSTEM AMMONIUM PENTADEC AFLUORO OCTANOATE/WATER/AMMONIUM CHLORIDE (APFO/H₂O/NH₄Cl)

GERSON R. OURIQUES, VIRGINIA G. BARROS, RENE
B. SANDER
UFSC

The phase behaviour in the binary system APFO/H₂O is investigated when a strong electrolyte such as Ammonium Chloride salt is added to the mixture. The addition of this third component (salt) had the effect of showing a rich variety of phases with liquid crystalline properties which were investigated by wide and small angle x-ray diffraction, polarizing microscopy and naked eyes of samples in bulk solutions. The size and shape of the micelles and the structure of others liquid crystalline phases were also studied as a function of temperature and salt concentration in solutions at constant surfactant/water ratio and at constant salt/water ratio. The amount of salt (by weight fraction) varied until its solubilization limit in the solution was reached. These investigations show the existence of homogeneous liquid crystalline nematic and lamellar phases formed by disc shaped aggregates (micelles) at high surfactant concentration ($W > 31\%$). At surfactant concentration less than 31% (by weight) and salt concentration higher than 2% (by weight) several disperse phases were formed and identified: vesicles, fragmented lamellae and defective lamellae. Apoio financeiro: Funpesquisa-UFSC

Utilização da microscopia óptica sob luz polarizada para análise de orientação em mostradores de cristal líquido

MARIA REGINA ALCÂNTARA
Instituto de Química da USP
LUIZ ALBERTO CASTRO DE ALMEIDA, MARCOS
ANTONIO SCHREINER, ANTONIO CARLOS CAMARGO

DO AMARAL, YAMATO MIYAO, SADAOKO MIYAO,
ALAÍDE PELLEGRINI MAMMANA

*Laboratório de Mostradores de Informação - Instituto de
Microeletrônica - Fundação Centro Tecnológico para
Informática*

Foi investigada a ocorrência de variações (disclinations) e de falhas no alinhamento molecular em mostradores de cristal líquido nemático torcido, produzidos no LMI/IM/CTI. Foram analisados mostradores de 50 mm x 90 mm e espaçamento de 7,5 μm , definido por cilindros de SiO_2 . A camada de PVA foi depositada por microcentrifugação e tratada mecanicamente com fibras orgânicas segundo direções ortogonais nos dois substratos. Foram analisadas tanto células classificadas como boas quanto rejeitadas por falhas na orientação molecular, segundo inspeção visual realizada na linha de fabricação. A análise foi efetuada por microscopia óptica polarizada de transmissão (microscópio Zeiss Universal) e por reflexão (microscópio Jenapol). A microscopia de transmissão mostrou em todas as amostras boas uma textura bastante uniforme, com linhas finas paralelas, bem pronunciadas e ortogonais, segundo o tratamento superficial realizado em ambos os substratos. Mudanças na orientação molecular, reve-

ladas por uma diferença de cor, foram observadas em algumas regiões cujos contornos eram definidos pelos espaçadores. A análise por reflexão permitiu identificar a ocorrência de defeitos na orientação e sua relação com defeitos ou inhomogeneidades no tratamento superficial da camada de PVA. Por sua vez, o relevo dos eletrodos transparentes, gravados sobre os substratos, não parece influenciar o alinhamento. Nas células rejeitadas, observou-se uma maior graduação de cores, com texturas bastante diversas e não uniformes ao longo das mesmas, sendo as linhas de tratamento em geral mais pronunciadas, como se estivessem comprometendo a camada de PVA. É comum a ocorrência de uma textura tipo "schlieren" acompanhada de regiões isotrópicas. Com frequência observaram-se centros nucleadores, filamentosos ou em grumos, atribuídos a contaminação e responsáveis por modificar a orientação cristalina. Poligonais quadradas também foram observadas, possivelmente como se decorrentes de danos causados à camada de PVA no tratamento. A técnica de microscopia óptica sob luz polarizada mostrou-se adequada como método de controle da produção de mostradores.

INSTRUMENTAÇÃO

Workshop: Instrumentação na Área Biomédica
(INS, BIO) - 07/06/95

INSTRUMENTAÇÃO BIOMAGNÉTICA EM MEDICINA

OSWALDO BAFFA

Departamento de Física, FFCLRP-USP.

A possibilidade de detecção de campos magnéticos produzidos pelo corpo humano tem proporcionado uma alternativa interessante para a medida de fenômenos associados a correntes iônicas e a presença de substâncias paramagnéticas e ferromagnéticas. Uma intensa atividade de pesquisa tanto no lado da física e engenharia, através do estudo e desenvolvimento de detectores de campo magnético sensíveis, como também nas aplicações envolvendo diferentes especialidades médicas está em andamento. Como os campos magnéticos são transparentes ao corpo estes podem ser detectados sem serem distorcidos e com isso proporcionar uma imagem mais precisa das fontes de campo. Medidas magnéticas podem complementar medidas de fenômenos elétricos e desta forma melhorar a informação obtida. Várias aplicações serão ilustradas envolvendo gastroenterologia, cardiologia, obstetrícia e neurologia, para citar apenas algumas. Estes estudos e equipamentos ainda não fazem parte da rotina médica, muitos ainda estão em desenvolvimento e em fase de validação. Entretanto, espera-se que em um futuro não muito distante esta metodologia possa ser utilizada na rotina médica com múltiplas vantagens.

Apoio financeiro CNPq, FAPESP, CAPES e TWAS

DOSIMETRIA DE RADIAÇÕES COM ELETRETOS

SERGIO MASCARENHAS

IF-USP/São Carlos, CNPDIA-EMBRAPA/São Carlos

O uso de eletretos em dosimetria de radiações foi aplicado para raios-X, Gama, Elétrons, partículas Alfa, neutrons lentos e rápidos como uma nova metodologia introduzida no Brasil e hoje internacionalmente difundida. Um caso de importância e sua aplicação em câmaras de ionização cilíndricas ou planas para monitoração pessoal ou de área. Basicamente o eletreto é sensor e detector simultaneamente: a variação da carga do eletreto mede quantitativamente a dose e o seu sensoreamento monitora quantitativamente a radiação. Um sistema eletrométrico e usado para medida da carga e sua variação pode ser computadorizado e usado para automação de dosímetro individuais ou de área. Para dimensões de uma caneta dosimétrica normal o eletreto tem uma carga superficial de nanocoulombs e tem uma faixa efetiva de 0,05 Gy. As vantagens comparativas do dosímetro de eletreto são memória, decaimento pequeno, possibilidade de automação do sistema, sistema de leitura sem ciclos térmicos ou químicos, baixo custo, sensibilidade e reprodutividade adequadas. Vários tipos de dosímetros e suas aplicações em física aplicada a medicina e dosimetria de radiações em geral serão discutidos.

UTILIZACAO DE DETECTORES PIROELETRICOS NA DOSIMETRIA DE RADIACAO IONIZANTE

APARECIDO A. DE CARVALHO
 FEIS-UNESP- Ilha Solteira
 SERGIO MASCARENHAS
 IFSC-USP

Elementos ferroelétricos apresentam propriedades piezoelétricas e piroelétricas. Em 1938, Ta mencionou a possibilidade de se utilizar o efeito piroelétrico para se detectar radiação. Quando submetido a incidência de radiação, a temperatura do ferroelétrico aumenta, causando uma alteração na sua polarização, em decorrência de suas propriedades piroelétricas. Posteriormente, os ferroelétricos foram utilizados em termometria remota e na detecção e medição de radiações na faixa do visível, infravermelho e microondas. A utilização de detectores piroelétricos para medir radiação ionizante foi reportada pela primeira vez em 1963, utilizando-se PZT para detectar grandes pulsos de radiação gama (10 a 1000 Gy). Temos utilizado detectores piroelétricos na dosimetria de radiação X na faixa de diagnóstico, na detecção de prótons e de nêutrons térmicos. Eles foram também utilizados na dosimetria de elétrons. Detectores piroelétricos diferem de detectores típicos de radiação ionizante tais como câmaras de ionização, TLDs, dispositivos semicondutores etc, nas seguintes características: a) apresentam a mesma sensibilidade para grande faixa espectral da radiação; b) respondem linearmente com a intensidade da radiação (W/m^2); c) respondem quase simultaneamente ($<10^{-7}s$) a qualquer alteração na intensidade da radiação.

Instrumentação na Área Biomédica (INS, BIO) - 07/06/95

SISTEMA DE MEDIDAS AUTOMÁTICAS DE HIPERMETROPIA, MIOPIA E ASTIGMATISMO

LILIANE VENTURA, CAIO CHIARADIA, JARBAS
 CALADO DE CASTRO
 Instituto de Física de São Carlos - USP
 SIDNEY JÚLIO DE FARIA E SOUZA
 Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto - USP

Os sistemas automáticos para medidas de erros refrativos oculares (miopia, hipermetropia e astigmatismo) anteriormente desenvolvidos^{1,2}, embora apresentassem uma boa precisão nas medidas (0,09di), apresentavam partes mecânicas móveis e um sistema ótico de alinhamento crítico.

O novo sistema desenvolvido, não possui partes móveis, é de fácil alinhamento e utiliza um princípio básico de medida completamente diferente dos utilizados até o momento. O sistema consiste em projetar na retina do paciente um alvo luminoso ($\lambda = 830nm$) e, então, com uma ótica apropriada e um CCD linear, detectar a vergência dos feixes que emergem do olho e que corresponde ao erro refrativo ("grau e eixo") ocular do paciente.

A vergência é detectada através da distância entre os feixes, desviados por prismas, que atingem o CCD em dois conjuntos de fotodiodos distintos.

Resultados qualitativos foram obtidos demonstrando grande eficiência do sistema. Estima-se que a precisão

apresentada por este novo sistema, seja ainda maior do que já obtido, uma vez que o CCD possui precisão de 14,6 μm , o que corresponde a 0,03di de erro refrativo ocular.

1. Ventura, L. et al; "Desenvolvimento de um Sistema de Detecção de luz IV Espalhada pela Retina" *Rev. Fis. Aplic. Instr.* vol.(8), no.3, Set. 1993.
2. Ventura, L. et al; "Desenvolvimento de um Sistema para Diagnóstico de Erros Refrativos Oculares" *Rev. Fis. Aplic. Instr.* vol.(9), no.1, Mar. 1994.

ESTUDO E CONSTRUÇÃO EM ESCALA REDUZIDA DE BLINDAGENS MAGNÉTICAS MULTICAMADAS

MARCELLO G. RODRIGUES, OSWALDO BAFFA
 Departamento de Física, FFCLRP-USP

Medidas de campos biomagnéticos, devido sua alta sensibilidade, sofrem uma interferência muito grande do ruído magnético ambiental, que pode ser várias ordens de grandeza maior que os campos magnéticos objetos de estudo. Com o intuito de minimizar essa interferência, até o limite de sensibilidade dos detectores, são usadas além de técnicas gradiométricas, câmaras magneticamente blindadas. Estas câmaras funcionam através de dois princípios básicos dependendo da frequência do campo externo que se deseja blindar. Em baixas frequências e campos estáticos usa-se materiais magneticamente moles devido sua alta permeabilidade magnética, e em altas frequências, usa-se materiais de alta condutividade elétrica, que exe-

cem seu efeito de blindagem através das correntes parasitárias. O fator de blindagem da câmara também é função de sua geometria e a performance de tais blindagens pode ser melhorada através do uso de estruturas multicamadas. Os materiais usados neste trabalho foram a liga FeSi, como material ferromagnético alternativo de baixo custo, e o Alumínio como material de alta condutividade. Foram estudadas blindagens cúbicas de ambos os tipos, separadamente e em uso combinado. Também foi investigado a performance de estruturas multicamadas tanto em blindagem ferromagnética (6 camadas cilíndricas concêntricas) quanto em blindagem por corrente parasitárias (2 camadas cúbicas concêntricas). Os resultados demonstraram claramente a vantagem do uso de estruturas multicamadas em ambos os tipos de blindagens, através do aumento significativo no fator de blindagem total. O material FeSi se mostrou viável para ser usado em blindagens magnéticas apenas em estruturas multicamadas, e ainda assim quando as necessidades em fator de blindagem não forem elevadas.

Apoio financeiro CNPq, CAPES, FAPESP, TWAS. Agradecemos também a ACESITA pela doação das chapas de FeSi.

SISTEMA DE MEDIDAS AUTOMÁTICAS DE LENTES OFTÁLMICAS

RODRIGO TUMA ROTTA, LILIANE VENTURA, CAIO CHIARADIA, JARBAS CAIADO DE CASTRO
Instituto de Física de São Carlos - USP
 SIDNEY JÚLIO DE FARIA E SOUZA
Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto - USP

Um equipamento de medidas de lentes oftálmicas é indispensável num consultório oftalmológico e nas óticas para a aferição precisa das lentes corretivas. Estes equipamentos, em geral, são manuais e subjetivos, tornando as medidas imprecisas e lentas. Este projeto tem como propósito o desenvolvimento de um sistema automático e objetivo destas medidas. Os sistemas por nós desenvolvidos anteriormente possuíam duas partes móveis para a aferição das lentes - uma para a medida das coordenadas esféricas e outra para as coordenadas cilíndricas das lentes -, quatro fontes de luz ("leds") e um detector de quadrante. Consistia em detectar a vergência da lente-teste através do movimento de luz nos detectores. O novo sistema em desenvolvimento dispensa estas partes móveis e utiliza seis "leds" e um detector CCD. Consiste basicamente em detectar a vergência da lente a ser testada através da distância entre os feixes dos três meridianos a serem testados, em relação a um sinal referência. Com os três dados fornecidos pelo CCD, determinamos as três coordenadas para a caracterização da lente testada: coordenadas esférica e cilíndrica e o eixo angular. Este novo sistema está sendo montado e medidas qualitati-

vas demonstram uma precisão do sistema muito além da permitida para este tipo de medidas, que é de 0,25di.

Intensidade de Luz Espalhada em um Guia de Ondas de $LiNbO_3$

A. P. S. DE MOURA, S. CELASCHI, C. L. CESAR
Unicamp

Com a crescente demanda de rapidez na transmissão de dados nas telecomunicações, cresce também a importância de materiais de curto tempo de resposta. Os materiais não-lineares são de especial importância, pois eles são essenciais para os dispositivos de chaveamento, usados na optoeletrônica para separar pulsos ópticos ultracurtos, que são as unidades básicas de informação em um sistema de comunicações óptico. Um destes materiais é o Niobato de Lítio ($LiNbO_3$), cujas propriedades ópticas (em particular o índice de refração) dependem do campo elétrico aplicado sobre ele. Assim, variando o campo elétrico podemos fazer com que a luz que atravessa o guia sofra interferência destrutiva ou construtiva, obtendo assim um dispositivo de chaveamento óptico. No entanto, a intensidade do campo elétrico tem limitações de ordem prática, pois a diferença de potencial não pode exceder 200 ou 300 volts sem que o material seja danificado. Este fator limita o tamanho mínimo do guia em um ou dois centímetros. Com isso fica importante saber a atenuação do guia, para saber se o sinal não é perdido ao passar por uma chave construída com este material. Neste trabalho, estudamos as propriedades do espalhamento da luz em um guia de ondas canal de Niobato de Lítio, medindo a intensidade da luz espalhada ao longo do guia. Esperamos que a intensidade da luz decaia de forma aproximadamente exponencial com a distância percorrida no meio, a não ser pela presença de centros espalhadores pontuais no guia; estes centros fazem aparecer picos acentuados na curva de intensidade. Através do coeficiente obtido com o *fitting* da exponencial à curva experimental, determinamos a atenuação do material para o comprimento de onda utilizado. Estudamos também a qualidade da amostra através dos picos de luz espalhada.

Rede local de instrumentos: Aplicação de rádio digital à agropecuária.

NELSON CORONA JUNIOR, JOSÉ CARLOS SARTORI
EESC-USP
 RICARDO Y. INAMASU
CNPDIA-EMBRAPA

Desenvolveu-se um sistema de telemetria para operação no campo em aplicações agropecuárias. O sistema é composto por até 59 estações de dados escravas remotas e uma estação mestre, compartilhando um enlace de rádio digital através de multiplexação por divisão do tempo. As estações escravas, bem como a estação mestre, são baseadas no microcontrolador SAB80C535

(SIEMENS), com "software" 100% compatível com a família de microcontroladores MCS8051 (INTEL). A programação das estações é feita em linguagem de alto nível (linguagem C). A estação de dados possui conversor A/D com oito entradas multiplexadas, e 24 pinos de entrada/saída digital, podendo ser acoplada a sensores e atuadores. Utilizou-se modulação FSK por duração de pulso. A faixa de frequência utilizada está centrada em 418MHz, estabilizada por filtro SAW, e o alcance em linha de visada é de até 1000m. É prevista a alimentação das estações remotas por baterias. O protocolo de comunicação é a principal providência para que as estações apresentem um baixo consumo de energia. A multiplexação é sincronizada pela estação mestre, e a cada estação escrava é alocado um "slot" de tempo estático. Cada lote é composto por 59 "slots" com duração de 60 segundos. Durante a maior parte do tempo, toda a estação remota permanece desativada, com exceção de um relógio calendário, com consumo de energia muito baixo. O sinal de alarme do relógio calendário é utilizado para ativar a estação de dados no "slot" de tempo atribuído à mesma, que recebe comandos da estação mestre, os executa, programa o relógio calendário para seu próximo período de ativação e desativa-se. O algoritmo para sincronização leva em consideração as características dinâmicas do meio de propagação. Inicialmente a falha do sinal de sincronismo, é considerada como sendo devida a condições de propagação desfavoráveis, e a busca contínua pelo sinal de sincronismo, consumidora de energia, é realizada somente quando considera-se o sincronismo perdido.

CONSTRUÇÃO DE UM TOPÓGRAFO DE CÓRNEA PARA MAPEAMENTO BIDIMENCIONAL EM CÓDIGO DE CORES

ANTÔNIO CÉSAR DE OLIVEIRA, LUIZ EDUARDO RIBEIRO DOS SANTOS, JARBAS CAIADO DE CASTRO NETO, RINALDO WANDER MONTALVÃO
Instituto de Física de São Carlos - USP

Este trabalho tem como objetivo o desenvolvimento de um topógrafo de córnea também conhecido como VideoKeratoscópio, e cuja função é analisar a superfície da córnea gerando um mapa bidimensional plano, com informações tridimensionais por código de cores.

A análise da superfície da córnea é de importância fundamental para a detecção de patologias associadas à sua morfologia bem como para a avaliação de processos cirúrgicos utilizados em sua correção.

O VideoKeratoscópio se constitui por um dispositivo que projeta anéis luminosos sobre a superfície da córnea, sendo a reflexão deste detectada por uma câmera CCD. A imagem obtida pela câmera é então digitalizada e armazenada em um microcomputador tipo PC-AT 486, onde é manipulada e analisada por técnicas de processamento de imagens digitais que

fornece as informações necessárias para o mapeamento topográfico da superfície da córnea. O raio de curvatura, isto é, a dioptria correspondente a cada região desta superfície, é mostrado através de cores. Assim para cada raio de curvatura é definida uma cor diferente para sua representação.

O mapa obtido, proporciona ao médico oftalmologista uma análise minuciosa de cada região da superfície da córnea, tornando mais fácil a visualização de doenças e consequentemente melhor resultado em sua correção.

Reconstrução Tridimensional de Imagens Tomográficas Baseada no Uso de Transformada Rápida de Fourier

JOSIANE MARIA BUENO, AGMA JUCI MACHADO
TRAINA

Instituto de Ciências Matemáticas de São Carlos - USP
Av. Dr. Carlos Botelho, 1465 - CEP 13560-970 - Caixa
Postal 668 - São Carlos

PAULO ESTEVÃO CRUVINEL
EMBRAPA-CNPDIA, Rua XV de Novembro, 1452 -
Caixa Postal 741 - São Carlos

Este trabalho tem por objetivo o desenvolvimento de um algoritmo para reconstrução de imagens tridimensionais a partir de dados bidimensionais obtidos com tomógrafos de ressonância magnética ou raio-X. Para a reconstrução das projeções bidimensionais serão utilizadas técnicas baseadas em Transformada Rápida de Fourier (FFT), as quais apresentam alto desempenho, boa exatidão e baixo tempo computacional. Para a geração de mapas tridimensionais será utilizada a técnica de interpolação trilinear, a qual possibilitará uma resolução isotrópica nas imagens tridimensionais. No projeto, também serão utilizadas ferramentas já implementadas para a visualização das imagens geradas. O trabalho está sendo desenvolvido em linguagem C e ambiente UNIX, para viabilizar sua operação em estações de trabalho SUN.

Instrumentação (INS) - 07/06/95

ANÁLISE TEÓRICA E EXPERIMENTAL DE UM MULTIVIBRADOR ÓPTICO A CRISTAL DE $LiNbO_3$

ÉDY C. MONTEIRO, WILSON T. SAKATA, PAULO J. C. RODRIGUES, JOSÉ E. B. OLIVEIRA
IEEC - ITA - CTA

Desde meados da década de 70 que dispositivos ópticos biestáveis vêm sendo amplamente estudados tanto no caráter teórico quanto experimental. Estes dispositivos utilizam materiais que apresentam não linearidade óptica intrínseca ou híbrida. A técnica intrínseca

geralmente requer uma intensidade de luz muito elevada, tornando-se impraticável para várias aplicações tecnológicas. Entretanto, o dispositivo eletro-óptico biestável (híbrido) pode ser projetado para operar com baixíssimas intensidades de luz. Além disso, a técnica híbrida pode ser implementada com a tecnologia de óptica integrada, proporcionando altas velocidades e baixas tensões de operação, o que é fundamental para as aplicações de biestabilidade óptica.

Este trabalho apresenta uma análise teórica e experimental de um multivibrador óptico a cristal de $LiNbO_3$. Este multivibrador é constituído de um modulador eletro-óptico de amplitude, onde parte do sinal óptico de saída é realimentado, via fotodetector e amplificador, no cristal de $LiNbO_3$. O multivibrador analisado opera no modo astável, mas as potencialidades do dispositivo para operar nos modos biestável e monoestável também são abordadas. Os resultados experimentais apresentam boa concordância com as previsões teóricas feitas por simulações em computador.

LASER ABLATION INDUCTIVELY COUPLED PLASMA MASS SPECTROMETRY (LA-ICPMS) FOR BEGINNERS

STEVEN F. DURRANT
IFGW, UNICAMP

Inductively coupled plasma mass spectrometry (ICPMS) has received rapid acceptance as a sensitive technique for elemental and isotope ratio analysis since its feasibility was shown in 1980. Usually, samples are introduced as solutions by a pneumatic nebulizer, which discharges into a spray-chamber, and a flow of argon sweeps the smaller droplets produced to the central channel of the ICP. This method has proved very successful for the analysis of geological, metallurgical and biological samples. However, direct solid sampling using a laser has obvious advantages over the nebulization of aqueous solutions: little or no sample preparation; short analysis time; reduced water-related spectral interferences; spatially-resolved analyses; excellent detection limits. In this work, typical LA-ICPMS systems are described and their application to elemental and isotope ratio analysis illustrated.

Implementação de um algoritmo para reconstrução de imagens bidimensionais baseado em análise freqüencial.

ALEXANDRE MARLETTA
Instituto de Física de São Carlos - FFI - USP
PAULO E. CRUVINEL
EMBRAPA - CNPDIA

A tomografia computadorizada, nas últimas décadas, vem sendo utilizada como uma técnica muito útil em aplicações multidisciplinares. O seu uso abrange

desde a medicina moderna, com a tomografia computadorizada de Raio-X (CT) e de Ressonância Magnética Nuclear (RMN), até em estudos de materiais, como por exemplo as aplicações na física de solos. Nos processos tomográficos convencionais, uma determinada secção do objeto em estudo, é apresentada como um mapa de coeficiente de atenuação linear bidimensional, a qual fornece informações quantitativas, quanto ao material presente e qualitativas, quanto à forma. Paralelamente ao desenvolvimento das diversas gerações de tomógrafos, surgiram vários métodos matemáticos e algoritmos para a reconstrução de imagens tomográficas, dos quais pode-se citar: a) Transformada de Radon; b) Retroprojeção filtrada; c) Método algébrico de reconstrução; d) Convolução; e) Algoritmo de Ramachandram e f) Transformada de Fourier (TF) entre outros. Estes métodos e algoritmos, inicialmente, ficaram restritos, devido ao alto custo das arquiteturas de sistemas computacionais requeridas. Entretanto, com o advento da microeletrônica produzindo microcomputadores de grande capacidade de memória e processamento rápido, bem como do desenvolvimento de sensores mais sensíveis e componentes eletro-eletrônicos de grande precisão, a baixo custo, foi possível o desenvolvimento de tomógrafos computadorizados dedicados a aplicações específicas. Dentro deste contexto, foi estudado um algoritmo para reconstrução de imagens tomográficas por TF. O algoritmo foi implementado na linguagem Quick Basic, em ambiente DOS, utilizando-se um microcomputador IBM-PC 486 DX. Neste trabalho é apresentado o algoritmo estudado e sua aplicação na reconstrução de imagens bidimensionais de corpos homogêneos, utilizando dados obtidos de Phantoms de um minitomógrafo computadorizado de Raios-x.

DESENVOLVIMENTO DE UM CERATÔMETRO INTRACIRÚRGICO (TEMPO REAL)

LUIS ALBERTO V. DE CARVALHO, JARBAS CAIADO
DE CASTRO
Instituto de Física de São Carlos-USP
SIDNEY JULIO DE FARIA E SOUSA
Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto-USP

O ceratômetro é um instrumento para medir a curvatura da córnea, idealizado por Javal no início deste século. No entanto, o seu uso só se tornou popular na década de sessenta com a popularização das lentes de contato. As lentes exigiam o conhecimento da curvatura corneana para uma adaptação adequada.

Com a melhoria do instrumental cirúrgico, na década de setenta, o ceratômetro passou a ser usado para o acompanhamento do astigmatismo induzido pelas cirurgias. O objetivo era corrigi-lo com a retirada seletiva dos pontos de satura, guiados pela ceratometria. A experiência

acumulada nos últimos vinte anos tem demonstrado que a estratégia mais apropriada é o controle do astigmatismo intracirúrgico. Para tanto é necessário que o cirurgião tenha um meio confiável e preciso de identificá-lo, a medida que ele vai sendo gerado durante a cirurgia.

A técnica mais empregada atualmente é a de projetar um círculo sobre a córnea, antepondo à luz do microscópio cirúrgico um anel de metal de pequena dimensão. O método tem a vantagem da simplicidade mas a desvantagem na falha da quantificação do fenômeno. O máximo de informação que o cirurgião tem é que o círculo está pouco, meio ou muito deformado em uma determinada direção. Com esta precária informação ele altera a tensão das saturas, tentando corrigir o astigmatismo.

Desta forma, o desenvolvimento de um instrumento que utilize o princípio do ceratômetro, aliando o método quantitativo de Javal ao qualitativo dos discos de Plácido de maneira informatizada, tornando mais precisa a medida do astigmatismo durante a cirurgia, é a proposta deste trabalho. É importante salientar que tal instrumento não tem o objetivo de ser tão preciso quanto o videoceratoscópio, mas será fundamental e suficiente para o médico durante o ato cirúrgico.

Determinação e medida de parâmetros que caracterizam um CPC

PAULO R. BARGO, MARCOS TADEU T. PACHECO
UNIVAP - Univ. do Vale do Paraíba, São José dos Campos, SP

O CPC (Compound Parabolic Concentrator) pode ser utilizado para se aumentar a relação Sinal/Ruído na coleta de sinais em espectroscopia. O princípio de funcionamento deste dispositivo se baseia na correção do ângulo de inclinação dos raios que incidem em seu interior, produzindo na saída um feixe de raios com uma pequena inclinação, podendo ser acoplado com baixas perdas em um cabo de fibras óticas ou diretamente na abertura de um espectrofotômetro. Diversos parâmetros podem ser utilizados para caracterizar um CPC. Neste trabalho vamos apresentar um conjunto de parâmetros e seus métodos de medidas. Refletividade, Transmissividade, Distribuição Angular e Ganho. Estes parâmetros se mostraram bastante eficientes no sentido de prever o comportamento do CPC assim como na especificação e projeto de um CPC. Para as medidas foi utilizado um CPC de cobre sem nenhum tipo de revestimento antirefletivo. A relação entre os diâmetros da abertura de entrada e de saída do CPC é de 0.29, corrigindo desta maneira a inclinação dos raios de entrada no CPC para um conjunto de raios que pode ser acoplado com alta eficiência em uma fibra ótica com esta abertura numérica. Discutimos os métodos utilizados na medida de cada parâmetro e sua influência no comportamento geral do dispositivo, assim como a

precisão de cada parâmetro durante o processo de fabricação.

CÉLULA DE CARGA VIA FIBRA ÓTICA

RUBENS BARRETO DA SILVA, LANDULFO SILVEIRA JR, RICARDO ENRIQUE MEDRANO, RENATO AMARO ZÂNGARO, MARCOS TADEU T. PACHECO
UNIVAP - Univ. Vale do Paraíba, São José dos Campos, SP

Este trabalho apresenta a caracterização do comportamento de uma fibra ótica monomodo de média birrefringência, inserida em um compósito, quando submetida a uma força radial para aplicações como célula de carga industrial. O sistema tem sua operação baseada no efeito fotoelástico, o qual induz birrefringência na fibra ótica, modificando o estado de polarização da luz guiada. As mudanças no estado de polarização do sinal é convertida em variação de intensidade, sendo então detetadas por um fotodiodo de silício e tratadas por um microcomputador. A fonte de luz utilizada é um laser de He-Ne polarizado de 1 mW de potência. O corpo de prova é composto por uma fibra ótica inserida em uma matriz de material composto, formada por duas camadas de manta de fibra de vidro e resina de poliéster. A fibra ótica é posicionada entre estas duas camadas de fibra de vidro. A dimensão do corpo de prova é 80x50x0,85 mm, tendo a fibra ótica um comprimento de 2 metros para facilitar o manuseio do sistema. Diversos corpos de prova foram contruídos e submetidos a compressão, com a força aplicada variando entre 0 e 2000 kgf. Os resultados obtidos com os diferentes corpos de prova são similares. O dispositivo responde a um intervalo de forças situado entre 400 e 2000 kgf. Quando a pressão é aplicada, não há resposta entre 0 e 400 kgf. A fim de entender este fenômeno, testes estão sendo feitos para determinar as propriedades elásticas do material composto. O desenvolvimento de sensores a fibra ótica pode em um futuro próximo substituir as tradicionais tecnologias, tal como as células de carga que utilizam strain gages em pesagem industrial.

APLICAÇÃO DE TÉCNICAS DE MORFOLOGIA MATEMÁTICA PARA IDENTIFICAÇÃO DE FASES EM IMAGENS DE RAIOS-X CARACTERÍSTICOS

ANA MARIA MARQUES DA SILVA, JOSÉ ANTÔNIO TRINDADE BORGES DA COSTA, CRISTIANE DE SOUZA JAVORSKY

UFSM

MARCOS ANTÔNIO ZEN VASCONCELLOS, THOMAS TSCHOEPKE SOARES

UFRGS

É conhecida a natureza ruidosa das imagens de raios-X característicos de um elemento na superfície de um

material. O ser humano é capaz de identificar visualmente regiões conexas do elemento investigado, realizando operações gestálticas de agrupamento. Entretanto, devido ao aspecto difuso das imagens, existem dificuldades em proceder essa identificação por métodos computacionais. Assim, a segmentação das diferentes fases que compõem o material deve ser precedida da aplicação de técnicas de processamento que tentam reproduzir a operação visual de agrupamento dos pontos da imagem. No presente trabalho, numa abordagem alternativa à suavização de imagens difusas por meio de filtragem no domínio espacial, as imagens de microsonda de raios-X de amostras de ferro-esponja [1] foram processadas através de seqüências de operações de morfologia matemática, para a identificação das fases.

[1] J.A.T. Borges da Costa et alli, Caracterização Microestrutural do Ferro-Esponja por Imagens de Microsonda Eletrônica, Trabalho a ser apresentado no XVIII ENFMC, Caxambu, 1995.

AMORTECEDORES PASSIVOS UTILIZANDO CERÂMICAS PIEZOELÉTRICAS

LUIZ ANTONIO BÁSSORA
UFSCAR

JOÉ MARQUES PÓVOA, JOSÉ ANTONIO EIRAS
Universidade Federal de São Carlos

Existe uma série de aplicações para sistemas (arranjos) capazes de absorver vibrações mecânicas, dentre elas podemos destacar amortecimento de vibrações em balanças de precisão, sistemas ópticos de medidas, etc.. Amortecedores passivos podem ser construídos a partir de cerâmicas piezoelétricas, onde as vibrações mecânicas são convertidas em energia elétrica (Efeito piezoelétrico) que pode ser dissipada através de uma resistência na forma de calor. Para que esta conversão de energia seja a maior possível é necessário a escolha de um material piezoelétrico com alto fator de acoplamento eletromecânico (k_{ij}). Baseados em considerações teóricas, é possível desenvolver amortecedores passivos de cerâmicas piezoelétricas - PZT + 1% Nb (PZTN), com alto fator de acoplamento eletromecânico ($k_{eff} \approx 0.60$), alta perda mecânica ($\tan \delta = 0.2$) e alta constante elástica "stiffness" ($2 \text{ a } 10 \times 10^{10} \text{ N/m}^2$), usando um resistor acoplado ao material piezoelétrico. Ainda é possível variando-se o valor do resistor, variar a frequência onde a perda mecânica é máxima, podendo assim deslocá-la para o intervalo de frequência onde se quer trabalhar.

Desenvolvimento de um Software de controle e análise de um Espectrômetro de Ressonância

Quadrupolar Nuclear

HERNÁN CERVANTES, SAID RABBANI, HIRAM PASCOAL

Instituto de Física, USP

CHRISTOVAM MENDONÇA

Departamento de Física, UFSCar

Com o objetivo de melhorar e informatizar o Espectrômetro de Ressonância Quadrupolar Nuclear do Laboratório de Magneto-Óptica do Instituto de Física da USP foi desenvolvido um *software* de controle dos equipamentos, tomada e análise de dados em linguagem de programação PASCAL e ASSEMBLER, nos compiladores Turbo Pascal 7.0 e Turbo Assembler 1.0 respectivamente. O estilo de programação adotado foi a Programação Orientada ao Objeto (POO) em grande parte do programa, a alto nível, e rotinas em assembler para o controle em baixo nível. A POO foi escolhida pela razão que todos os aparelhos, menos um gerador de pulsos, tem a interfase GPIB, o qual permitiu a definição de um objeto básico com as rotinas gerais, e "descendentes" de este objeto, com as modificações e ampliações necessárias, encaregam-se do controle de um aparelho em particular. Isto fez com que o programa ficasse mais curto e fácil de desenvolver. Outra vantagem da POO foi o uso do Turbo Vision, dentro do Turbo Pascal, para a utilização de ambientes de usuário similares às encontradas nos editores dos produtos Borland. Na parte de análise de dados tem-se planejado a realização de alisamento, transformada rápida de Fourier dos dados, assim como a exportação de dados à impressora e plotter.

WOLF - Uma Arquitetura para Processamento de Alto Desempenho

MARCOS ANTÔNIO CAVENAGHI

Departamento de Computação (FC) - UNESP - Bauru/SP

ÁLVARO GARCIA NETO

Dep. de Física e Informática - IFSC - USP - São Carlos/SP

Esse trabalho apresenta a arquitetura a fluxo de dados WOLF, descrevendo-a funcionalmente. Apresenta também um simulador para essa arquitetura. Alguns dos problemas mais frequentes encontrados durante o desenvolvimento de arquiteturas a fluxo de dados nos vários grupos de pesquisa em todo o mundo, são previstos tais como o excesso de paralelismo e a execução de código seqüencial. Alguns mecanismos que procuram solucioná-los também são apresentados. Tais mecanismos, que são intrínsecos à arquitetura WOLF, promovem-na a uma arquitetura de uso geral, que é o objetivo do trabalho. Para tanto está sendo desenvolvido um simulador para validar a arquitetura e estudar suas principais características. Tal simulador foi escrito usando conceitos de orientação a objetos e a linguagem de programação C++. No momento estão sendo implementadas algumas estruturas que permitem

o controle do grau de paralelismo explorado pelo simulador.

Célula Capacitiva para Determinação da Expansão Térmica de Sólidos

ADRIANO FÁVARO, PAULO CÉSAR DE CAMARGO
UFPR

Com este trabalho propõem-se um novo desenho para o dilatômetro e a determinação da expansão térmica de amostras com transição de fase paramagnética-antiferromagnética. A célula é um capacitor de três terminais ligado a uma ponte capacitiva, cuja alimentação provém de um gerador senoidal - 1kHz/100V. O desbalanceamento da ponte, causado pela variação da capacitância, é detectado pelo amplificador lock-in. Num loop paralelo, um controlador de temperatura comanda o relé de estado sólido que aciona o aquecedor, de modo a se criar uma rampa de temperatura. O sensor de temperatura é um termopar tipo E, que é lido por um multímetro digital. Um PC386, dotado de uma interface IEE-488 (GPIB) comunica-se com o amplificador lock-in e com o multímetro, registrando, em um arquivo tipo texto, os valores medidos por estes equipamentos. Num software, além da aquisição dos dados, é feita a conversão da leitura do lock-in em capacitância e da tensão lida pelo multímetro em temperatura. Assim, pode-se traçar um gráfico da variação da capacitância com a temperatura, que dará origem a determinação da expansão térmica através de um tratamento matemático. A equação da célula prevê, quando o material for CuBe (material de que é feita a célula), que a capacitância varia linearmente com a temperatura, conforme obtido nos testes preliminares. Testes com uma amostra de cromo puro, que apresenta transição de fase Paramagnética-Antiferromagnética em $T_N = 311$ K, reproduziu a anomalia conhecida, correspondendo a uma variação de $\Delta L/L$ de aproximadamente 5×10^{-6} , conforme a literatura.

A COMPUTERIZED APPARATUS FOR EVALUATION OF IRRIGATION SYSTEMS USING SOIL TEMPERATURE PROFILE

PAULO ESTEVÃO CRUVINEL
EMBRAPA-CNPDIA, Rua XV de Novembro 1452, São Carlos SP

A computerized apparatus based on a Motorola 6502 microprocessor, complementary metal-oxide semiconductor (CMOS) devices, as well as using thermocouples, was designed to carry out analysis of irrigation systems. It not only allows measurement and recording of soil temperature data at eight depths from 2 to 128 cm in the range of -20°C up to 99.9°C , an accuracy of plus or minus 1.5% and 0.1°C resolution but also statistical analysis. Furthermore using soil temperature profile, an experimental investigation for evaluation of

irrigation systems was carried out. Quantitative results under both drip and furrow irrigation systems are presented. Tomatoes was chosen to illustrate the thermal effects observed.

PASSIVAÇÃO DE SILÍCIO POR FLUORAÇÃO SEGUIDA DE HIDROGENAÇÃO SUPERFICIAL

PASCHOAL RIZZO, WILMA MACHADO SOARES
SANTOS
UFRJ

Camadas finas de Óxido de Silício se depositam naturalmente sobre superfícies de Silício. Na interface Si-SiO₂ existem estados de cargas espaciais¹⁾, cujos centros de cargas positivas presentes no óxido atraem os elétrons para a interface. Tal sistema, tem um papel fundamental no comportamento de detectores semicondutores de Silício, principalmente quando estes funcionam no vácuo. Uma forma de se obter a estabilidade desejada nas características finais dos detectores é através da remoção da camada de SiO₂. Neste trabalho, apresentamos os procedimentos utilizados para a remoção da camada de óxido, com uso de HF e bombardeio de elétrons em descarga de argônio, assim como os resultados finais das características de detectores de Silício submetidos à tais tratamentos. A aplicação de um ataque químico inicial de HF produz a fluoração da superfície. As ligações Si-F produzidas são instáveis e sujeitas à novos ataques de HF. Estes novos ataques produzem a hidrogenação da superfície, sendo os átomos de silício superficiais removidos como Si-F₄²⁾. O uso de tais métodos mostrou-se consistente com os resultados experimentais obtidos, isto é, com as Razões de Combinação Superficiais extremamente baixas e valores superiores à $10M\Omega$ para as resistências, o que produziu o comportamento desejado para os detectores de Silício produzidos de acordo com estas técnicas de passivação. REFERÊNCIAS 1) A. S. Grove, *Physics and Technology of Semiconductor Devices*, John Wiley and Sons, (1967). 2) Trucks, G. W. et al, *Phys. Rev. Lett.*, Vol 65 (4), 504, (1990).

Time Resolved Fluorescence Spectroscopy

LUZIA SAEKO KANASHIRO, WALTER MAIGON
PONTUSCHKA, JOÃO GIL DOS SANTOS

UFUSP

NOELIO OLIVEIRA DANTAS
Universidade Federal de Uberlândia
MAO SEN

Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, China

A time resolved fluorescence spectrometer is described and steps of calibration and optimization are reported. Some examples of measurements are presented and discussed. The fluorescence lifetime techniques have been a subject of rapid progress during the last two

decades. It provided an enormous application field, opening the access to the detailed knowledge of a number of short living processes involving the excited states of atomic and/or molecular systems, including the relaxation states, charge and energy transfer, electron ejection kinetics and so on. The time calibration has been performed using the IBH STATS N° 5 program. In order to obtain such data, the start signals were directed to the delay circuit and its output to the time to amplitude conversion unit input, so that the pulse width did not make any contribution to the time markers.

AUTOMATIZAÇÃO DE UM SISTEMA DE MEDIDAS DE RESISTIVIDADE ELÉTRICA

CARLOS HENRIQUE CARPANEZZI, CARLOS ROBERTO GRANDINI

UNESP - Bauru

Após a construção e desenvolvimento do sistema de medidas de resistividade elétrica, foi desenvolvido um sistema de aquisição de dados via computador, em virtude da análise da resistividade elétrica ser efetuada em função da variação da temperatura, o que requer períodos grandes de observação. Optou-se pela construção de uma interface que mostrasse versabilidade e ao mesmo tempo eficiência. A interface então foi projetada para operar externamente à máquina, não se alojando nos slots. Com isso pode ser operada por qualquer computador AT, não necessitando de adaptações no micro. A interface construída é do tipo paralela, e é ligada através do cabo de impressora. É constituída de um conversor A/D de 8 bits, que é controlado pelos 8 bits de saída da porta paralela. A aquisição de dados é feita através dos 5 bits de controle da porta, através de uma multiplexação dos bits de dados. Isto pode ser realizado utilizando a INT 17H do dos, sendo o software de controle da interface desenvolvido em PASCAL 7.0.

(Apoio: CNPq e FUNDUNESP).

PROJETO DE UM CANHÃO DE ELÉTRONS DE BAIXA ENERGIA VIA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

JOSÉ ROBERTO GARBIN

Departamento de Física - UFSCar

RONALDO S. BARBIERI

Departamento de Química - UFSCar

Através deste trabalho pudemos projetar, com o auxílio do pacote computacional SIMION, um canhão de elétrons contido por um emissor de elétrons acoplado a um conjunto de lentes eletrostáticas, objetivando obter feixes eletrônicos com energias de 20 a 200 eV, colimados, e com uma largura de meia altura, para a distribuição de energia, de 0,1-0,5 eV.

Os resultados por nós obtidos, através de estudos sistemáticos, acerca do comportamento de feixes de elétrons, com dada energia, atravessando superfícies equipotenciais associadas aos diversos elementos do canhão, para diferentes configurações, serão apresentados.

Detalhes acerca da construção do canhão, em andamento, bem como as justificativas para sua configuração final serão, também considerados.

Workshop: Instrumentação em Engenharia Mecânica de Estrutura (INS) - 08/06/95

Introdução

CÉLULAS DE CARGAS DIGITAIS

PEDRO DA ROS

Toledo do Brasil, Sao Paulo, SP

Ultimamente a evolução tecnológica tem direcionadoos processos industriais e a eletrônica associada, para a descentralização, com ênfase nos conceitos de inteligência distribuída e conectividade. Dentro da automação e controle procuram-se maiores exatidão e menor tempo de acesso, associados a medida. Uma das variáveis de maior importância na atividade industrial e a massa; cuja medida antecede a muitas outras importantes encontradas no controle de processos. Os transdutores de peso, ou células de carga, são construídos baseados em extensômetros elétrico associado a um corpo metálico e fornece como saída um sinal analógico (na faixa de micro volts) que é função tanto da carga aplicada (força peso) quanto da tensão de excitação. A resolução deste sinal, e a sua exatidão, devem situar-se entre limites especificados, apesar de uma série de fatores influenciarem na deterioração do mesmo. Os conceitos inicialmente citados, aplicados ao caso, foram traduzidos pela indústria em um novo produto, que é a célula de carga digital, cujo sinal de saída apresenta níveis lógicos associados a tensão de 0 a 5V, que interpretados, indicam o peso. Esta célula de carga pode ser monitorada, calibrada e controlada via comunicação digital através de rede local (LAN). E objetivo deste trabalho apresentar as características básicas que associam o fenômeno mecânico ao eletrônico, produzindo o transdutor e comparar o estado-da-arte com o processo tradicional.

**A USINAGEM DE ULTRA-PRECISÃO COM FERRAMENTAS DE DIAMANTE:
CARACTERIZAÇÃO, PROCEDIMENTO, APLICAÇÃO A INSTRUMENTAÇÃO E O
CENÁRIO NACIONAL.**

ARTHUR JOSE VIEIRA PORTO

EESC/USP, Depto de Mecânica, São Carlos SP.

A usinagem de ultra-precisão com ferramentas de diamante, especificamente nas operações de torneamento e retificação, e o processo onde se utiliza uma ferramenta especial de diamante (monocristalino ou na forma de rebolo) em uma máquina ferramenta de ultra-precisão. Essa combinação é usada para produzir formas especiais e acabamento de superfície sob condições precisamente controlada e monitoradas de máquina, ferramenta, material e ambiente. A combinação de tecnologias que resulta na usinagem de ultra-precisão, permite a obtenção de tolerâncias de contorno e acabamentos superficiais com precisão nanométrica e altíssima repetibilidade, diferentemente da tecnologia convencional não determinística. Neste trabalho iremos apresentar o estado da arte no Brasil e a aplicação dessa tecnologia na confecção de sensores, dispositivos de precisão, componentes óticos como lentes e espelhos, que tem permitido novas aplicações e diminuição de tempo de desenvolvimento desses elementos.

OPORTUNIDADES E DESAFIOS DA INSTRUMENTAÇÃO EM BARRAGENS

LÉLIO NAOR LINDQUIST

CESP-Ilha Solteira

Barragens são estruturas extremamente úteis, pois armazenam água, criam condições para a geração de energia elétrica e proporcionam outros benefícios a humanidade. Entretanto simultaneamente criam risco potencial a propriedades e a pessoas a jusante. Para que esses riscos sejam minimizados a engenharia de barragens lança mão de várias ferramentas para a avaliação das condições reais de segurança, entre elas a instrumentação de auscultação civil. Nesta palestra será efetuada uma abordagem geral sobre os vários tipos de instrumentos usualmente utilizados com essa finalidade, bem como as oportunidade e desafios em instrumentação nesta área.

*Instrumentação em Engenharia Mecânica de
Estrutura (INS) - 08/06/95*

**MULTICHANNEL OPTOELECTRONIC
PARALLEL INTERCONNECTION**

FELIPE RUDGE BARBOSA, JORGE SALOMAO
PEREIRA, FERNANDO MATSUMOTO, ANTONIO
CORAL
CPqD - Telebras

This work describes the complete experimental demonstration of an optoelectronic (OE) parallel interconnection spanning 24 parallel channels comprising three units of hermetically packaged monolithic 8-element laser array, integrated 8-element optical fiber ribbon, and monolithic 8-element photodetector array, and corresponding 24-channel electronic circuitry for drive and reception. All channels are 300m long, totally independent both optically and electrically. Cross-talking (XTK) was measured to be very low, optical $XTK < -40dB$ and thermal/electrical $XTK < -30dB$. Total skew is $< 5ns$. This OE parallel interconnection was

successfully tested in a digital switching system (Tropico RA), and demonstrated error-free operation and no degradation in performance compared to the standard electrical interconnection.

**TWO DIMENSIONAL POSITION
SENSITIVE DETECTOR**

ADEMARLAUDO FRANÇA BARBOSA
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - Rio de Janeiro

The development of a gas X-Ray detector for localizing the position of absorbed photons in two dimensions is reported. The main feature of the detector is the fact that it is a Multiwire Proportional Counter using only one wire frame. This frame is the anode wire plane, which collects the avalanche ionization charge produced by X-Ray photons interacting with the gas molecules. A wire weaving machine has been constructed for the preparation of wire electrodes. The cathode consists in a 3 layers multilayer printed circuit board where the charge induced by avalanches is sampled. The readout of the X and Y coordinates for each absorbed photon is carried out by measuring the time

taken by the avalanche induced pulses to travel through delay lines. A prototype detector has been constructed and is presently under test.

Sistema Ótico para Medidas de Diâmetro de Peça em Processo de Usinagem em Tornos Mecânico Universal

IVANDO. S. DINIZ, R. A. ZÂNGARO, MARCOS TADEU T. PACHECO

UNIVAP - Univ. do Vale do Paraíba, São José dos Campos - SP

O objetivo deste trabalho é o desenvolvimento de um sistema para auxiliar nas medidas de diâmetro de peça em processo de usinagem em tornos mecânico universal. É constituído por um sistema ótico-emissor, ótico-receptor e um controlador. O sistema ótico-emissor é composto por um Laser de Hélio-Neônio (HeNe) modelo 1101 com sua respectiva fonte modelo 1201-1. Após a emissão do feixe pelo canhão, ele passa por uma lente biconvexa modelo KBX046 que tem a função de ampliar o diâmetro desse feixe. Após isso o feixe passa por uma lente cilíndrica, modelo CKX075, que faz com que o feixe se torne uma elipse estreita com altura de uma polegada, que é a área de atuação do sensor. O sistema ótico-receptor utilizado é o sensor RL1024G que possui um conjunto linear de diodos com auto escaneamento e espaçamento entre os diodos de 25 micrômetros. Eles consistem em uma coluna de fotodiodos de silício, que são associados cada um, a um capacitor de armazenamento que faz a integração de corrente e um dispositivo multiplexador que faz uma leitura periódica através de um "shift-register" integrado. O controlador utiliza o 8031 da Intel contendo teclado, display de sete segmentos e alarme. O funcionamento consiste na programação (digitalização) dos diâmetros: inicial e final da peça. A partir da entrada dos dados, o medidor inicia o processo de aquisição de sinal através do sensor. Estes valores são mostrados nos displays e comparados com os valores programados. Quando o diâmetro da peça equiparar ao valor final programado é emitido um alarme sonoro, para conclusão da operação.

Utilização de CPC para otimizar a coleta de sinais de baixa intensidade em instrumentação espectroscópica

PAULO R. BARGO, MARCOS TADEU T. PACHECO
UNIVAP - Univ. Vale do Paraíba, São José dos Campos, SP.

A utilização de técnicas espectroscópicas para análise de tecidos biológicos tem se mostrado extremamente poderosa e abrangente. No caso específico da espectroscopia Raman no infravermelho próximo, pode-se obter informações precisas sobre os diversos componentes bioquímicos presentes no tecido, além da vantagem de se evitar uma interferência mais forte da flu-

orescência induzida pelo laser, devido a se utilizar radiação em torno de 800 nm. O grande problema que envolve esta técnica é o baixo nível de sinal produzido, em torno de seis ordens de magnitude menor que a do sinal de bombeamento. Neste trabalho propomos a utilização de um dispositivo denominado CPC (Compound Parabolic Concentrator) para se otimizar a coleta do sinal Raman produzido pelo tecido. O CPC é formado pela rotação de uma curva parabólica em torno de seu eixo. Devido a sua geometria, todos os raios que penetram no CPC tem sua inclinação corrigida por um determinado fator, que depende da posição do raio. Desta maneira, todos os raios gerados na superfície da amostra, em um ângulo de $\pi/2$ steroradianos são coletados pelo dispositivo e transformados em um conjunto de raios onde a inclinação máxima é definida pela relação entre os diâmetros das aberturas de entrada e de saída do CPC. Um caso típico e uma relação de 0.2 a 0.3 que abrange a maioria dos valores de abertura numérica para fibras óticas comerciais. Este dispositivo pode apresentar uma melhoria na coleta do sinal Raman por um fator que varia entre 12 a 24 dependendo a distribuição de potência na superfície do tecido e na entrada do CPC.

SEMICONDUCTOR LASER FOR GIGABIT/S LIGHTWAVE TRANSMISSION.

ANTONIO BORDEAUX-REGO, CLAUDEMIR CORAL, WILSON CARVALHO, JOSE R. CAUMO, RICARDO B. MARTINS

TELEBRAS-CPQD. Campinas - 13088-061 - SP - Brasil

Several modifications of the InGaAsP/InP double-channel buried heterostructure DCPBH semiconductor laser are described with reduced parasitic capacitance and leakage current. These modifications improve the modulation speed and decrease the laser threshold of the laser chip. A mesa structure was introduced to reduce and exclude outside heterojunction. The semiconductor laser model, presenting both heterojunction and InP homojunction, shows improvement on laser behavior. We observe the effect of mesa width (W_m) on laser parameters. Mesa width of 20 microns and 10 microns were fabricated to obtain capacitance about 30 pf and 10 pf respectively. The threshold current decrease from 15 mA to 10 mA due to leakage current reduction, and the laser bandwidth increase from 2 GHz to 6 GHz at 8mW optical power chip emission, respectively. The microwave design and simulation employing high frequency equivalent circuit and rate equations show the influence of laser parameters (differential gain) and packaging components (thermo- electric cooler, lead inductance, wiring, etc). In this work we present a new approach of the DCPBH structure and packaging improving high-frequency modulation performance up to 6 GHz.

**TÉCNICA DE INTERFEROMETRIA
ÓPTICA APLICADA PARA
CARACTERIZAÇÃO DE
MICROVIBRAÇÕES EM SÓLIDOS**

DEMARTONNE R. FRANÇA, ÉDY C. MONTEIRO,
CLÁUDIO KITANO, JOSÉ EDIMAR B. OLIVEIRA
IEEC - ITA - CTA
COSME ROBERTO M. DA SILVA
AMR - IAE - CTA

A utilização da técnica de interferometria óptica para caracterizar microvibrações em sólidos e determinar parâmetros elásticos, tais como módulo de Young e razão de Poisson, apresenta várias vantagens com relação às técnicas convencionais que envolvem a utilização de transdutores. Entre as vantagens, ressalta-se o fato de que a geração e a detecção das microvibrações podem ser realizadas por técnicas puramente óptica, o que torna desnecessário a existência de contato físico entre a instrumentação e o corpo de prova. Esta característica torna a técnica extremamente interessante para a caracterização de materiais em altas temperaturas ou com geometrias complicadas que tornam inviáveis a utilização de transdutores. Nos últimos três anos, os autores deste trabalho realizaram a análise e a implementação de interferômetro óptico heterodino de tipo Mach-Zehnder. Vários resultados experimentais já foram obtidos, os quais mostram excelente concordância com as previsões teóricas, obtidas a partir do modelamento de Interação Acústico-Óptica Superficial (IAOS). Este trabalho apresenta uma análise teórica e experimental da IAOS, envolvendo ondas acústicas longitudinais em sólidos isotrópicos. Os resultados desta análise possibilitaram a determinação da função de transferência de um interferômetro de tipo Mach-Zehnder heterodino, onde o efeito das microvibrações elásticas, quer contínuas ou pulsadas, é determinado de forma criteriosa. Resultados experimentais concernentes com a amplitude, composição espectral e velocidade de propagação das microvibrações em um sólido

são apresentados e discutidos. Através do valor medido da velocidade de propagação, obtém-se uma estimativa da constante elástica do sólido, o qual exibe boa concordância com valores obtidos por outras técnicas.

**COMPENSAÇÃO DO ESPALHAMENTO EM
PAREDES DE CÂMARAS DE IONIZAÇÃO
ATRAVÉS DO AUMENTO DA PRESSÃO**

RENATO GLAUCO DE SOUZA RODRIGUES, CARLOS
ALBERTO PELÁ, THOMAZ GHILARDI NETTO
Universidade de São Paulo, Faculdade de Filosofia
Ciências e Letras de Ribeirão Preto

Este trabalho apresenta resultados relativos ao comportamento de câmaras de ionização com ar comprimido quanto a linearidade e dependência em energia. A utilização de paredes com alta resistência mecânica, não equivalentes ao ar, provocam dois efeitos indesejáveis: absorção e espalhamento na parede. A absorção no corpo do gás, por outro lado, concorre com esses efeitos. A combinação dessas contribuições de maneira conveniente permite construir câmaras de ionização pressurizadas com ótimas características de linearidade e dependência energética. Fazendo as curvas de pressão vs. corrente de ionização para duas fontes de radiação de diferentes energias (660 KeV do célio 137 e 40 KeV do aparelho de raios-x), é possível identificar uma pressão onde a câmara apresenta a mesma medida nas duas fontes. A dependência em energia encontrada a essa pressão é bastante satisfatória, uma vez que a parede da câmara tem espessura de 2 mmAl.

*Workshop: Instrumentação na Área
Agropecuária (INS) - 09/06/95*

APLICAÇÕES DE ESPECTROSCOPIA NA PESQUISA AGROPECUÁRIA

LADISLAU MARTIN NETO
EMBRAPA/CNPDIA, C.P. 741, 13560-970 São Carlos/SP

No CNPDIA e contando com a colaboração do IF e IQ da USP em São Carlos e também com intercâmbio internacional temos utilizados métodos espectroscópicos, como ressonância paramagnética eletrônica (EPR), ressonância magnética nuclear (NMR), infravermelho e absorção de luz UV-visível em estudos nas áreas de ciência do solo, meio ambiente, biotecnologia e processos de conservação de alimentos. Nessa apresentação descreveremos resultados recentes usando técnicas espectroscópicas em estudos de mecanismos de sorção e degradação de herbicidas no solo e sobre efeitos de manejos do solo sobre a matéria orgânica e seus constituintes. Um dos herbicidas estudados foi atrazina (2 cloro-4- etilamina-6 isopropil amina-s-triazina), um dos mais comumente encontrado em águas de lençol freático e de superfície na Europa e Estados Unidos, e que vem sendo amplamente utilizado no Brasil e no Mundo. Neste trabalho e usando EPR, infravermelho e UV-visível foi possível mostrar que somente mecanismos de fraca adsorção ocorrem entre atrazina e substâncias húmicas (principal sítio de sorção do herbicida no solo) e que a rápida degradação da atrazina ocorre somente em pHs baixo (menor que 3). Esses fatos confirmam o potencial de contaminação ambiental da atrazina, conforme identificado em experimentos de campo em outros países. Em

outro trabalho usando EPR, NMR de ^{13}C e análises elementares foi possível obter informações sobre os efeitos de diferentes manejos do solo, como manejo convencional, plantio direto e também de uma área de floresta para comparação, sobre a matéria orgânica e seus constituintes húmicos. Essas informações são úteis para identificar alternativas de manejo do solo mais adequadas, que minimizem a degradação ambiental, em busca do chamado desenvolvimento sustentável.

Fontes Financiadoras: FAPESP (Projeto Temático 90-3773-7) e EMBRAPA.

OPORTUNIDADES DA FÍSICA EM INSTRUMENTAÇÃO AGROPECUÁRIA: ALGUNS EXEMPLOS

SILVIO CRESTANA

EMBRAPA/CNPQ, C.P. 741, 13560-970 São Carlos/SP

Existem várias oportunidades de pesquisa, principalmente de natureza metodológica, envolvendo problemas, técnicas, modelos, sistemas e equipamentos de interesse comum da Física e da Instrumentação Agropecuária. A EMBRAPA, através de seu Centro de Instrumentação, vem, nos últimos 10 anos, explorando tais oportunidades. A título de exemplo, uma resenha de alguns trabalhos, projetos, teses e principais resultados obtidos será elaborada. Em particular, será dada ênfase ao uso das tomografias de raios X, gama e NMR obtidas em laboratório, em hospitais e em campo através de equipamentos comerciais e não comerciais especialmente contruídos, produzindo imagens com resolução espacial de alguns micrômetros até alguns centímetros. Sistemas de digitalização de imagens e de coleta automática e remota de dados edafológicos serão apresentados. Simulações de transporte de água e solutos no solo empregando teoria da percolação por invasão e modelo de balanço de massa também serão mostradas.

Fontes Financiadoras: FAPESP (Projeto Temático 90-3773-7) e EMBRAPA.

Tendências e perspectivas em instrumentação agropecuária

ANTONIO MAURO SARAIVA, CARLOS EDUARDO CUGNASCA

Departamento de Engenharia de Computação da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo.

SÉRGIO MIRANDA PAZ

Laboratório de Automação Agrícola Escola Politécnica da Universidade de São Paulo Depto. de Engenharia de Computação

A instrumentação agropecuária tem apresentado um rápido avanço no mundo nas últimas décadas, em decorrência da evolução da tecnologia eletrônica no mesmo período, e em função da constatação da sua importância como ferramenta na pesquisa e na produção agropecuária. Esse avanço colocou-a virtualmente em todas as áreas da atividade agropecuária, desde as operações de campo até o pós-processamento de produtos. Essa crescente utilização, por sua vez, tornou necessários novos aperfeiçoamentos e evidenciou problemas que a área apresenta. Uma necessidade premente é a pesquisa em sensores específicos para usos e aplicações agropecuárias, os quais já foram apontados diversas vezes como pontos de estrangulamento no desenvolvimento de novas aplicações. Uma tendência que se verifica na instrumentação de maneira geral, é a da incorporação de um primeiro nível de processamento junto aos sensores, caracterizando o que se convencionou chamar de instrumentação inteligente. Tornada possível graças ao barateamento dos microprocessadores, a instrumentação inteligente apresenta vantagens significativas em relação às arquiteturas de processamento centralizado. Por outro lado, para que essas vantagens sejam plenamente utilizadas, surge a questão da padronização das interfaces para instrumentos, controles e demais sistemas. A exemplo do que vem ocorrendo na indústria, com a adoção de padrões de barramentos de campo, também os sistemas agropecuários vem merecendo esforços de padronização de interfaces e protocolos de comunicação, por parte de diversos comitês técnicos e grupos de trabalho coordenados pela ISO - International Standardization Organization, com a participação e colaboração de especialistas de diversos países.

Determinação da concentração de Ti em amostras de solo com o uso da técnica de indução de raios X por prótons (PIXE) e uma comparação com a técnica de ativação por neutrons (NAA)

PAULO ESTEVÃO CRUVINEL

EMBRAPA-CNPDIA, Rua XV de Novembro 1452, São Carlos SP

PAULO EDUARDO ARTAXO NETTO, JOSÉ VANDERLEI MARTINS

Instituto de Física da USP, Rua do Matão, travessa R 187, Pinheiros, São Paulo, SP

MARIA JOSÉ AGUINE ARMELIN

IPEN, Travessa R 400 Caixa Postal 11049, Pinheiros, São Paulo

SÍLVIO CRESTANA

EMBRAPA-CNPDIA, Rua XV de Novembro 1452, São Carlos SP

Um método alternativo para identificação e medida de elementos, elementos-traço e micronutrientes em solos e plantas vem sendo desenvolvido com o uso da técnica de indução de raios X por prótons (PIXE). Neste trabalho medidas da concentração em (ppm) e um estudo do elemento Ti em amostras de solo de um campo agrícola de 3500 m² é apresentado. Foram também realizadas simultaneamente análises por ativação com neutrons (NAA) e um estudo comparativo é apresentado. Resultados mostraram uma correlação com $r^2=0.799$ entre as metodologias utilizadas na determinação do elemento Ti em amostras de solo.

Instrumentação na Área Agropecuária (INS) - 09/06/95

UM PROTOCOLO DE COMUNICAÇÃO PARA BARRAMENTO SERIAL MULTI-PONTO.

ANDRÉ TORRE NETO, RICARDO INAMASU

EMBRAPA-CNPDIA

NELSON CORONA JR

USP-EESC

SWAMY PAVÃO

UFSCar

Um sistema de aquisição de dados para leitura de sensores distribuídos em grandes áreas, envolvendo distâncias da ordem de 1000 m, pode ser implementado através de barramento serial multi-ponto. Um dos padrões estabelecido pela Electronic Industry Association (EIA) para esse propósito é o RS-485. A EIA porém estabeleceu somente as características elétricas desse padrão, não existindo nenhuma definição de protocolo de baixo nível para ele. Neste trabalho se propoz um protocolo de comunicação para o padrão RS-485 baseado no modelo OSI (Open System Interconnection) da ISO (International Standard Organization) com implementação das camadas 1, 2 e 7 daquele modelo, que se referem respectivamente ao meio físico, enlace e aplicação. Na camada 1 se utilizou das definições do RS-485. Para a camada 2 foi especificado o formato dos pacotes de dados. Na camada 7 foram definidos um conjunto de comandos específicos para um sistema de aquisição de dados. As principais características do protocolo proposto são: a) Modo de operação pool/response b) Detecção e correção de er-

ros c) Transferência de blocos de dados de tamanho variável (0 a 255 bytes) d) Permite comandos universais (broadcasting commands) e) Endereça até 255 sensores O protocolo foi utilizado em um sistema de monitoramento remoto de variáveis ambientais e tem apresentado resultados satisfatórios. Além do campo, sugere-se sua utilização para sistemas de aquisição de dados em plantas laboratoriais e industriais de grande extensão. (Este trabalho contou com o apoio da FAPESP processo 90/3773-7)

SISTEMA MICROCONTROLADO PARA MEDIDAS DA TAXA DE DIFUSÃO DE OXIGÊNIO (T.D.O.) E POTENCIAL DE OXI-REDUÇÃO DO SOLO, in-situ

PAULO SERGIO DE PAULA HERRMANN, LUIZ

ALBERTO COLNAGO, RICARDO YASSUSHI INAMASSU

Centro Nacional de Pesquisa e Desenvolvimento de

Instrumentação Agropecuária CNPDIA/EMBRAPA

PEDRO MARQUES DA SILVEIRA

Centro Nacional de Pesquisa de Arroz e

Feijão-CNPAF/EMBRAPA

NELSON CORONA JUNIOR

Escola de Engenharia de São Carlos-USP

Com o advento dos microcontroladores da família 535, os sistemas de coleta de dados ganharam novas características em termos de redução do tamanho físico, no consumo de energia, na versatilidade no processamento do sinal, manipulação dos dados e capacidade de memória. Sendo assim a instrumentação para medidas de parâmetros físicos e químicos do solo, no campo, adquiriram padrões de confiabilidade que antes só se obtinham no laboratório. A importância da medida da T.D.O. e potencial de oxi-redução do solo, esta no

fato de caracterizar o estado de aeração e do possível grau de toxidez devido a elementos químicos no solo. Considera-se aeração do solo o processo de renovação do seu ar, tendendo a igualá-lo ao ar atmosférico. A falta de oxigênio no solo, provocado pelo excesso de água, pode afetar a produtividade no plantio de feijão, milho, trigo em solos varzeados. Desta forma a quantificação do estado de aeração do solo, no campo, é de fundamental importância. A T.D.O. está relacionada com a corrente que circula entre um eletrodo de platina e de calomelano. Um microamperímetro foi desenvolvido para realizar medidas na faixa de 0 a 19,99 micro(A) a medida do potencial de oxi-redução é feita através de um eletrodo específico, ligado a um milivoltímetro projetado para medir na faixa de - 200,0 mV, 0, + 200,0 mV. O sistema desenvolvido para coleta dos dados da T.D.O. e potencial de oxi-redução, utiliza além do microcontrolador SAB 80C535, outros dispositivos de controle e periféricos utilizando tecnologia CMOS visando o baixo consumo. Para reduzir o consumo da bateria o equipamento é energizado somente nos períodos programados para coletor de dados. No restante do tempo apenas um "chip" relógio calendário permanece ativo, desta forma minimizando o consumo de corrente. A capacidade de memória do instrumento é de 32 Kbytes. O software residente para controle e para aquisição de dados foi estruturado para armazenar os valores dos dois parâmetros, em três distintos intervalos de tempo a ser escolhido, os quais são: 10, 20 ou 30 minutos. Após o período máximo de 192 horas (30 minutos de intervalo de aquisição) é necessário carregar as baterias de NiCd, como também transferir os dados para um computador pessoal por intermédio de uma interface RS232. Com os dados no computador é possível trabalhar com as planilhas eletrônicas.

PROJETO E IMPLEMENTAÇÃO DE UM CONTROLADOR LÓGICO PROGRAMÁVEL DE BAIXO CUSTO

JOAO E. M. PEREA MARTINS

Departamento de Computação (FC) - UNESP - Bauru/SP

ÁLVARO GARCIA NETO

Dep. de Física e Informática - IFSC - USP - Sao

Carlos/SP

Este trabalho consiste no projeto e implementação de um controlador lógico programável (CLP) de baixo custo que pode ser utilizado em diversas aplicações de aquisição de dados e controle de processos, bastando que seja trocado o software de controle ou que sejam implementadas pequenas complementações de hardware, quando necessárias. O projeto foi desenvolvido com base no microcontrolador programável 80N535, que permitiu o desenvolvimento de um hardware com poucos componentes eletrônicos, tamanho reduzido, baixo consumo e fácil implementação. O CLP possui uma memória não volátil de dados (flash) com

64 Kbytes, oito entradas para conversão A/D, duas interrupções externas e dois temporizadores/ contadores, visor de cristal líquido, teclado com 16 teclas, interface serial no padrão RS-232 e clock de 12 MHz. Para reduzir o número de componentes eletrônicos, os dispositivos auxiliares (visor, teclado, etc) foram diretamente controlados através de portas de E/S do microcontrolador, exigindo ênfase nas técnicas de desenvolvimento do software de controle. Este controlador foi inicialmente utilizado na aquisição de dados em pluviômetros, permitindo o registro automático do volume de chuvas em uma determinada região geográfica. Posteriormente ele foi usado no controle térmico de um instrumento para automação de experimentos com PCR (polymerase chain reaction), que é uma técnica da biologia molecular que permite a replicação de DNA in vitro. Um instrumento completo para automação de PCR necessita, além do controlador, de uma fonte de calor que garanta a homogeneidade térmica do sistema e permita rápidas variações de temperatura. O instrumento completo se encontra em fase de desenvolvimento e testes, contando com apoio financeiro do PADCT/CNPq.

DESENVOLVIMENTO DE CÂMARAS DE IONIZAÇÃO PARA O LNLS

EDILSON TAMURA, HÉLIO TOLENTINO

Laboratório Nacional de Luz Síncrotron / CNPq

As câmaras de ionização são os detectores mais utilizados para realizar espectroscopia de absorção de raios-X utilizando fonte de luz síncrotron. Apresentamos um sistema de detecção utilizando duas câmaras de ionização, dois pré-amplificadores e um controle de ganho. O sistema foi caracterizado no LNLS, utilizando um tubo de raios-X convencional, e na fonte de luz síncrotron do CAMD/EUA. A câmara apresentou excelente linearidade com fluxos de 2×10^3 fótons/s até $1,3 \times 10^7$ fótons/s. Sua eficiência quântica foi determinada na faixa de 5,0 keV e 13,2 keV. A eletrônica para a leitura das câmaras apresentou um desempenho satisfatório para as escalas menos sensíveis; para as mais sensíveis existe um deslocamento do sinal com a temperatura ambiente. Em função dos resultados obtidos, foi projetado uma nova câmara de ionização e sua eletrônica associada. A nova câmara possui maior rigidez mecânica e melhor isolamento elétrica. A nova eletrônica possui maior estabilidade com a temperatura e maior sensibilidade de entrada.

A FILTERING SPECTRAL DECOMPOSITION METHOD

WALDEMAR BONVENTI JR, SADAQ ISOTANI

Institute of Physics of University of São Paulo

ANTONIO R. P. L. DE ALBUQUERQUE

Computer Systems Department of Escola Politécnica of

University of São Paulo

A method for improving spectral decomposition of spectrometric measurements via numerical processing of the spectrometric data has been proposed. The method is suitable for the spectral decomposition of spectrometric data, were the superposition of many broad lines introduce uncertainties in the fitting process. The present reported decomposition method, starts from the identification of the most intense bands, subtracting them of the spectrometric measurements, and successively identifying the remaining bands in the difference spectrum. An application of this method has been done for the spectral decomposition of a set of spectrometric measurements in natural crystals from Minas Gerais, Brazil. This application allowed identification of hidden lines. In especial it was possible to show in spodumene, beryl and topaz, silicate class of natural crystals of gem quality, that the spectrum in the ultraviolet region is composed by a triplet and a singlet.

AN OVERVIEW OF AN AUTOMATION OF A COOLING EMBRYOS SYSTEM.

LADISLAV MARCELINO RABELLO, PAULO ESTEVÃO CRUVINEL, VICTOR BERTUCCI NETO

Brazilian Agricultural Research Enterprise-CNP/DIA

It was developed a computadorized system for mammalian embryos freezing. The design was developed in order to obtain an optimum performance. It was used a discrete control in the process that is equivalent of three mode proportional-plus-integral-plus-derivative (PID) controller for digital feedback loops. A number of dedicated and discrete algorithms were also developed and it allows to the users the program of several different ramps with relate to controller gain, reset timers, derivation time to the gain, time constants controller and selection of the Dead time of simple process models. It is possible to program temperature in the range of -40 Celsius degrees to +40 Celsius degrees starting with 0.1 Celsius degrees per minute. It was also used the refrigerant R-502 which meet the safety requirements often made by customers. The software of the system was developed in C++ language under a DOS environment. This paper describes the automation process used to designed the entire system.

Instrumentação (INS) - 09/06/95

Sobre os Mecanismos de Trabalho e Operação dos Diodos de Contato de Ponta do Tipo Metal-Isolante-Metal (MIM)

EDJAR MARTINS TELLES, ARTEMIO SCALABRIN, DANIEL PEREIRA

Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP

Diodos de contato de ponta do tipo Metal-Isolante-Metal (MIM) tem sido freqüentemente usados com sucesso como detector e misturador de frequências até 200 THz Entretanto, os mecanismos físicos responsáveis na sua operação ainda não são completamente entendidos. Tunelamento quântico dos elétrons através da camada isolante entre os metais é o mais aceito para explicar a rápida resposta desses diodos e seu funcionamento numa ampla faixa espectral. Além deste mecanismo existe outro mais lento, de origem térmica, que também contribui para a operação do diodo. Neste trabalho descreveremos estes mecanismos e apresentaremos dados acerca da construção e caracterização dos diodos como detector de radiação laser submilimétrica, misturador e gerador de harmônicos. O diodo construído é formado por um filamento de tungstênio e um cilindro de níquel de bases polidas. O filamento é ajustado mecânicamente para contato pontual com a camada de óxido de níquel formada naturalmente na base polida do níquel. Os processos não lineares ocorrem nesta camada estreita que se comporta como uma barreira de potencial. Suporte financeiro: Fundação Banco do Brasil, FAPESP, CNPq, FAEP-UNICAMP

TOMOGRAFIA SIMULTÂNEA DE DUPLA ENERGIA PARA CARACTERIZAÇÃO FÍSICA DE UM MEIO POROSO DEFORMÁVEL SOB DIFERENTES GRAUS DE HIDRATAÇÃO.

FABIO AUGUSTO MEIRA CÁSSARO

Universidade Estadual de Ponta Grossa, Campus Uvaranas

SILVIO CRESTANA

CNP/DIA-EMBRAPA, São Carlos

Neste trabalho introduz-se a tomografia de dupla energia simultânea, como uma nova metodologia capaz de determinar simultaneamente a densidade global e a umidade, parâmetros relevantes na caracterização física de materiais porosos com características expansivas. Em particular, o método foi aplicado à caracterização de um solo com comportamento expansivo-contrativo quando submetido a diferentes graus de hidratação. São apresentadas medidas empregando dois picos distintos de radiação provenientes da filtragem por placas de estanho, da radiação de Bremsstrahlung gerada em uma fonte de Raios X. Também, em caráter preliminar, foram realizadas determinações simultâneas de densidade e umidade utilizando-se picos distintos de radiação Gama, um proveniente de uma fonte de Amerício (241) e o outro de uma fonte de Césio (137). Os dados obtidos pela técnica propiciaram a análise da expansividade do solo e as determinações foram interpoladas através do "modelo das três retas". Em conclusão: o desenvolvimento e o uso do tomógrafo de dupla energia simultânea constitui-se em método apropriado para medir simultaneamente a densidade global e o conteúdo de água

de materiais porosos expansivos no caso, o solo empregado neste trabalho. Agradecimentos: CNPq, FAPESP (Proc.90/3773-7), CNPDIA-EMBRAPA, DFCM-USP.

INDUCTIVELY COUPLED PLASMA MASS SPECTROMETRY: PRINCIPLES AND APPLICATIONS

STEVEN F. DURRANT
IFGW, UNICAMP

An argon-based inductively coupled plasma (ICP) is an almost ideal source for the production of singly charged positive ions. When an aerosol is introduced into the central channel of such a plasma, rapid desolvation, vaporization, atomization and ionization are achieved. The populations of ions produced are representative of the sample; if the ions can be separated by a mass spectrometer the original elemental sample composition can be discovered. A major difficulty, the linking of the ICP at atmospheric pressure to a mass spectrometer operating at around 10^{-6} torr, is overcome by use of a purpose-built differential pumping interface. In this work, the principles of quadrupole ICP-mass spectrometry for elemental analysis are outlined. Some illustrative applications of the technique are also given.

DESENVOLVIMENTO DE INSTRUMENTAÇÃO PARA ELETRÓLISE DO ESTADO SÓLIDO

KEIZO YUKIMITU
Fac. Eng. Ilha Solteira UNESP

A eletrodifusão ou eletrólise ("sweeping") é uma técnica usada no estudo das propriedades físicas do quartzo devido a presença de íons alcalinos no canal estrutural, na direção do eixo óptico c , e é um processo de alta temperatura. Simultaneamente à alta temperatura é aplicado um campo elétrico (2000 V/cm), na direção do eixo óptico c , na amostra de quartzo. Este campo elétrico remove os íons presentes no canal, substituindo-os por íons alcalinos.

Neste trabalho foi construído um equipamento que permitiu a realização da eletrólise no quartzo natural. Basicamente, o equipamento consiste de um forno cilíndrico, com estrutura feita de chapas de aço inoxidável, com articulação das duas metades. A câmara de trabalho é provido de suportes para os eletrodos de níquel, entre os quais a amostra é inserida. A posição de trabalho é na vertical. O controle da temperatura é feito por um controlador eletrônico de temperatura. O campo elétrico é fornecido por uma fonte de alta tensão estabilizada.

A análise dos resultados, através das técnicas de Termoluminescência, Absorção Óptica e Condutividade Elétrica mostrou que a eletrólise do estado sólido, utilizando o equipamento construído, foi executado com sucesso.

A BROAD-BAND AUTOMATED PULSE NMR SPECTROMETER

I. S. OLIVEIRA, R. SARTHOUR, F. F. PONCE*, G. RICHÁ*, C. V. B. TRIBUZY, V. L. B. JESUS, A. P. GUIMARÃES
CBPF, Rua Dr. Xavier Sigaud 150 - URCA, 22290-180, RJ

A "home-made" automated pulse NMR spectrometer used for the study of magnetic materials in the range of 20-200 MHz is described in detail. The modulator comprises two switches, which receive the signals from the synthesiser and pulse generator, and a power combiner. A third switch is used for signal inversion and a baseline subtraction. The receiver is built from a 90° phase-shifter and two DBM's (double-balanced mixers) for quadrature detection. The detection is made using a non-fixed reference signal since the amplification is made with broad-band devices. The spin-echo signals in quadrature are digitised in a TDS 520A Tektronix digital oscilloscope which integrates the signals yielding their areas. Frequency sweeping and data acquisition is fully automatic. The duplexing scheme for decoupling the transmitter from the receiver, the pre-amplification stage and the main amplifier for the demodulated signal are described in detail. One of the main features of the spectrometer is its low cost when compared to the commercial devices. Examples of spectroscopy, relaxation times and electric field gradient measurements in magnetic materials are presented.

(*) Centro Federal de Educação Tecnológica Celso Suckow da Fonseca - RJ

CONSTRUÇÃO DE UM ESPECTRÓGRAFO COM DETETOR CCD

JOSIMAR SARTORI, LUIS ANTONIO DE OLIVEIRA NUNES

Instituto de Física de São Carlos - DFI - USP
MARIA JOSÉ VALENZUELA BELL
IFGW - UNICAMP

Desenvolvemos um espectrógrafo do tipo Czerny-Turner que utiliza como detetor um CCD ("diode array") com 2048 canais e que será usado como frequencímetro acoplado ao laser de corante. A vantagem de se utilizar o CCD é que permite a detecção simultânea e em tempo real de uma região de comprimentos de onda separados espacialmente por um elemento dispersivo. O aparelho é composto de 2 espelhos esféricos de 25 cm, uma grade de difração de 1800 linhas/mm e uma fenda de entrada, fornecendo uma resolução teórica de aproximadamente 3nm/mm. estes números foram escolhidos de forma que a região de funcionamento seja de 600 a 680 nm, que é a região de interesse para as amostras que usamos (super-redes de GaAs com dopagem tipo δ). Outros intervalos podem ser

selecionados mudando o ângulo da grade de difração. A eletrônica necessária para fazer a interface entre o CCD e o computador (ou também osciloscópio) foi desenvolvida no laboratório. A calibração do sistema foi feita usando uma lâmpada de Ne, que apresenta várias linhas de emissão conhecidas. Os resultados obtidos mostraram-se satisfatórios e o aparelho pode inclusive ser usado alternativamente para fazer medidas de luminescência.

Projeto de um Extensômetro a Fibra Ótica

A. DE JESUS, E. G. GONÇALVES, R. BARRETO DA SILVA, L. SILVEIRA JR, R. A. ZÂNGARO, MARCOS TADEU T. PACHECO

UNIVAP - Univ. do Vale do Paraíba, São José dos Campos - SP

A tecnologia de fibra ótica tem permitido o desenvolvimento de diversos tipos de sensores aplicados em áreas bastante específicas. As estruturas de concreto utilizam atualmente o extensômetro tipo Carlson, que tem seu princípio físico baseado na variação da resistência de um condutor metálico. Este sistema é introduzido na estrutura de concreto, na fase de concretagem da estrutura. A dilatação do concreto é então transferida ao condutor que tem sua resistência alterada em função da dilatação. Devido a problemas do range, o condutor tem uma mola acoplada à sua extremidade. Este tipo de extensômetro apresenta dificuldades extras no que se refere à calibração, uma vez que o coeficiente de elasticidade da mola e do condutor variam com a temperatura. O projeto trata-se de um extensômetro à fibra ótica com as seguintes características: range de 150 μm com resolução igual a 1 μm . O extensômetro a ser desenvolvido, prevê a utilização da fibra ótica como elemento sensor. O sistema aqui proposto utiliza duas fibras óticas alinhadas axialmente. O princípio físico baseia-se no acoplamento de potência de uma fibra à outra. Espera-se obter com este tipo de sensor as seguintes vantagens: facilidade de instalação, inércia à variações de temperatura, facilidade de calibração e boa repetibilidade. O projeto aqui proposto utiliza a técnica de modulação em intensidade. Esta técnica consiste na observação da variação da intensidade do sinal luminoso na saída do sistema, em função de um efeito externo aplicado à fibra ótica. Este efeito, dilatação do concreto, atenua a luz guiada, permitindo assim sua medida. Para o tipo de sensor proposto (extensômetro), a medida será efetuada em função da separação física entre as faces de duas fibras óticas.

Resultados de campo de medidas de micro-variações de órgãos vegetais com o uso de uma Instrumentação baseado em fibra ótica

WILSON SELUQUE FERREIRA, PAULO ESTEVÃO CRUVINEL

Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária-CNPDA

São apresentados neste trabalho resultados de campo obtidos com o uso de um instrumental baseado em fibra ótica, para monitorar continuamente micro-variações nas dimensões de órgão aos vegetais. As medidas de micro-variações dos órgãos vegetais estão diretamente correlacionadas com o potencial hídrico da planta. Um sistema coletor de dados baseado no microcontrolador 80C31, para avaliação de longo termo do crescimento de órgãos vegetais baseado em módulos básicos dos fabricantes, foi também incluído e é apresentado no trabalho. Na instrumentação utilizou-se fibra ótica, laser semiconductor operando em 1.3 μm e arquitetura baseada em um interferômetro de Mach-Zehnder. O software do sistema coletor foi desenvolvido em linguagem C e compilado para o conjunto de instruções do microcontrolador 80C31. Resultados mostraram um comportamento adequado e coerente entre as medidas de micro-variações de órgãos vegetais com o transdutor baseado em fibra ótica e as medidas realizadas com parâmetros climatológicos, tais como temperatura ambiente, umidade relativa do ar e radiação global.

Fluorescência de Raios-X Moles em Estroncio, Bário, Cobre e Silício

GUILHERME BUENO FRAGUAS

LNLS e FEE-UNICAMP, Campinas SP Brasil

PAULO DE TARSO FONSECA, ANTONIO RUBENS

BRITTO DE CASTRO

LNLS e IFGW-UNICAMP, Campinas SP Brasil

JOSE GERALDO PACHECO, MANUEL ERNESTO

HOMEM DE GOUVEIA JUNIOR

LNLS, Campinas SP Brasil

Apresentamos os primeiros espectros de fluorescência no ultra violeta de vácuo (VUV) obtidos com o espectrógrafo de VUV construído no LNLS, referentes a transições L M N de vários elementos.

As amostras foram excitadas com um feixe de elétrons (2kV, 100 μA). A fluorescência foi dispersada por uma grade de difração holográfica sobre substrato toroidal, em geometria de incidência rasante, e detectada por um channeltron recoberto de CsI.

Os espectros obtidos para Si, Cu, Sr e Ba permitiram uma verificação da calibração espectral do instrumento, feita antes com luz sincrotron.

Medimos a eficiência de fluorescência do Sr em SrCl_2 ; o valor obtido (10^{-6} fotons/elétron) é consistente com dados da literatura para a eficiência de criação de lacunas e para a probabilidade de recombinação radiativa.

Condicionamiento Espectral de la Luz de un Wiggler

OSCAR ARMANDO GARCÍA PÉREZ, ANTONIO
RUBENS BRITTO DE CASTRO
LNL y IFGW-UNICAMP Campinas SP Brasil

Se diseñó un filtro de películas de carbono para condicionamiento espectral de la luz sincrotrón producida por el wiggler a ser instalado en el LNL.

El wiggler del LNL producirá haces de luz de alta potencia, por lo que el "cristal de Bragg" usado para monocromatizar estará sujeto a deformaciones térmicas. Es posible cortar las componentes espectrales de longitudes de onda largas usando filtros. Para la construcción del filtro hemos elegido el carbono, porque es barato, abundante en la naturaleza, no tóxico, puede ser preparado en la forma de películas con espesor nanométrico disponibles comercialmente y, tiene excelentes propiedades termo-mecánicas.

El filtro se compone de 6 películas comerciales de carbono; la transmisión en $8keV$ es de 75 %, teniendo un máximo en $\lambda = 1.9\text{\AA}$; el filtro bloquea el 92 % de la potencia total radiada por el wiggler en longitudes de onda fuera de la faja espectral de interés.

La temperatura máxima alcanzada en cada película, aprox. $1300^{\circ}K$, corresponde a presiones de vapor del carbono compatibles con UHV.

Fueron examinados los efectos de impurezas tales como O_2 , Na y H , y verificado que su presencia introduce variaciones despreciables en la transmisión del filtro.

Para montar el filtro, se propone alterar un componente padrón de los *front-ends* de las líneas de luz, la llamada *máscara refrigerada*, capaz de disipar las potencias involucradas.

INSPEÇÃO VISUAL AUTOMÁTICA APLICADA AO CONTROLE DE QUALIDADE DE OBJETOS DE MÉDIA COMPLEXIDADE UTILIZANDO TRANSFORMADA DE HOUGH

ERNANY PARANAGUÁ DA SILVA, ADILSON GONZAGA
EESC-USP

Este trabalho prevê a apresentação de um algoritmo que opere em tempo real em um sistema de inspeção visual automática, para a detecção de posicionamento de partes, em uma linha de montagem industrial. O algoritmo para o reconhecimento dos objetos foi implantado utilizando o método da Transformada de Hough (HT). A análise dos resultados mostra ser satisfatória para a determinação do posicionamento de peças de média complexidade. O sistema adquire a imagem através de uma câmera CCD, sobre uma esteira rolante. O processamento da imagem é feita por um PC 486. Através da análise do arranjo acumulador possível se determinar as características a serem inspecionadas tais como,

posição, perímetro, ortogonalidade, área, etc. Pelo monitor do microcomputador é possível visualizar todas as etapas da inspeção, possibilitando supervisionar e ajustar quando houver necessidade.

DESENVOLVIMENTO DE UM SUSCEPTÔMETRO AC PARA A INVESTIGAÇÃO DE MATERIAIS.

FABIANO YOKAICHIYA, PAULO CESAR DE CAMARGO,
MÁRLIO BONFIM
UFPR

A susceptibilidade magnética AC de um material representa a derivada da magnetização com relação a um campo magnético aplicado. O objetivo deste projeto é a determinação de propriedades magnéticas de materiais através de um método indutivo. O sistema de medição consiste em uma bobina de excitação e duas de recepção montadas coaxialmente, sendo estas conectadas de forma a gerarem sinais em oposição. Utiliza-se uma configuração que permite a separação de fases diretamente do sinal do secundário, diferenciando-se assim da ponte de Hartshorn que usa uma amostra do sinal do primário como referência. Construiu-se um circuito de detecção que substitui o amplificador lock-in, diminuindo-se substancialmente os custos da instrumentação. Após a verificação da sensibilidade do sistema com relação a diferentes materiais, procurou-se aperfeiçoar o método de separação das fases no final da saída, de modo que, variando-se contribuições numa das fases, o sinal da fase em quadratura não se altere. Nas amostras de cobre, ferro e alumínio investigadas, pode-se verificar claramente a separação entre as correntes de Foucault e os momentos magnéticos. A frequência de trabalho é de 15kHz, ocasionando uma penetração da ordem de alguns milímetros nos metais em geral. No caso de materiais ferromagnéticos, esta frequência é suficientemente alta para que os sinais, tanto em fase quanto em quadratura, deem contribuições mensuráveis. Uma série de ligas de Cromo-Ferro e Cromo Silício, contendo diferentes concentrações de Vanádio e Manganês, foi analisada com relação a diferentes fases magnéticas. A investigação destes materiais com variação de temperatura apresentou instabilidade devido ao aparecimento de gradientes de temperaturas entre as bobinas secundárias. Procurou-se contornar o problema com banhos térmicos e vácuo, mas a contribuição não se mostrou muito eficaz. Para uma automatização do sistema, construiu-se um circuito e um programa para a aquisição de dados. Além disso implementou-se ao sistema um termômetro eletrônico com sensor de termopar.

Desenvolvimento de um algoritmo para análise da qualidade de imagens obtidas com um minitomógrafo de raio-X, baseado no uso do espectro de potência

YEDA REGINA VENTURINI

Depto. de Computação, UFSCar, Rodovia Washington Luiz Km 235, São Carlos SP

PAULO ESTEVÃO CRUVINEL

EMBRAPA-CNPDIA, Rua XV de Novembro 1452, São Carlos SP

Com o grande avanço tecnológico, a utilização da eletrônica e de computadores tem-se expandido. Neste contexto encontra-se o processamento digital de imagens, o qual tem-se mostrado de grande utilidade dentro da área agrícola. O núcleo de pesquisa e desenvolvimento de instrumentação agropecuária (NPDIA-EMBRAPA) desenvolveu um minitomógrafo dedicado a física dos solos, o qual utiliza programas computadorizados para controle, aquisição de dados, reconstrução e visualização de imagens. Surge então a necessidade de uma avaliação mais rigorosa da qualidade das imagens obtidas por este sistema, estimulando a realização deste trabalho. Foi desenvolvido um algoritmo capaz de avaliar a qualidade de imagens, mediante os diversos parâmetros que envolvem sua aquisição. A qualidade de uma imagem pode ser avaliada através da quantidade de ruído existente na mesma. Neste sentido, tem sido estudado o comportamento do sistema diante da variação deste parâmetro, utilizando a densidade espectral de potência da imagem de um objeto conhecido.

SISTEMA AUTOMATIZADO DE MEDIDAS TERMO-ELÉTRICAS EM PLATAFORMA GUI

ODEMIR MARTINEZ BRUNO, ROBERTO MENDONÇA FARIA

IFSC - USP - Grupo de Polímeros Bernhard Gross - São Carlos - SP

Inúmeras medidas elétricas em materiais sólidos são realizadas sob variação controlada de temperatura. Nesse trabalho desenvolvemos um método de controle e aquisição de dados, particularmente aplicado a medidas de correntes termoestimuladas (TSC), mas que podem ser estendidas a sistemas semelhantes. O sistema automatizado de medidas TSC em plataforma GUI, foi implementado 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). Os resultados são armazenados e podem ser exibidos, ou impressos e transferidos para o padrão de arquivo de entrada de outros aplicativos. Os dados são obtidos em tempo real e o sistema utiliza conceitos de GUI, gerando janelas com interação orientada a eventos e uma interface gráfica com o usuário bastante interativa. O sistema faz uso de microcomputadores padrão IBM PC AT, com microprocessador 386 ou superior, e utiliza MS Windows 3.1 como plataforma GUI ("Graphic User Interface").

CIÊNCIA DOS MATERIAIS

Efeitos de Impurezas e Defeitos em Materiais
I (MAT) - 07/06/95

ESPECTROSCOPIA E IMAGEAMENTO DE FOTOELÉTRONS EXCITADOS POR RAIOS-X (XPS E XPI)

PEDRO AUGUSTO DE PAULA NASCENTE

Centro de Caracterização e Desenvolvimento de Materiais, Departamento de Engenharia de Materiais, Universidade Federal de São Carlos.

Os elétrons com energia cinética entre 10 e 1500 eV são ideais à investigação das superfícies dos materiais, pois seus caminhos livres médios nos sólidos são de apenas 0.5 a 3.0 nm, correspondendo a poucas camadas atômicas. Uma das mais usadas técnicas de análise de superfícies, a espectroscopia de fotoelétrons excitados por raios-x ("X-ray photoelectron spectroscopy" - XPS) emprega uma fonte de raios-X moles (geralmente são usadas as radiações $K\alpha$ de Al e Mg, com $h\nu = 1486,6$ e $1253,6$ eV, respectivamente) para ejetar os elétrons da amostra. O espectro dos elétrons fotoemitidos apresenta uma distribuição de energia cinética constituída por picos discretos associados aos níveis quantizados dos elétrons do átomo emissor. A intensidade dos picos dá informação sobre a composição da superfície, enquanto que a posição exata indica o estado do átomo fotoionizado. A resolução lateral do feixe de raios-X é da ordem de milímetros, porém os fotoelétrons podem ser coletados de uma área específica de uma superfície, com resolução de 10 a 50 μm , por meio de componentes eletrostáticos e magnéticos, proporcionando o imageamento de fotoelétrons excitados por raios-X ("X-ray photoelectron imaging" - XPI). Uma melhor resolução lateral pode ser alcançada utilizando-se a radiação síncrotron como fonte excitadora, podendo-se observar microestruturas menores que 0,1 μm . Uma alta resolução na energia dos fotoelétrons analisados ($< 0,1$ eV) é muito importante na ciência dos materiais, pois permite distinguir os diferentes ambientes químicos do átomo emissor (estado de oxidação, sítios da rede, estrutura molecular, etc). A combinação da alta resolução em energia e da alta resolução lateral leva à espectromicroscopia de fotoelétrons, que traz novas oportunidades na investigação de superfícies e interfaces de materiais metálicos, cerâmicos, poliméricos, semicondutores e compósitos.

EMISSION SPECTRA OF $\text{KZnF}_3:\text{Cr}^{3+}$

PAULO DE TARSO CAVALCANTE FREIRE

Instituto de Física "Gleb Wataghin" — UNICAMP (On leave from Universidade Federal do Ceará)

ORESTE PILLA

Università degli Studi di Trento, Italy

VÓLIA LEMOS

Instituto de Física "Gleb Wataghin" — UNICAMP

Emission spectra of $\text{KZnF}_3:\text{Cr}^{3+}$ was obtained at several pressures and temperatures. The results span both low- and high-crystal-field regimes in this material. A Tanabe-Sugano type diagram was constructed for three site symmetries of Cr^{3+} in the KZnF_3 matrix: cubic (O_h), tetragonal (C_{4v}) and trigonal (C_{3v}). In the group O_h the electric-dipole transitions between same parity states are forbidden while in the lower symmetry groups they are allowed. This is the reason why emission from tetragonal and trigonal are present in the spectra in spite of the lesser abundance. The electronic transitions were analyzed by using an oscillator strength scaling. This, together with the energy diagrams allowed for the assignment of the sharp lines observed in the spectra.

Local Field Effects in Doped Media with Clustered Impurities

ALEXANDER VICTOR GHINER

Departamento de Física, UFC

ANTONIO SERGIO BEZERRA SOMBRA

Departamento de Física, UFC

GREGORY IOSIF SURDUTOVICH

IFSC/USP

The macroscopic optical and low-frequency properties of the doped media with resonant impurities are considered. To put forward so-called mesoscopic approach [1] by using the generalized method of integral equations [2] we took into account a discrete structure both of clusters and host medium simultaneously. The situation with the clustered impurity was compared with the case of homogeneous distribution of impurities. The rigorous approach revealed a strong dependence of the local field effects on form of clusters and on the properties of the host medium. In the simplest model - resonant particles embedded in vacuum - the clustering effect does not change the dielectric permittivity of mixture in case of spherical form of clusters. More general model of resonant particles in discrete host medium provides the essential influence of clustering on permittivity even

for spherical clusters. The remarkable property is the next. The Lorentz form of resonance curve of single impurity particle is reproduced in frequency dependence of macroscopic permittivity. The frequency shift and changing of amplitude of the resonance due to local field corrections in clustered doped medium were calculated. Similar results were obtained for quasi-two-dimensional structures [3] with parallel oriented cylindrical clusters. It was shown that for anisotropic symmetry of clusters, even in case of their chaotic orientation, the frequency dependence of the permittivity or refractive index may differ essentially from Lorentz-type once. The theory is applied to interpret the measurements of the LiNbO₃ - Fe - doped crystals dielectric permittivity in low frequency region [4].

References

1. J.P. Sipe and R.W. Boyd, Phys. Rev. A, v.46, 1614 (1992)
2. A.V. Ghiner and G.I. Surdutovich, Phys. Rev. A, v.49, 1313 (1994)
3. A.V. Ghiner and G.I. Surdutovich, Phys. Rev. A, v.50, 714 (1994)
4. J.A.C. de Paiva, E.B. de Araujo, A.C. Hernandez and A.S.B. Sombra, to appear in Physica Status Solidi(A) (1995).

MAGNETO-OPTICAL Tb³⁺ GLASS OPTICAL AND TL CHARACTERIZATION

WALTER MAIGON PONTUSCHKA, JOÃO GIL DOS
SANTOS, LUZIA SAEKO KANASHIRO
IFUSP

NOELIO OLIVEIRA DANTAS
Universidade Federal de Uberlândia
MAO SEN

Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, China

An aluminosilicate glass containing a large amount of rare earth ions has been prepared. The OA in the visible, IR and UV regions of a sample, measured before and after ⁶⁰Co γ -irradiation with dose of 2.58 C/kg. The Tb³⁺ magneto-optical aluminosilicate glass sample was prepared using low iron content raw materials. The batch was melted in platinum crucible at 1500 °C using stirring device in order to make the material homogeneous. After cooling to a certain temperature, the melt was poured into a preheated iron mould and then, annealed by slow cooling to room temperature. All the OA bands, measured before and after γ -irradiation are due to transitions to the excited Tb³⁺ states from the ground level ⁷F₆. The optical band gap of about 5.0 eV was evaluated from the UV absorption edge.

Utilização da espectroscopia de absorção de raios X (XANES, EXAFS) no estudo de catalisadores de Ni.

MARIA DO CARMO MARTINS ALVES
Laboratorio Nacional de Luz Síncrotron, CNPq, Campinas,
SP

VALMOR MASTELARO
DEMA - Universidade Federal de São Carlos, SP
ALVARO SAAVEDRA, MAURI CARDOSO
PETROBRAS/CENPES/DICAT RJ

O presente trabalho é dedicado ao estudo de catalisadores provenientes da PETROBRAS, utilizados no craqueamento do petróleo. As aluminas utilizadas na confecção de catalisadores são de uma forma geral gama-aluminas, mas a forma e as condições de preparo podem variar de forma extensa, gerando aluminas com propriedades diferentes. Desta forma é muito importante caracterizar estruturalmente as mesmas o que permite a otimização das aluminas já existentes. Esta comunicação apresenta um estudo da ordem local de aluminas com 1% de Ni com diferentes teores de fase cristalina, diferentes tamanhos de cristalito e área específica. Foram realizadas experiências de espectroscopia de absorção de raios X na borda K do Ni usando radiação síncrotron (DCI/LURE/França). A análise quantitativa dos espectros EXAFS fornece informações a respeito da natureza dos vizinhos ao redor do Ni, suas distâncias e número de coordenação. Para estes catalisadores foram identificadas 3 esferas de coordenação ao redor do Ni: oxigênio, níquel e alumínio. Para todos os catalisadores, o Ni apresentou coordenação 6 com o O indicando que o Ni está presente em uma geometria octaédrica. O Al também está presente com coordenação 6 e a diferença básica entre eles está na coordenação Ni-Ni. Números de coordenação variando de 1 a 4 foram obtidos o que corresponde a estruturas cristalinas ligeiramente diferentes para os catalisadores. As distâncias Ni-O são da ordem de 2Å, as distâncias Ni-Ni são da ordem de 2.6Å e as distâncias Ni-Al da ordem de 3.3Å.

Preparação e Caracterização de Materiais de Interesse Tecnológico II (MAT) - 07/06/95

INFLUÊNCIA DE ADIÇÕES DE PRATA NAS TRANSFORMAÇÕES DE FASE DA LIGA Cu-Al-Ag

ANTONIO TALLARICO ADORNO, GILBERTO JOSÉ DE
ARRUDA, CARLOS ROBERTO SOBREIRA BEATRICE,
ROMEU MAGNANI

Instituto de Química de Araraquara - UNESP

A influência de adições de prata nas transformações de fase que ocorrem na liga Cu-Al-Ag foi estudada por microdureza, difração de raios X e microscopia óptica. A presença da prata parece ser responsável por alterações significativas na estrutura e nas propriedades da liga

Cu-Al-Ag, quando comparada com liga Cu-Al. Os dados obtidos por difração de raios X indicam que a fase rica em prata está presente em todas as ligas com teor de prata igual ou superior a 6%. Essa fase só é observável ao microscópio óptico nas ligas com conteúdo de prata a partir de 10%. A dureza das ligas aumenta com o aumento do teor de prata até em torno de 8%, e a partir daí se estabiliza em um valor um pouco abaixo do valor máximo verificado para a liga contendo 8% de prata. A cinética da decomposição eutetóide parece ser acelerada pela adição de prata, com predominância de nucleação nos contornos de grão. (FAPESP - CNPq)

ESTUDO DA CRISTALIZAÇÃO DO VIDRO METÁLICO METGLAS 2605CO POR RESSONÂNCIA FERROMAGNÉTICA

RONALDO SERGIO DE BIASI

Instituto Militar de Engenharia

MARIA LÚCIA NETTO GRILLO

Universidade do Estado do Rio de Janeiro

A estabilidade térmica de vidros metálicos é um assunto de grande interesse, já que a cristalização pode afetar profundamente as propriedades mecânicas, elétricas e magnéticas dessas ligas metálicas. A ressonância ferromagnética (RFM) é um meio conveniente para estudar a cristalização dos vidros metálicos, pois se trata de uma técnica rápida, sensível e não-destrutiva. No presente trabalho, a técnica da RFM foi usada para estudar a cristalização do vidro metálico $Fe_{67}Co_{18}B_{14}Si_1$ (Metglas 2605CO). A largura de linha da curva de ressonância foi medida para vários tempos de tratamento isotérmico a 747, 757 e 767 K. A fração transformada, determinada a partir dos dados de RFM, segue a equação de Johnson-Mehl-Avrami com o expoente n igual a 1,07, resultado compatível com um processo de crescimento controlado por difusão com uma taxa de nucleação próxima de zero. A energia de ativação para cristalização, calculada a partir do tempo de tratamento necessário para que a largura de linha atinja três valores diferentes, é estimada em 391 kJ/mol, um valor um pouco maior do que o medido anteriormente para a primeira cristalização da liga Metglas 2605CO, 388 kJ/mol.

CONCENTRAÇÃO DE VACÂNCIAS EM SOLUÇÕES SÓLIDAS DE Al-Mg-Cr

CARLOS ROBERTO SOBREIRA BEATRICE, WALDIR GARLIPP, MÁRIO CILENSE, ANTONIO TALLARICO ADORNO

Instituto de Química de Araraquara - UNESP

A entalpia livre de ligação entre impureza e vacância é de grande interesse na determinação dos processos de cinética e de difusão em ligas metálicas. Considerando-

se que o intervalo de interação entre vacâncias e átomos de impureza é limitado a seus vizinhos mais próximos, a ligação de uma vacância não é limitada a um único átomo de impureza. Neste trabalho, calculou-se a entalpia livre de ligação do primeiro complexo, em ligas de Al-Mg-Cr. O método utilizado foi a determinação da concentração de vacâncias em função da composição e da temperatura, por meio de medidas de resistividade elétrica e ajuste dos dados experimentais à distribuição de Dorn-Mitchell. (CNPq)

ESTUDO DE ROCHAS VULCÂNICAS RECENTES DO SUL DO PERÚ

SUZANA PETRICK, ROSA BERNSTEIN SCORZELLI, ALEXANDRE MALTA ROSSI

CBPF

LOIVA LIZIA ANTONELLO, MARIA DE FÁTIMA LOPES

Dep. Ciências dos Materiais e Metalurgia, PUC, Rio

Estudos de espectroscopia Mössbauer (EM), difração de raios-x (DRX), microscopia ótica, microscopia eletrônica de varredura (MEV/EDS) e ressonância paramagnética eletrônica (RPE) foram realizados em amostras de rochas piroclásticas (bombas vulcânicas) do vulcão Sabancaya, localizado em Arequipa, 1020 Km ao sul de Lima, Perú. O vulcão Sabancaya está em erupção desde 1992, sendo no momento o único em processo eruptivo no Perú e um dos poucos na América do Sul. As amostras exibem características minerais similares a rochas andesíticas com fenocristais bem desenvolvidos, principalmente plagioclásios, anfíbios, piroxenios e óxidos de ferro, com ausência de quartzo, numa matriz vítrea e porosa. Nenhum dos minerais constituintes das rochas parecem ter sido alterados, todos sendo primários e recentes. A análise dos feldspatos por RPE evidenciou uma considerável quantidade de Fe, que através da microscopia ótica e dos resultados de MEV/EDS mostrou encontrar-se fora da estrutura do feldspato, correspondendo de fato a Fe em inclusões de outras fases minerais. A espectroscopia Mössbauer das bombas foi efetuada em temperatura ambiente e a 4,2K mostrando espectros complexos devido a superposição de dubletes quadrupolares e interações magnéticas identificadas como óxidos de Fe-Ti e silicatos. Separações posteriores e/ou tratamentos químicos permitiram a identificação por Mössbauer de ilmenita e minerais máficos, que não foram identificados por difração de raios-x, pois suas linhas são muito fracas em relação às dos feldspatos. Através dos parâmetros hiperfinos tentaremos obter informações sobre a história térmica das rochas, que serão comparadas com dados similares obtidos por RPE.

EFEITOS DE CHOQUE METEORITOS ANTÁRTICOS DO TIPO CONDRITOS

IZABEL DE SOUZA AZEVEDO, ROSA BERNSTEIN
SCORZELLI
CBPF

VERONICA COSTA, VALMICK VIEIRA, MIGUEL
BORGES DE ARAÚJO
Dep. de Física, UFCe

Neste trabalho reportamos os resultados obtidos por espectroscopia Mössbauer em amostras de meteoritos do tipo condritos ordinários recolhidos na base das montanhas Yamato na Antártida. As amostras são denominadas (Y) -793464, -793213, -793539 e -8485 e classificadas como condritos L5, LL5, LL6 respectivamente. Os quatro meteoritos foram estudados por espectroscopia Mössbauer exibindo uma complexa superposição de silicatos de ferro, kamacita (α -FeNi) e troilita (FeS). Investigamos a história térmica e de choques desses meteoritos em amostras separadas magneticamente e tratada quimicamente para separar as fases metálicas dos silicatos e sulfetos. Os espectros Mössbauer das amostras enriquecidas no metal revelam a presença da fase ordenada $Fe_{50}Ni_{50}$ (tetrataenita) em quantidades variáveis e diferentes graus de ordem, sugerindo que o choque e reaquecimento ocorreram de forma distinta nesses condritos. O estudo de efeitos de choque registrados pelas partículas metálicas e a desordem induzida por impacto nos silicatos permitem inferir sobre a história térmica e de pressão desses meteoritos.

STEEL MATERIALS TREATMENT BY TWO LASERS

ADILSON RODRIGUES DA COSTA, EMERSON
GIMARSES MELO, ALTAIR LUCIO DE SOUZA
Departamento de Metalurgia, Escola de Minas da
Universidade Federal de Ouro Preto

JONAS DURVAL CREMASCO

Departamento de Física, Universidade Federal de Ouro
Preto

VALERY BORISOVICH KOKSHENEV

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas
Gerais

An improving of hardness properties through the laser heat treatment requires a high-level control over all processing parameters to achieve desirable temperature profiles. Two-laser-source model is proposed to describe the temperature profiles between laser-tempered tracks in terms of thermal-cycle characteristics. A temperature distribution problem for the case of two laser point-sources, scanning the surface of a semi-infinite body, is considered. A three-dimension heat conduction equation is reduced to the two-dimensional one, the solution of which in turn has been presented as a product

of two one-dimensional problems, namely: i) a semi-infinite body with one point-source of a constant flux and ii) an infinite body with two flat sources of an effective temperature. The general solution for temperature profiles is analyzed in different ranges of two-laser-process characteristics: power densities, laser-sources speed, laser-beam diameters and distances between the tempered tracks. The predictions for thermal-cycle peak-temperature profiles for the case of the Fe-C-type steels are given. Financial support of FAPEMIG and CNPq is acknowledged.

MODELLING OF THE HEAT AFFECTED ZONE IN LASER HEAT TREATMENT

JONAS DURVAL CREMASCO

Departamento de Física, Universidade Federal de Ouro
Preto

VALERY BORISOVICH KOKSHENEV

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas
Gerais

Laser heat treatment is widely used to improve hardness and wear resistance of materials through their tempering [1]. Predictions of hardness profiles are based on estimations of the heat-affected zone - the depth of a peak temperature, which can be achieved in a workpiece during a thermal-cycle time. The latter includes the period of a laser beam scanning, which causes structural changes with possible melting and resolidification. During the thermal-cycle time a heat is conducted away to the workpiece to achieve the higher cooling rates, which depend on laser processing parameters, alloy content of the tempered material and its thermal characteristics. Our estimation of the heat-affected zone is based on the one-dimensional model with Gaussian spatial distribution of the heat source [2]. The depth-dependent peak temperature, defined as time-differentiation of the solution of the model [2], has been analyzed for short-time and long-time regimes. The first regime controls short-range heat diffusion processes during beam-interaction times and has been used, in combination with the heat-flux-conduction boundary condition, for estimation of the effective conductance width. The second regime characterizes heat diffusion process during thermal-cycle times described above and has been used to introduce the heat-affected zone. As a result, the process-variable-dependence (from laser power density, laser-source speed and laser-beam diameter) has been obtained for the effective conductance width and heat-affected zone. The latter is in a good correspondence with experimental findings discovered in the Fe-C steels [2]. Financial support of FAPEMIG and CNPq is acknowledged.

[1] H.J. Hegge, H. De Beurs, J. Noordhinus and J. Th. M. De Hosson, Tempering of Steel During Laser Treat-

ment, Metallurg. Transac., v. 21A, 987 (1990)
 [2] M.F. Ashby and K.E. Easterling, The Transformation Hardening of Steel Surfaces by Laser Beams, Acta Metall., v.32, 1935 (1984)

SUPERPARAMAGNETISMO EM NANO-HEMATITAS SINTÉTICAS

JACKSON DE OLIVEIRA, JOSÉ HUMBERTO DE ARAÚJO, FRANCISCO DE ASSIS OLÍMPIO CABRAL
UFRN

Quando o tamanho de um sólido é reduzido a um valor menor que um certo tamanho característico, novos fenômenos podem aparecer resultando num comportamento completamente diferente do observado em "bulk". Um destes fenômenos é o superparamagnetismo, que é observado em materiais ultrafinos magneticamente ordenados. Um outro efeito interessante é observado no fator de Debye-Waller que é determinado pela absorção no espectro Mössbauer. Em partículas ultrafinas o deslocamento médio quadrático é dividido em duas partes: (a) o movimento macroscópico aleatório dos nanocristalitos e (b) o movimento de oscilação atômico em torno das posições de equilíbrio. Uma seqüência de amostras nanocristalinas de α -Fe₂O₃ foram preparadas por precipitação homogênea de cloreto férrico. Os resultados de Espectroscopia Mössbauer e Suscetibilidade AC indicam um comportamento superparamagnético em todas as amostras. As análises dos espectros sugerem que o fator de Debye-Waller aumenta com o crescimento dos nanocristalinos.

EFEITO DE ELEMENTOS INTERSTICIAIS E SUBSTITUCIONAIS EM LIGAS DE Nb-Zr

ODILA FLORÊNCIO, MILTON DE SOUZA PEREIRA FILHO, WANTUIR APARECIDO DE FREITAS, WALTER JOSÉ BOTTA FILHO, HIROSHI TEJIMA, JOSÉ ALBERTO RODRIGUES JORDÃO
Universidade Federal de São Carlos
 CARLOS ROBERTO GRANDINI
Universidade Estadual Paulista

Átomos de elementos intersticiais (como oxigênio e nitrogênio) presentes em metais e ligas metálicas cúbicas de corpo centrado causam picos de relaxação anelástica, que são conhecidos como Efeito Snoek e estudados através de medidas de atrito interno. Estas medidas realizadas em metais puros apresentam picos correspondentes à interação de solutos intersticiais com a matriz, em ligas metálicas, como Nb-Zr, os átomos intersticiais interagem elasticamente e quimicamente com os átomos substitucionais formando complexos substitucional-intersticial introduzindo picos adicionais. As medidas de atrito interno em função da temperatura (no intervalo de 300 K a 700 K) estão sendo realizadas num pêndulo de torção. Em amostras de Nb-Zr (baixos teores de zircônio) contendo diferentes

concentrações de oxigênio e nitrogênio. Os espectros de múltiplas relaxações anelásticas obtidas para estas amostras são decompostas em picos elementares de Debye e associados a interações matriz-intersticial (Nb-O, Nb-N) e substitucional-intersticial (Zr-O, Zr-N). Os parâmetros de relaxação anelástica: intensidade, temperatura do pico, energia de ativação e tempo de relaxação são calculados. Os resultados encontrados para as ligas Nb-0,14 Zr e Nb-1,48 Zr submetidos a tratamento de oxidação interna semelhantes mostraram que a presença do elemento substitucional Zr alterou os espectros de atrito interno. Apoio: CNPq, FAPESP, FAENQUIL-CEMAR

CARACTERIZAÇÃO MICROESTRUTURAL DO FERRO-ESPONJA POR IMAGENS DE MICROSONDA ELETRÔNICA

JOSÉ ANTÔNIO TRINDADE BORGES DA COSTA, ANA MARIA MARQUES DA SILVA, CRISTIANE DE SOUZA JAVORSKY
UFSM
 MARCOS ANTÔNIO ZEN VASCONCELLOS, THOMAS TSCHOEPKE SOARES
UFRGS

Em trabalho anterior [1], amostras de ferro-esponja obtidas por redução direta de pelotas sinterizadas de minério de ferro foram caracterizadas a partir de imagens digitalizadas de microscopia ótica da superfície do material. Tal caracterização foi feita através do estudo da fase Fe^o sob a hipótese da existência de apenas três fases, identificadas visualmente. No presente trabalho, estas mesmas amostras foram caracterizadas por imagens de microscopia eletrônica de varredura e de raios X característicos dos elementos que as compõem. Através da utilização de técnicas de processamento e análise de imagens [2], as novas informações obtidas permitiram a identificação de todas as fases. A partir daí foram recalculadas as estimativas feitas anteriormente das frações volumétricas da fase porosa, permitindo a correta caracterização microestrutural do ferro-esponja.

[1] J.A.T. Borges da Costa et alli, Caracterização Multifractal de Pelotas de Minério de Ferro Diretamente Reduzidas, Resumos do XVII ENFMC, Caxambu, 1994.
 [2] A.M Silva et alli, Aplicação de Técnicas de Morfologia Matemática para Identificação de Fases em Imagens de Raios-X Característicos, Trabalho a ser apresentado no XVIII ENFMC, Caxambu, 1995.

ESTUDO POR ESPECTROSCOPIA MOSSBAUER DE DEPÓSITOS URANIFEROS DE MACUSANI-PERU
 ANSELMO R. RODRIGUEZ, ROSA B. SCORZELLI
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Foram estudadas diversas amostras de materiais uraníferos recolhidos a diferentes profundidades, no distrito uranífero de Macusani ao NO da Província de Carabaya, Departamento de Puno (Perú), no flanco ocidental da Cordilheira Oriental. Estes indícios são os mais importantes encontrados até agora e constituem um exemplo muito característico das mineralizações de urânio associadas com rochas piroclásticas. A análise das amostras para diferentes profundidades pela espectroscopia Mössbauer, difração de raios-x, microscopia ótica e microscopia eletrônica de varredura (SEM), permite identificar diversas fases mineralógicas típicas das rochas uraníferas, tais como: olivinas, piroxenios, plagioclásios, goethita, hematita e magnetita. O principal mineral primário de Urânio é a uraninita (UO_2), que é um material bem cristalizado e que devido à oxidação é transformado em componentes muito solúveis que podem ser transportados por meio de água barrosa a zonas de redução onde estes podem precipitar-se como plechblenda um mineral microcristalino ($USiO_3.NH_2O$). Através do estudo da espectroscopia Mössbauer das fases contendo Fe , é possível conhecer o mecanismo de transporte e oxidação/redução do Urânio.

ESTRUTURA NANOCRISTALINA DE PÓS DE Ni E Zn MOÍDOS EM UM MOINHO DE BOLAS DO TIPO PLANETÁRIO

ALTENI FIDELIS PIMENTA, JOÃO CARDOSO DE LIMA, TARCISO ANTONIO GRANDI, VITOR HUGO FERREIRA DOS SANTOS, ANDRÉ AVELINO PASA, OSVALDO FREDERICO SCHILLING NETO, LIA SILVA DE OLIVEIRA, CLEDERSON PADUANI
UFSC

É bem conhecido que a técnica Mechanical Alloying (MA) é um processo de moagem a seco, onde uma mistura de pós metálicos e/ou não metálicos é ativamente deformada em uma atmosfera controlada, sob a ação de uma carga de bolas altamente energética visando produzir um pó composto metálico. As temperaturas alcançadas em MA são muito baixas e assim este processo reduz a reação cinética, permitindo a produção de materiais metaestáveis ou amorfos. Neste trabalho, nós mostramos que a fase Γ do latão (BCC) pode ser obtida através da moagem dos pós de Ni e Zn . A liga cristalina $Ni_{20}Zn_{80}$ foi obtida após 173 horas de moagem. A razão entre o peso das esferas e o peso dos pós foi de 5:1. Os padrões de raio-X medidos para os pós obtidos após a moagem, foram indexados usando o método dos mínimos quadrados a uma rede cúbica do tipo BCC com um parâmetro de rede igual a $a = 8,8998\text{\AA}$. Por outro lado, é bem conhecido que o processo MA deixa uma grande variedade de defeitos na rede dos compostos obtidos. Assim, um tratamento térmico é necessário a fim de proporcionar uma relaxação estrutural ocasionando um crescimento dos grãos, a eliminação de defeitos intersticiais, lacunas,

discordâncias e tensões presentes na rede. O tratamento térmico foi realizado a temperatura de 350°C durante 117 horas. Os novos padrões de difração de raio-X medidos foram também indexados, usando o mesmo procedimento anterior a uma rede cúbica do tipo BCC, com um parâmetro de rede igual a $a = 8,9271\text{\AA}$. Os valores dos parâmetros de rede obtidos nas duas etapas concordam muito bem com os resultados para a fase Γ citado na literatura ($a = 8,9168\text{\AA}$).

Experimental study of the ultrasonic attenuation. Linearity, causality and Kramers-Kronig relationships.

G. CORTELA, C. A. NEGREIRA

Lab. Acústica Ultrasonora- Instituto de Física- Facultad de Ciencias - Montevideo- URUGUAY

A study of the global ultrasonic attenuation of an impulsively excited ultrasonic wave in a media where the attenuation coefficient presents an approximately linear growing with the frequency (1-10 MHz.), is presented. We propose to consider this phenomenon like the behaviour of a minimal phase filter. The minimal phase condition allow us to assert the causality of the physical phenomenon. The experimental results obtained by pulse-echo technique on plexi-glass samples show a good agreement with the used theoretical model. Subsequently the linearity and causality are demonstrated through the application of the Kramers-Kronig relationships. In order to do it, we apply a technique of spectral subtraction, which gives an effective and exact measure of acoustic attenuation in a frequency range (bandwidth of 6 dB). By means of these relationships we calculate the attenuation from dispersion measurements, and we compare these results with the ones obtained when we measured the attenuation by a transmission technique.

Estudo do sistema Fe-Nb através de difratometria de pó.

J. M. ZELAYA BEJARANO, N. L. SANJURJO, S.

GAMA, C. CAMPOS

UNICAMP - IFGW - DESCM - Lab. Materiais e Baixas Temperaturas

O diagrama de fases do sistema Fe-Nb tem duas fases intermedifias: Fe_2Nb e a equiatômica FeNb. Para estudar o sistema através de difratometria de pó foram utilizadas 5 amostras: $Fe_{50}Nb_{50}$ (como fundida), e Fe_2Nb , $Fe_{55}Nb_{45}$, $Fe_{45}Nb_{55}$ e Fe_2Nb_3 como tratadas termicamente a 1100°C . Os resultados confirmam que a fase intermedifária Fe_2Nb é do tipo Laves ($MgZn_2$) e que a amostra de composição $Fe_{50}Nb_{50}$ apresenta a estrutura romboédrica tipo W_6Fe_7 . Foi observado que as amostras $Fe_{45}Nb_{55}$ e Fe_2Nb_3 são apenas uma mistura das fases $Fe_{50}Nb_{50}$ e Nb_{55} . Utilizando o método de Cohen verificou-se que a estrutura tipo Ti_2Ni não existe

na região rica em Nb e que não existe a fase Fe_2Nb_3 no sistema Fe-Nb a $1100^\circ C$. Estas conclusões reforçam os resultados obtidos anteriormente através das análises por metalografia, MEV e ATD.

Preparação e Caracterização de Materiais de Interesse Tecnológico I (MAT) – 08/06/95

PROCESSOS DE SÍNTESE DE NOVOS MATERIAIS: A IMPORTÂNCIA DE UMA METODOLOGIA DE PROJETO

ANDRÉ LUIZ V. DA COSTA E SILVA

Instituto Militar de Engenharia - Depto de Engenharia Mecânica e de Materiais e Univ. Fed. Fluminense - Esc. de Engenharia Industrial Metalúrgica

Os processos de síntese e processamento são elementos críticos na obtenção de materiais com propriedades otimizadas. Os processos de síntese dos materiais "convencionais" evoluíram ao longo de extensos períodos de tempo, em base mais ou menos empíricas; somente nas últimas décadas os aprimoramentos nestes processos passaram a ser feitos com base em previsões obtidas utilizando modelos com fundamentos científicos. As ferramentas básicas utilizadas por estes modelos são a termodinâmica e a cinética (de transporte e de reação). O dinamismo requerido, presentemente, no desenvolvimento de "novos materiais" exige que este desenvolvimento se faça de forma sistemática, com um mínimo de empirismo. Assim, é importante transferir e adaptar a experiência metodológica adquirida no desenvolvimento de processos de síntese de materiais "convencionais" para os "novos materiais". Enquanto progressos significativos foram obtidos nos aspectos termodinâmicos do modelamento e uma ampla base de dados encontra-se disponível para este fim, um considerável esforço ainda é necessário para aprimorar o modelamento da cinética de vários processos, em especial aqueles que ocorrem no estado sólido, onde alguns mecanismos ainda são bem compreendidos e os dados disponíveis são, em muitos casos, incertos. Neste trabalho são apresentados alguns exemplos da aplicação de técnicas de cálculo termodinâmico no desenvolvimento de processos de síntese de "novos materiais", dando ênfase a semelhança metodológica com a análise da síntese de materiais "convencionais", e ressaltados aspectos sinéticos que requerem melhor análise e compreensão para o completo modelamento destes processos.

PREPARAÇÃO DA FASE Γ DO LATÃO POR MOAGEM MECÂNICA DOS PÓS DE COBALTO E ZINCO

ALTENI FIDELIS PIMENTA, JOÃO CARDOSO DE LIMA, TARCISO ANTONIO GRANDI, VITOR HUGO FERREIRA DOS SANTOS, ANDRÉ AVELINO PASA, OSVALDO FREDERICO SCHILLING NETO, LIA SILVA DE OLIVEIRA, CLEDERSON PADUANI
UFSC

É bem conhecido que a técnica Mechanical Alloying (MA) é um processo de moagem a seco, onde uma mistura de pós metálicos e/ou não metálicos é ativamente deformada em uma atmosfera controlada, sob a ação de uma carga de bolas altamente energética visando produzir um pó compósito metálico. As temperaturas alcançadas em MA são muito baixas e, assim este processo envolvendo baixas temperaturas reduz a reação cinética, permitindo a produção de materiais metaestáveis ou amorfos. Neste trabalho, nós mostramos que a fase Γ do latão (BCC) pode ser obtida através da moagem dos pós de Co e Zn. A

liga cristalina $Co_{20}Zn_{80}$ foi obtida após 500 horas de moagem. A razão entre o peso das esferas e o peso dos pós foi de 5:1. Os padrões de raio-X medidos para os pós obtidos após a moagem, foram indexados usando o método dos mínimos quadrados a uma rede cúbica do tipo BCC com um parâmetro de rede igual a $a = 8,9457 \text{ \AA}$. Por outro lado, é bem conhecido que o processo MA deixa uma grande variedade de defeitos na rede dos compostos obtidos. Assim, um tratamento térmico é necessário a fim de proporcionar uma relaxação estrutural ocasionando um crescimento dos grãos, a eliminação de defeitos intersticiais, lacunas, discordâncias e tensões presentes na rede. O tratamento térmico foi realizado a temperatura de $503^\circ C$ durante 75 horas. Os novos padrões de difração de raio-X medidos foram também indexados, usando o mesmo procedimento anterior a uma rede cúbica do tipo BCC, com um parâmetro de rede igual a $a = 8,9440 \text{ \AA}$. Os valores dos parâmetros de rede obtidos nas duas etapas concordam muito bem com os resultados para a fase Γ citados na literatura ($a = 8,908 \text{ \AA}$ para 76,2 at. %Zn

até $a = 8,985\text{\AA}$ para 84,7 at. %Zn).

Estudo da Sinterização Ativada do Tântalo
MARCELLO FILGUEIRA, WILSON ACCHAR, UILAME
UMBELINO GOMES
UFRN

A metalurgia do pó é um processo altamente empregado na manufatura de peças metálicas e cerâmicas. Basicamente, os pós são compactados em ferramental apropriado, com posterior aquecimento sob condições controladas à temperaturas abaixo do ponto de fusão do metal base, visando promover difusão entre os átomos das partículas. Esse aquecimento, chamado sinterização, confere a massa do pó compactado, propriedades físicas e mecânicas desejadas. Esta técnica é utilizada na confecção de peças de metais refratários, dentre eles o tântalo, ao qual são adicionados alguns aditivos, visando baixar a temperatura de sinterização. Este trabalho tem como objetivo a análise da influência da adição de Ni, Cu e Fe na sinterização do Ta, onde os resultados são analisados em função dos seguintes parâmetros: Tipo e teor de aditivo, temperatura e tempo de sinterização, onde o níquel se apresentou como o melhor aditivo do processo.

**CORROSÃO POR FRESTA DO TITÂNIO
EM SOLUÇÕES CLORETADAS**

MOISÉS MEZA PARIONA*, IDUVERGES LOURDES
MÜLLER

*Departamento de Engenharia de Metalurgia e dos
Materiais, Universidade Federal do Rio Grande do Sul/RS.*

A Corrosão por fresta é um tipo de corrosão, a qual é muito difícil de prever, ocorre quando partes metálicas juntadas, soldadas ou vedadas por materiais não metálicos se encontram em soluções corrosivas principalmente quando contêm cloretos ou outros íons considerados agressivos. É notório sua presença em materiais que normalmente são passivos nas soluções em estudo. Este trabalho é o resultado do estudo experimental eletroquímico acompanhado de outras técnicas e pela simulação numérica (também feita por Pariona) da corrosão por fresta em titânio comercialmente puro, em solução de cloreto de sódio a temperatura intermediárias. Segundo o estudo encontra-se que: 1). em solução de NaCl desarejadas com pHs maiores que 2 não ocorre dissolução espontânea do filme do óxido, enquanto para pHs menores que 2 ocorre dissolução do filme. 2). Na zona ativa e ativa-passiva de potencial o íon Ti^{+3} é preponderante na solução da fresta. 3) Nas curvas de polarização anódicas aparece um pico

secundário em torno de $+1650\text{mV} - 650\text{mV}$.

**DETERMINAÇÃO DA ENERGIA DE
ATIVAÇÃO PARA O "COARSENING" DOS
PRECIPITADOS DE FeSi_2**

R. L. MALTEZ, M. BEHAR, L. AMARAL
Instituto de Física, UFRGS
P. F. P. FICHTNER
Escola de Engenharia, UFRGS

Amostras de Si(001) em temperatura ambiente foram implantadas com Fe de maneira a se obter uma distribuição larga desse elemento que se estendia desde $\cong 15\text{ nm}$ até $\cong 120\text{ nm}$ de profundidade. A concentração média obtida era de $\cong 3\text{at.}\%$. A região de Si amorfizada pela implantação foi posteriormente recristalizada pelo processo de "Ion Beam Induced Epitaxial Crystallization (IBIEC)" que, em nosso caso particular, consistiu em irradiar a amostra em 320°C com 380 keV de íons de Ne^+ até uma fluência de $2 \times 10^{17}\text{ Ne/cm}^2$. A recristalização foi praticamente total conforme pode ser verificado com a técnica de canalização. Estas amostras posteriormente sofreram recozimentos isotérmicos e isocrônicos entre 700°C e 900°C e em tempos entre 1/2h e 84h. A redistribuição dos átomos de Fe implantados obtida com os recozimentos foi medida pela técnica de Retroespalhamento de Rutherford (RBS). A redistribuição de Fe é devido a um processo de "coarsening" experimentado pelos precipitados de FeSi_2 . Sendo assim, determinou-se a energia de ativação Q para o "coarsening" dos precipitados de FeSi_2 através do método de Meehan-Brinkman. O valor experimental obtido foi $Q = 3.5 \pm 0.3\text{ eV}$ e está em excelente acordo com estimativas teóricas que admitem um processo de "coarsening" governado pelo mecanismo de "Ostwald ripening".

**PREPARAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE
CERÂMICAS DE SrTiO_3 OBTIDAS VIA UM
NOVO PROCESSO DE REAÇÃO NO
ESTADO SÓLIDO**

D. REYES ARDILA, S. L. CUFFINI, Y. P.
MASCARENHAS, A. C. HERNANDES
IFSC / USP

As propriedades eletrônicas do titanato de estrôncio cerâmico e as propriedades dielétricas do titanato de estrôncio monocristalino tem atraído o interesse tecnológico por muitos anos. Varias publicações tem sido feitas sobre a preparação do material cerâmico mas poucos detalhes sobre os processos seguidos são reportados. Neste trabalho apresentamos um novo e detalhado processo de preparação de cerâmicas de titanato de estrôncio bem como os resultados obtidos da sua caracterização macroscópica (Medidas de Distribuição de Tamanho de Grão e Densidade). Uma caracterização qualitativa das cerâmicas obtidas tais como coloração,

textura e resistência mecânica também é apresentada e comparada com outros trabalhos. A caracterização feita será essencial para padronizar os parâmetros de crescimento de fibras monocristalinas deste material crescidas pelo método de crescimento de pedestal a laser (LHPGM).

Efeitos de Impurezas e Defeitos em Materiais II (MAT) - 08/06/95

CRYSTALLIZATION OF FERROELECTRIC LITHIUM NIOBATE IN NIOBOPHOSPHATE GLASSES

ANTONIO SERGIO BEZERRA SOMBRA, EUDES BORGES DE ARAUJO, JOSE AIRTON CAVALCANTE DE PAIVA, MIGUEL ANTONIO BORGES DE ARAUJO
LABORATORIO DE OTICA NAO LINEAR E CIENCIA DOS MATERIAIS DEPARTAMENTO DE FISICA
UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARA

Nos últimos anos, os vidros ópticos despertaram grande interesse na comunidade científica devido ao seu uso como material fônico não-linear (1). Em vidros silicatos a participação do Nióbio contribuiu para o desenvolvimento de novos materiais com altos valores para a susceptibilidade ótica não linear (2). Recentemente Komatsu (3) propôs o uso de vidros contendo cristais ferroelétricos como um novo tipo de vidros óticos não lineares. Niobato de Lítio, é um material ferroelétrico com alta eficiência para geração de segundo harmônico e bastante utilizado como dispositivo optoeletrônico (4,5,6). O processo de preparação bem como as propriedades óticas de vidros niobofosfatos contendo Niobato de Lítio vieram desta forma a despertar interesse. Vidros niobio-fosfatos de lítio foram preparados pela técnica de 'melt quenching' e estudados por Espectroscopia infravermelho, condutividade elétrica e difração de raios-x. Observou-se que o aumento da concentração de nióbio na estrutura, leva a cristalização de novas fases no regime vitro-cerâmico. Detectamos a formação de microcristais de niobato de lítio nas amostras com maior dopagem de nióbio. O uso conjunto destas técnicas forneceu novas informações sobre a estrutura dos niobio-fosfatos no estado vítreo e vitro-cerâmico (7,8).

REFERÊNCIAS

- 1- E.M. Vogel, J. Am. Ceram. Soc. 72 (1989) 719
- 2- V. Livshic, E. Marcuk, I.Korolev, Fiz. khim. Stekla 14(1988)626
- 3- Komatsu, H. Tawarayama, H. Mohri, K. Matusita, J. Non Cryst.Sol. 135 (1990) 105
- 4- M.M. Abouelleil, F.J. Leonberger, J. Am. Ceram. Soc. 72 (1989)1311
- 5- JACde Paiva, PCBarbosa, JMFilho, JEMoreira,

FAGermano, ACHernandes, JPAndreea, ASBSombra, Opt. Materials 1(1992)59

6- JAC de Paiva, EB de Araujo, ACHernandes, ASB-Sombra, Phys. Stat. Sol.(A) (1995) to appear

7- EBdeAraujo, JACde Paiva, MABde Araujo, ASB-sombra submitted to J. Non Cryst. Solids

8- EBdeAraujo, JACde Paiva, MABde Araujo, ASB-Sombra submitted to Physica Scripta Trabalho financiado pela CAPES,CNPq,FINEP

CHARACTERIZATION OF LITHIUM NIOBOPHOSPHATE GLASSES BY THERMALLY STIMULATED CURRENTS AND MOSSBAUER SPECTROSCOPY

EUDES BORGES DE ARAUJO, JOSE AIRTON CAVALCANTE DE PAIVA, MIGUEL ANTONIO BORGES DE ARAUJO, ANTONIO SERGIO BEZERRA SOMBRA
LABORATORIO DE OTICA NAO LINEAR E CIENCIA DOS MATERIAIS DEPARTAMENTO DE FISICA
UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARA
C. A. C. A. BEZERRA
CENTRO DE TECNOLOGIA UNIVERSIDADE DE FORTALEZA

Ultimamente, o estudo de vidros óticos (1) tem despertado grande interesse dos pesquisadores em vista de possíveis aplicações em dispositivos optoeletrônicos (2). Recentemente observou-se que sistemas a base de óxidos de metais de transição como titânio, nióbio são fortes candidatos a apresentarem altos valores para susceptibilidade ótica não linear (3). Neste trabalho uma família de vidros niobio-fosfatos de lítio foram preparados pela técnica de 'melt quenching' e estudados usando técnicas como Correntes Termo Estimuladas (TSDC, TSPC), Espectroscopia Mossbauer, Espectroscopia Infravermelho com o intuito de obter informações sobre a estrutura vítrea quando aumentamos a concentração de nióbio na rede. Dois picos no espectro de TSDC foram observados, com pelo menos dois mecanismos de polarização e uma forte dependência com a concentração de Nióbio. O primeiro mecanismo está provavelmente associado com relaxação dipolar de defeitos e o segundo com relaxação interfacial. A conversão do ferro entre seus dois estados de oxidação, desempenha papel fundamental na condutividade DC do sistema. Os resultados experimentais sugerem que a condutividade é mínima quando a população de Fe(+2) é máxima nestes vidros a temperatura ambiente (3).

REFERÊNCIAS

- 1- E.M. Vogel, J. Am. Ceram. Soc. 72 (1989)719
- 2- A.S.B. Sombra, Solid State Comm 88(1993)305
- 3- A.S.B. Sombra, Braz. Journal Phy. 24(1994)480
- 3- C. J. de Oliveira et al., J. Mat Science 28(1993)4305. Trabalho financiado por CAPES,CNPq e FINEP

ESTUDO DA DIFUSÃO DO CROMO EM RUTILO POR RESSONÂNCIA MAGNÉTICA

RONALDO SERGIO DE BIASI, ANTONIO ALBERTO RIBEIRO FERNANDES

Instituto Militar de Engenharia

O rutilo (TiO_2) é um material cerâmico com muitas aplicações industriais cujas propriedades podem ser consideravelmente modificadas pela presença de elementos de transição como o ferro, o cromo e o manganês. A ressonância magnética eletrônica (RME) é um método conveniente para estudar essas impurezas na estrutura do TiO_2 . No presente trabalho, a técnica da RME foi usada para investigar a difusão do Cr^{3+} em rutilo. O espectro de rutilo policristalino dopado com Cr foi investigado por Amorelli et al. Os picos no espectro do pó correspondentes ao íon de Cr^{3+} podem ser facilmente identificados por comparação com o espectro do mesmo íon em monocristais de rutilo. A teoria da difusão iônica em pós foi aplicada a medidas de RME por Davidson e Che. Usando a equação de Fick, eles mostraram que a intensidade de um espectro de RME pode ser expressa na forma

$$I = I_s - kt^{-1/2}(1)$$

onde I_s é a intensidade de saturação e $k = cD^{-1/2}$, onde c é uma constante e D é a constante de difusão. O comportamento térmico do fator D pode ser descrito por uma lei de Arrhenius: para cada temperatura de tratamento T , o valor de $\ln k$ é obtido ajustando-se a equação (1) aos pontos experimentais. Um gráfico de $\ln k$ em função de $1/T$ permite então determinar a energia de ativação E_A . O valor de E_A calculado a partir de um gráfico de $\ln k$ em função de $1/T$ foi de 133 kJmol^{-1} , muito próximo do valor medido por Sasaki usando a técnica dos traçadores radioativos, 130 kJmol^{-1} . Os resultados indicam que a RME pode ser uma técnica rápida e confiável para investigar o processo de difusão em materiais cerâmicos.

FORMAÇÃO DE COLÓIDES EM MONOCRISTAIS DE Al_2O_3 E SiO_2 IMPLANTADOS COM ÍONS DE PRATA.

FERNANDO LÁZARO FREIRE JR

Departamento de Física, PUC-Rio, Brasil

GINO MARIOTTO

Dipartimento di Fisica, Università di Trento, Italia.

Modificações das propriedades óticas de vidros e óxidos devido à formação de colóides tem grande interesse para aplicações em dispositivos óticos. Neste trabalho íons de prata com 300 keV foram implantados em monocristais de óxido de silício e de óxido de alumínio para diversas doses entre 1 e $10 \times 10^{16} \text{ Ag/cm}^2$. As implantações foram feitas à temperatura ambiente. A densidade de corrente empregada foi de $1 \mu\text{A/cm}^2$. A

formação de colóides de prata foi determinada por espectroscopia de absorção ótica e de espalhamento Raman. Agregados de prata com tamanho entre 20 nm e 60 nm são formados, dependendo da dose utilizada: maior a dose, maior o tamanho dos colóides metálicos. Uma dependência entre este tamanho e a dose da implantação pode ser determinada combinando os resultados de espalhamento Raman e de RBS. Os perfis de implantação indicam que, para pequenas doses, a distribuição em profundidade dos íons de prata segue o perfil simulado obtido com o programa TRIM. Para grandes doses ($> 6 \times 10^{16} \text{ Ag/cm}^2$) existe uma dependência entre a largura do perfil de implantação e o óxido implantado, sendo a distribuição de átomos de prata mais estreita para SiO_2 do que para Al_2O_3 .

CONDUTIVIDADE ELÉTRICA DO GRÃO E DO CONTORNO DE GRÃO NO PZT PREPARADO POR VIA ORGÂNICA.

WANDA CECILIA LAS, MARIA APARECIDA ZAGHETE, PRISCILA DELEGA SPAGNOL, DANIELA FREIRE DE ALMEIDA, MARIO CILENSE, JOSÉ ARANA VARELA

Instituto de Química de Araraquara - UNESP

Titanato zirconato de chumbo (PZT) foi preparado por via orgânica a partir de soluções de citratos (método de Pechini), na composição $Zr/Ti=53/47$. Sementes da mesma composição também foram adicionadas, na proporção de 2% em massa. As calcinações foram realizadas a 600° C ou a 700° C por 3h. A sinterização foi realizada a 1100° C por 2h ou 6h, produzindo cerâmicas com densidades relativas entre 89% e 95%. Diagramas de impedância complexa do tipo Cole-Cole foram obtidos em função da temperatura, entre 490° C e 265° C . Os dados experimentais foram ajustados por dois semicírculos, um correspondendo ao grão e o outro, ao contorno de grão. A partir desses valores, foram obtidos gráficos de Arrhenius da condutividade elétrica do grão e do contorno de grão. Pelo menos no caso do grão, duas energias de ativação foram determinadas, uma em torno de 0.8 eV, na região paraelétrica ($T > 370^\circ \text{ C}$) e outra em torno de 1.1 eV, na região ferroelétrica ($T < 370^\circ \text{ C}$) do PZT. Essa diferença se deve provavelmente às diferentes mobilidades dos portadores de carga em cada região, dependendo da orientação dos dipolos elétricos. O tamanho de grão também influi na condutividade elétrica, que é maior nas amostras com tamanho de grão maior. A condutividade do contorno de grão é cerca de duas vezes maior do que a do grão. Os resultados de impedância são semelhantes aos obtidos na literatura para o óxido de estanho e parecem estar relacionados à porosidade da amostra.

Transições Ordem-Desordem em Ligas Dúplex Fe-Al-C

MILTON SÉRGIO FERNANDES DE LIMA

*Departamento de Eng. Metalúrgica e de Materiais da
Escola Politécnica da USP*

Este trabalho apresenta os resultados iniciais do estudo estrutural e microestrutural de uma liga dúplex composta, inicialmente, pelas fases α -Fe e κ -Fe₃AlC. Foi investigado o efeito da solidificação rápida e de tratamentos térmicos sobre a cinética de formação de fases e ordenação. Empregaram-se tratamentos a 400°C por 3, 7 e 20 dias nas amostras maças, e a 800°C num intervalo de tempo de 1 até 20 horas nas amostras solidificadas rapidamente. Dois teores de carbono foram estudados, 1,7 e 5,0% at., com resultados bem diferentes no que concerne ao desenvolvimento das fases no material tratado termicamente: enquanto, para baixos teores de carbono, as fases presentes são a B2-FeAl e a κ -Fe₃AlC, para o caso de altos teores de carbono as fases presentes são a α -Fe e a κ -Fe₃AlC. Essa observação indica uma supressão da ordenação como consequência da adição de 5,0% at. de carbono à liga. Amostras solidificadas rapidamente e tratadas termicamente com 1,7% at. C apresentam uma microestrutura dúplex B2 / κ , mesmo após 20 horas a 800°C. Os resultados são apresentados e discutidos

Filmes e Superfícies (MAT/SUF) - 08/06/95

ESTUDO DA ABSORÇÃO ÓTICA EM FILMES DOPADOS DE a-Ge:H COM NITROGÊNIO

RICARDO CAMPOMANES, IVAN CHAMBOULEYRON
UNICAMP

Neste trabalho, discutem-se as propriedades óticas (coeficiente de Absorção, Gap de Tauc, Energia de Urbach, etc), dos filmes dopados de Germânio amorfo hidrogenado (a-Ge:H), usando amônia como gás dopante na câmara de deposição. Os filmes foram preparados em um sistema de rf-sputtering em atmosfera de Ar+H₂+NH₃ e como alvo foi utilizado c-Ge ultrapuro. Os parâmetros de deposição foram mantidos constantes (pressão total, temperatura, taxa de crescimento, etc.), exceto a pressão parcial de amônia numa faixa de 2.7 x 10⁻⁶ a 1.4 x 10⁻⁴ mbar. Comprova-se que a absorção subgap aumenta ao incrementar-se o conteúdo de nitrogênio dos filmes dopados. Este aumento da absorção subgap gera maior desordem estrutural (variações no comprimento e ângulo de ligação) nos filmes dopados. O parâmetro "Eu" é um indicativo da desordem do material e é obtida da curva de absorção, dada pelo casamento das curvas por: i) Espectroscopia de Transmissão ótica na faixa NIR-VIS (Espectrômetro

Perkim Elmer λ9) e ii) Photothermal Deflection Spectroscopy. Também foi determinada a densidade de defeitos (dangling bonds). Finalmente, compararemos nossos resultados com os resultados de outro trabalho de filmes dopados de a-Ge:H usando nitrogênio como gás dopante.

CVD DIAMOND DEPOSITION ON Ce-TZP CERAMICS

EVALDO JOSÉ CORAT, MARIA DO CARMO A. NONO
VLADIMIR JESUS TRAVA-AIROLDI, NÉLIA FERREIRA
LEITE
LAS/INPE

In this paper we describe our first experiments on the growth of CVD diamond on Ce-TZP ceramics substrates. The CeO₂-stabilized tetragonal ZrO₂ polycrystals (Ce-TZP ceramics) is considered a candidate material for applications as structural high performance ceramics, and as substitute of some metallic materials, due to its remarkable increased strength and fracture toughness. The aim of this work was to deposit CVD diamond on Ce-TZP ceramics to take advantage of its properties in tooling applications. For diamond deposition we used ceramics with CeO₂ content varying from 8 to 16 mol%. The CVD diamond deposition were performed either in a hot filament reactor or a microwave reactor. The growth conditions in both reactors were typical. We observed that the Ce-TZP ceramics loses its mechanical properties when submitted to the diamond growth environment, independently of the reactor used. The main result is the very high nucleation density observed on these substrates. In the hot filament reactor we obtained very smooth freestanding films. In the microwave reactor we found the substrates to be very reactive with the plasma ball. SEM shows that pores around the grain boundaries are the main nucleation sites. Raman spectra show that good quality diamond are obtained.

OBTENÇÃO E CARACTERIZAÇÃO ESTRUTURAL DE FILMES CERÂMICOS FERROELÉTRICOS

JAIR BALTAZAR RODRIGUES

Univ. Est. de Ponta Grossa

JOSÉ ANTÔNIO EIRAS

Univ. Federal de São Carlos - SP.

Filmes cerâmicos ferroelétricos têm revelado um grande potencial tecnológico e científicos. Dispositivos baseados em propriedades piezoelétricas, piroelétricas e eletro-ópticas podem ser construídos e integrados a tecnologia de semicondutores, a partir da deposição desses filmes. Métodos físicos e químicos vêm sendo utilizados para se depositar esses filmes. Neste trabalho, utilizando um método químico diferente, foi feito filmes cerâmicos de titanato de chumbo modificados com lantânio. Serão

apresentados os resultados do estudo de cristalização, feito por análise de raios-X, em função da temperatura de tratamento térmico às quais foram submetidos.

Caracterização e controle de defeitos cristalinos em estruturas finas "SIMOX".

LUÍS FELIPE GILES

Univ. of Surrey, Guildford, Reino Unido.

Defeitos cristalinos presentes em camadas ultra finas de silício (500 Å) foram caracterizadas através de Microscopia Eletrônica de Transmissão (MET) e por meio de uma nova solução de ataque químico. As camadas finas de silício foram produzidas através da implantação de altas doses de íons de oxigênio ($3 \cdot 20 \times 10^{17} \text{ O}^+ \text{ cm}^{-2}$) com energias que variavam de 30 keV a 200keV. Desta forma, estruturas "SOI-SIMOX" ('Silicon on Insulator-Separation by Implanted OXYgen') com espessuras de até 500 Å foram produzidas. Os principais defeitos observados nessas estruturas foram discordâncias, falhas de empilhamento e complexos de falhas de empilhamento. Além do mais, foi também constatado que a densidade de defeitos cristalinos nas camadas finas de silício é, em geral, relativamente alta (10^7 cm^{-2}). Porém, a otimização dos parâmetros de implantação (temperatura, energia e dose) permite a redução da densidade de defeitos cristalinos a valores inferiores a 10^4 cm^{-2} .

EFEITO DA CONDIÇÃO DE "STARVING PLASMA" NA OBTENÇÃO DE FILMES DE CARBETO DE SILÍCIO CRESCIDOS POR PECVD

MARCELO NELSON PÁEZ CARREÑO, MARCO ISAÍAS ALAYO, INÉS PEREYRA

Laboratório de Microeletrônica, Escola Politécnica, USP

Em trabalhos recentes temos reportado a obtenção de filmes de carbeto de silício amorfo hidrogenado (a-SiC:H), obtido por PECVD, com gap óptico de até aproximadamente de 4 eV. A obtenção de filmes com um gap óptico tão alto é de grande interesse pois é um comportamento quase universal a impossibilidade de se aumentar o gap óptico do a-SiC:H acima de ≈ 3 eV. Estudos morfológicos e estruturais mostraram que, dependendo das condições de deposição, os filmes podem apresentar, além do notavelmente alto gap óptico, uma tendência à ordem química e estrutural, bem como uma menor densidade de microporos. Neste trabalho analisamos as condições de deposição que conduzem a materiais com essas propriedades, estabelecendo a importância de se utilizar conjuntamente baixos fluxos de silano e regime de baixa potência de rf (condição de "starving plasma"). Estudamos, ainda, o efeito da diluição em hidrogênio nas propriedades de amostras crescidas em "starving plasma".

ÓXIDO DE SILÍCIO OBTIDO POR PECVD A BAIXA TEMPERATURA

INÉS PEREYRA, MARCO ISAÍAS ALAYO

Laboratório de Microeletrônica, Escola Politécnica, USP

Filmes de óxido de silício (SiO_2) produzidos pela técnica de "Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition" (PECVD) a baixas temperaturas ($< 400 \text{ }^\circ\text{C}$) são de grande interesse para aplicação em microeletrônica, onde são utilizados como camada isolante devido às suas propriedades dielétricas. Neste trabalho descrevemos a obtenção de filmes de SiO_2 obtidos por PECVD pela decomposição direta de uma mistura de silano (SiH_4) e óxido nitroso (N_2O) a temperaturas entre 200 e 350 $^\circ\text{C}$. Os filmes são caracterizados óptica, elétrica e estruturalmente e a dependência dessas propriedades com parâmetros de deposição tais como pressão, temperatura e fluxo dos gases, é analisada. Análises de espectroscopia de infravermelho e medidas do índice de refração mostram que se trata de um material quase estequiométrico e com boas propriedades estruturais. A caracterização elétrica dos filmes de SiO_2 envolverá determinação de parâmetros como a constante dielétrica e de estados de superfície, bem como a determinação da carga móvel no óxido.

TEXTURA EM FILMES FINOS DE FLUORETO DE LÍTIO

CARLOS LUIZ FERREIRA, LUIZ PAULO MENDONÇA BRANÃO

INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA

ROBERTO RIBEIRO DE AVILLES, LUIZ CARLOS SCAVARDA DO CARMO

PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA / RJ - DCMM

Uma elevada taxa de coloração é observada nos filmes finos de fluoreto de lítio irradiados com feixe de elétrons que é essencial para a fabricação de dispositivos integrados de comunicação ótica. Sabe-se que a forma e o tamanho dos grãos podem diminuir a eficiência dos dispositivos fabricados através da absorção ou espalhamento da radiação e do feixe de elétrons, podendo inviabilizar economicamente a produção dos dispositivos óticos. O processo de produção dos filmes de fluoreto de lítio podem conduzir a materiais policristalinos com distribuição preferencial de orientações cristalográficas, que é dito textura e as várias propriedades destes filmes, que dependem das orientações de seus planos e direções cristalográficas, serão anisotrópicas. Este trabalho mostra a influência das variáveis de deposição, tempo/temperatura de tratamento térmico e do tipo de substrato, sobre a textura dos filmes finos de fluoreto de lítio, através das figuras de pólos diretas (fdp) que mostram apenas a projeção estereográfica e a distribuição de densidades dos pólos cristalográficos de um plano selecionado.

*Ciência dos Materiais - Teoria (MAT) -
09/06/95*

Descrição de Ligas e Vibrações Cristalinas: Um Modelo Inspirado no Funcional de Densidade

MARCO A. BOSELLI, LUIZ GUIMARÃES FERREIRA
Instituto de Física Gleb Wataghin/UNICAMP

Os dados experimentais sobre o espectro de vibrações cristalinas (fonons) e sobre a Termodinâmica das Ligas Binárias (diagramas de fase, entalpia de formação dos intermetálicos) são abundantes e necessitam da sistematização fornecida pelos modelos teóricos. Para as vibrações cristalinas há um conjunto grande de modelos semi-empíricos muito bem sucedidos, porém sem vinculação com a Física Quântica de muitos elétrons. Para as ligas, o modelo de Ising é perfeito desde que as interações sejam de curto alcance, o que quase nunca acontece.

Os cálculos de primeiros princípios, baseados nas equações de Kohn e Sham, ajudam muito a sistematizar e entender os resultados experimentais mas tem dois defeitos: em primeiro lugar eles são muito demorados quando se exige a solução simultânea de muitas configurações de átomos, em segundo lugar tais cálculos são todos baseados na "Local Density" (LDA), que é uma aproximação. O uso direto do funcional de energia cinética-exchange-correlação $KXC[n]$, em vez da solução das equações de Kohn e Sham, permitiria o cálculo simultâneo do número praticamente ilimitado de configurações atômicas que se exigem no caso de fonons e ligas. Inspirado na teoria do funcional de densidade, o modelo do "embedded-atom" (EAM) vem sendo usado com sucesso na descrição de fonons e ligas. Apresentamos aqui um modelo também inspirado no funcional de densidade. Começamos por supor que cada átomo i tem seu pseudo-carço positivo de densidade $p_i(r)$ típica para o átomo e que não depende de sua vizinhança química. Esta hipótese (transferabilidade) é corriqueira nos muitos trabalhos baseados em pseudo-potenciais. Aqui porém supomos que $p_i(r)$ é uma função e não um operador integral. Os diversos termos compoem a energia total do conjunto de átomos são os seguintes:

- A energia eletrostática entre os pseudo-carços $p_i(r)$ e a densidade eletrônica $n(r)$, que se escreve da forma usual.
- A auto-energia eletrostática da nuvem eletrônica $n(r)$, também escrita na forma usual.
- A auto-energia eletrostática dos pseudo-carços $p_i(r)$.
- A energia cinética dos elétrons, mais o exchange e mais a correlação, isto é, o funcional $KXC[n]$. Supomos que a pseudo-densidade eletrônica num cristal $n(r)$ é uma função suave.

O modelo descrito acima vem sendo aplicado, até agora

com sucesso, na descrição de ligas e do espectro de fonons de alguns metais.

**DINÂMICA DE KINKS EN
DISLOCACIONES SOMETIDAS A UNA
TENSIÓN EXTERNA OCCILATORIA**

ARIEL OMAR MORENO-GOBBI
Facultad de Ciencias - Uruguay

JOSÉ ANTONIO EIRAS
Universidade Federal de São Carlos

La presencia de kinks térmicamente activados y geométricos en dislocaciones de materiales cristalinos permiten explicar la dependencia del decremento logarítmico y del defecto de módulo con la temperatura. Se analizan las consecuencias del proceso de creación de pares de kinks sometidos a una tensión occilatoria y a un proceso de difusión, segun

el modelo de Seeger. Simultaneamente se considera la resonancia de los kinks en la dislocación, con una densidad de kinks dependiente de la temperatura. Los resultados teóricos se comparan con datos experimentales de atenuación y defecto de módulo asociado de pulsos ultrasónicos de alta frecuencia, en cristales de cobre de alta pureza deformados plásticamente.

**ESTUDO POR DINÂMICA MOLECULAR
DA DIFUSÃO EM CASCATAS DE
COLISÕES**

CESAR R. S. DA SILVA, CLAUDIO SCHERER
Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Cálculos por dinâmica molecular (DM) da quantidade de migração atômica em cascatas de colisões iniciadas por impacto iônico em ligas metálicas a base de Cu são descritos. Duas ligas foram consideradas: 1)Pt 8 at. % em Cu; 2)Isótopo hipotético do Cu, com a mesma massa atômica da Pt a 8 at. % em Cu. Os resultados obtidos não mostram diferença significativa na quantidade de migração para as diferentes espécies químicas apesar da significativa diferença nas entalpias de mistura. Isto indica que a interpretação das propriedades termodinâmicas do *Ion Beam Mixing* (IBM) em termos dos mecanismos conhecidos até o momento não é satisfatória. Adicionalmente calculamos a evolução temporal do déficit de densidade atômica na região central de uma cascata produzida em Cu puro. Nossos resultados mostram que há uma forte correlação entre a evolução da densidade atômica e o regime migratório no centro da cascata. Nossos cálculos foram realizados a temperatura 0 K e usamos potenciais tipo "Embedded Atom Method".

**MODELO DE DUPLO PROCESSO DE
TRANSPORTE DE CARGA PARA
RESPOSTA AC EM SÓLIDOS
DESORDENADOS**

CARLOS MAURICIO LEPIENSKI
DF-UFPR

ROBERTO MENDONÇA FARIA
IFSC-USP

A variação da condutividade com a frequência em materiais sólidos desordenados apresenta tipicamente duas regiões. Em baixas frequências observa-se que a condutividade é independente da frequência, sendo que para frequências acima de um determinado valor ω_c observa-se uma variação com ω^s , para $s \leq 1$. É proposto um modelo onde são possíveis dois mecanismos de condução definidos por dois diferentes tempos de relaxação. Esse modelo é baseado na teoria de passeio ao acaso contínuo no tempo (CTRW), onde é definida uma função de tempo de espera composta por dois processos markowianos puros, gerando um processo quase-markowiano. Pode-se, com esse modelo, derivar uma expressão $\sigma(\omega) \times \omega$, que descreve um comportamento padrão para inúmeros materiais desordenados inorgânicos, polímeros condutores, e alguns materiais compósitos.

Preparação e Caracterização de Materiais de Interesse Tecnológico III (MAT) - 09/06/95

**Estrutura local e à média distância dos vidros
lítio-boratos ternários**

S. SOUTO, M. MASSOT, M. BALKANSKI
UPMC - Laboratoire de Physique des Solides - Paris -
França

A densidade e as velocidades acústicas longitudinais e transversais dos vidros lítio-boratos ternários $B_2O_3 - x Li_2O - y Li_nX$ ($n = 1$ para $X = F, Cl, Br$ e I ; e $n = 2$ para $X = SO_4$) foram medidas a temperatura ambiente, em função da concentração de sal "dopante" (Li_nX) para duas séries de amostras com taxas de modificador (Li_2O) $x = 0,2$ e $0,6$. Os resultados sugerem que os anions dos sais "dopantes" (X^-) ocupem uma posição intersticial, não interagindo diretamente com a matriz boro-oxigênio. O modelo estrutural de Button foi verificado. Nos casos dos sais "dopantes" LiF e Li_2SO_4 , existem evidências de uma interação direta com a matriz vítrea. Nós sugerimos dois possíveis mecanismos de interação para os vidros "dopados" com LiF na série $x = 0,2$. As modificações estruturais à curta e média distância devido a adição do sal "dopante" são discutidas.

**DESCRIÇÃO E INTERPRETAÇÃO DE UM
MÉTODO CALORIMÉTRICO DINÂMICO
PARA ESTUDOS DA HIDRÓLISE DE
ALCÓXIDOS ESTIMULADA POR
ULTRA-SOM**

DIMAS R. VOLLET, DARIO A. DONATTI

Departamento de Física - IGCE/UNESP - Campus de Rio
Claro

O trabalho descreve um método dinâmico, baseado em calorimetria por fluxo de calor, especialmente designado para estudar a hidrólise de alcóxidos estimulada por ultra-som. A técnica evidencia o aparecimento de um pico exotérmico de calor, poucos minutos depois de iniciada a sonificação, o qual tem sido fortemente atribuído à reação de hidrólise do sistema. A interpretação dos dados calorimétricos é apresentada com detalhes, até a obtenção da formulação final, a qual permite a determinação da velocidade instantânea de hidrólise e da quantidade hidrolisada, em função do tempo de sonificação. Tais determinações são realizadas, como ilustração, a partir de dados experimentais obtidos no sistema TEOS-Água. Neste sistema, é aparente um longo período de indução, associado à imiscibilidade inicial das fases, depois do que, há um progressivo aumento da taxa de reação, acelerada pelo aparecimento do álcool, produto da reação, que facilita a homogeneização. A simplicidade e fácil aplicação do método, tornam a técnica poderosa no estudo da cinética heterogênea associada à complexa sono-hidrólise dos alcóxidos. Suporte: CNPq, FAPESP e FUNDUNESP

**DETERMINAÇÃO DA CONSTANTE DE
VELOCIDADE DE HIDRÓLISE DO TMOS
CATALISADA POR ÁCIDO OXÁLICO E
ESTIMULADA POR ULTRA-SOM**

DARIO A. DONATTI, DIMAS R. VOLLET

Departamento de Física - IGCE/UNESP - Campus de Rio
Claro

A hidrólise do TMOS, catalisada por ácido oxálico e estimulada por ultra-som, foi estudada a $30^\circ C$, por meio de um método dinâmico de calorimetria por fluxo de calor, elaborado em nossos laboratórios. A técnica permite acompanhar a evolução no tempo da variação da temperatura (ΔT_t), provocada pela liberação de calor da reação exotérmica da hidrólise. Os resultados indicam que a reação de hidrólise inicia-se imediatamente após a aplicação do ultra-som, e se estende por aproximadamente um minuto, sendo que a temperatura atinge o máximo de $67^\circ C$ em apenas 3 segundos. A constante dinâmica do calorímetro foi determinada nas mesmas condições do experimento, com retardo da

reação pela não acidificação do meio. A velocidade de hidrólise e a concentração instantânea do produto da reação puderam ser determinadas a partir dos diagramas experimentais (ΔT_t) versus tempo de sonificação. Os resultados se ajustam bem a uma lei cinética de reação de segunda ordem, conduzindo a uma constante de velocidade de hidrólise $k_H=0,298 \text{ M}^{-1}\text{min}^{-1}$, a 30°C e $[\text{AcOx}]=0,26\text{M}$. Suporte: CNPq, FAPESP e FUN-DUNESP

**ANALYSIS OF OXIDATION OF
POLICRYSTALLINE ZnSe BY
ELLIPSOMETRIC AND PHOTOTHERMAL
DEFLECTION SPECTROSCOPIES**

MÁRIO PEREIRA DA SILVA
UFRN

ENRICO MASETTI, MARCO MONTECCHI
ENEA-Casaccia, Roma

The surface of polycrystalline zinc selenide (ZnSe) was examined by spectroscopic ellipsometry (500-840 nm) and photothermal deflection spectroscopy (500-840 nm and $10.6 \mu\text{m}$). Sample surfaces finished in different ways were considered. For each of them an overlayer was detected and its optical constants were characterized before and after ultraviolet radiation. The UV exposure caused a manifest growth of the overlayer and an increment in the absorption at $10.6 \mu\text{m}$. Chemical analysis revealed the presence of selenium oxide in the overlayers. The ZnSe refractive index was determined in the 500-840 nm range. A cleaning procedure to obtain an almost contaminant-free surface was developed.

**ESTUDO DA TERMOLUMINESCÊNCIA
(TL) DO QUARTZO EXTRAÍDO DE DUNAS**

SONIA HATSUE TATUMI
FATEC-SP

ALCINA MAGNÓLIA FRANCA BARRETO
IGUSP

WALTER ELIAS FERIA AYTA, MASAO MATSUOKA,
SHIGUEO WATANABE
IFUSP

KENITIRO SUGUIO
IGUSP

Amostras de areias de dunas do Estado da Bahia foram coletadas de duas profundidades diferentes, uma a 1,5m da superfície (ICA21-1,5) e a outra a 3,0m (ICA21-3,0). Curvas de emissão termoluminescente de grãos de quartzo extraídos das amostras foram observadas em função da dose de radiação gama e o teste de platô foi aplicado para examinar a viabilidade dessas curvas para a datação por termoluminescência (TL). A intensidade de emissão TL cresceu com a dose e um platô para

amostras irradiadas com doses até 50 Gy apareceu na região de temperatura de 270°C a 340°C . Usando um pico nessa região de temperatura, os valores de dose acumulada encontrados para a ICA21-1,5 e a ICA21-3,0 foram de $(2,0\pm 0,2)\times 10^4 \text{ Gy}$ e $(2,6\pm 0,2)\times 10^4 \text{ Gy}$, respectivamente. Através da análise dos espectros de radiação gama natural referente a amostra de areia e as amostras padrões, foi determinado o valor da taxa de radiação natural igual a $350 \mu\text{Gy/ano}$. A partir dos valores acima citados, obteve-se valores das idades para a ICA21-1,5 e a ICA21-3,0 iguais a $(5,7\pm 0,5)\times 10^4$ e $(7,4\pm 0,7)\times 10^4$ anos, respectivamente.

**ESTUDO DE CATALISADORES ATRAVÉS
DA FOTOACÚSTICA**

MANOEL MARCOS FREIRE D'AGUIAR NETO,
OSSAMU NAKAMURA
UFBA

Materiais porosos apresentam uma grande variação nas suas propriedades físicas efetivas, na absorção e nas propriedades de transporte para líquidos e gases, o que pode explicar as diferentes aplicações tecnológicas de tais materiais. No caso dos catalisadores as propriedades óticas e térmicas são determinadas pelas propriedades físicas intrínsecas do material e pelas suas propriedades geométricas macroscópicas, como a porosidade. Com o uso da fotoacústica em temperatura ambiente e observando a dependência do sinal com a frequência de modulação da luz incidente, estamos estudando alguns catalisadores suportados. Determinando a difusividade térmica e a efusividade destes materiais, em função da porosidade, buscamos esclarecer a correlação existente entre as propriedades térmicas intrínsecas e, principalmente, aquela existente entre a porosidade e a eficiência do processo catalítico. Este cresce com o aumento da porosidade do material, devido à maior superfície ativa do catalisador, não obedecendo, porém, a uma relação linear. Também não foi observada tal relação entre o sinal fotoacústico e a porosidade das amostras.

**PRINCÍPIO DE SUPERPOSIÇÃO EM
MEDIDAS DE POLARIZAÇÃO E
DESPOLARIZAÇÃO NÃO ISOTÉRMICAS
EM CERA DE CARNAÚBA**

JOÃO MARIZ GUIMARÃES NETO, ISMAEL
FRANCISCO DANTAS

Universidade Federal do Piauí

GUILHERME FONTES LEAL FERREIRA
Instituto de Física - USP São Carlos

Em trabalho recente apresentamos medidas de polarização e de despolarização isotérmicas em pastilhas de cera de carnaúba obtidas sob alta pressão, objetivando reestudar modelos de relaxação dielétrica. Ali, os resultados experimentais foram ajustados a uma variante

do modelo de Debye no qual a dependência temporal é sugerida na forma $\exp[-(t/\tau)^n]$. No presente trabalho apresentamos medidas não isotérmicas para uma aplicação do princípio de superposição a modelos não-Debye [1, 2]. Aqui, à variação do campo elétrico é superposta uma variação de temperatura $f(t)$.

[1] G. F. Leal Ferreira and B. Gross, *J. Appl. Phys.* **68**, 2526(1990). [2] G. F. Leal Ferreira, *J. Appl. Phys.* **72**, 290(1992).

ESPECTROSCOPIA FOTOACÚSTICA EM FASE LÍQUIDA: RODAMINA B EM ÁGUA E ETILENO-GLICOL

CRISTINA DA MATA QUINTELLA, CARLOS FRANÇA, DANIEL MOREIRA, JAIR PONTES

Laboratório de Dinâmica Molecular, Inst. Química, UFBA

OSSAMU NAKAMURA, M. MARCUS F. DÁGUIAR NETO

Laboratório de Fotoacústica, Inst. Física, UFBA

Ultimamente tem ficado clara a importância das interações moleculares no estado líquido para processos industriais, biológicos e catalíticos e é necessário ter mais informações sobre sua *Dinâmica Molecular*¹. Usualmente se utilizam métodos espectroscópicos radiativos de absorção ou emissão que se evitam altas concentrações de modo a não ter processos de quenching. No entanto vários fenômenos extremamente relevantes e *in natura* envolvem altas concentrações e decaimentos não radiativos. Aqui se propõe o uso da *Espectroscopia Fotoacústica*² tanto por estudar decaimento não radiativo como pela alta concentração favorecer a relação sinal ruído.

Etileno-glycol e água são usados como solventes de polaridades diferentes. Se analisam as seguintes características espectrais das bandas: intensidade relativa, forma das envoltórias, deslocamento e alargamento. Os espectros se mostram sensíveis à diferente polaridade dos solventes e ao grau de concentração. Os efeitos são discutidos em termos de interações moleculares, presentes formas iônicas e perturbação de níveis energéticos por alteração das distâncias intermoleculares. Os resultados obtidos são similares aos descritos na literatura utilizando métodos radiativos.

Se conclui que Espectroscopia Fotoacústica é um método promissor para o estudo de soluções em fase líquida que possuam altas concentrações e processos de quenching.

¹ AJ Kenyon, AJ McCaffery, CM Quintella, MD Zidan, *Chem Soc. Faraday Trans.*, 1993, **89**(21), 3877-3884.

² C. Airoidi, E.F.C. Alcântara, O. Nakamura, F.J. Paixão, H. Vargas, *J. Mater. Chem.*, 1991, **3**(5), 479-482.

Photochromic Glass with Silver Halides

URIAS ECHTERHOFF TAKATOHI

Instituto Adventista de Ensino

SHIGUEO WATANABE

Departamento de Física Nuclear, Instituto de Física, Universidade de São Paulo

Photochromic glasses presents a reversible change in their optical absorption when exposed to light. A class of such glasses have this property due to small silver halide crystals inside the glassy matrix. Exposure to light cause the separation of silver from the halogen. The silver atoms form a colloid that absorbs light turning the glass dark. When light is switched off or changed for light of less energy recombination of silver with halogen occur, and the glass clears again. The small silver halide crystals are precipitated in the glassy matrix by appropriated annealing of the glass. The present work is the study of different annealing programs in a base glass of $38SiO_2.5Al_2O_3.(8.25)K_2O.16B_2O_3$ doped with $AgCl$ and CuO . and its effects on its photochromic properties. (CNPQ, FAPESP, FINEP)

INTERACCIONES INTERMOLECULARES EN LAS FASES CRISTALINAS DEL C_{70}

MÓNICA PICKHOLZ, ZULEMA GAMBA

Comisión Nacional de Energía Atómica (Argentina)

En el presente trabajo se presenta un modelo simple de potencial intermolecular para el estudio de las fases condensadas del C_{70} . Se consideran interacciones del tipo Lennard-Jones entre sitios no ligados. Cada molécula de C_{70} fue reemplazada por doce sitios de interacción ubicados en los centros de los pentágonos de las moléculas de manera de conservar su simetría (D_{5h}). Se trabajo bajo aproximación de molécula rígida. Se realizaron cálculos de MD a diferentes temperaturas y presión nula. Se estudiaron cristales cúbicos y hexagonales. En ambos casos se observaron tres fases cristalinas diferentes, caracterizados por diferentes movimientos reorientacionales de las moléculas: La fase de altas temperaturas corresponde a un cristal plástico, en el cual las moléculas presentan un movimiento reorientacional continuo, de modo de obtener en promedio temporal la simetría de sitio del cristal. En la fase intermedia las moléculas se reorientan sólo alrededor de su eje mayor y a bajas temperaturas se observa una fase ordenada. Con este modelo de potencial intermolecular fue posible reproducir cualitativamente el diagrama de fases experimental del C_{70} .

OPTICAL AND THERMOLUMINESCENT PROPERTIES OF A MULTICOMPONENT FLUOPHOSPHATE GLASS DOPED WITH Tb AND Ce

NOELIO OLIVEIRA DANTAS
Univ. Federal de Uberlândia

WALTER MAIGON PONTUSCHKA, JOÃO GIL DOS SANTOS, LUZIA SAEKO KANASHIRO
IFUSP
MAO SEN

Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, China

A multicomponent alkali earth, sodium, aluminum and magnesium fluophosphate glass doped with terbium and cerium was prepared. Measurements of optical absorption (OA) were carried out in the visible, infrared (IR) and ultraviolet (UV) as a first simple characterization of such a complicated special glass. For fluoride glass preparation, either anhydrous metallic oxides can be chosen as raw materials. The fluorides of most metals are available and their purity should be 99.99% or better. The conversion of oxides in fluorides is obtained by reaction with either NH_4HF_2 or CCl_4 . The alkali and some transition metal fluorides are highly moisture sensitive, but others such as BaF_2 are less so. Eventual excess of oxygen in the melt can lead to precipitation of metallic oxides which can serve as nucleation sites for crystallization of glass.

SOME SPECTROSCOPIC PROPERTIES OF A LASER SAFETY EYE PROTECTION GLASS

JOÃO GIL DOS SANTOS, WALTER MAIGON PONTUSCHKA, LUZIA SAEKO KANASHIRO
IFUSP

NOELIO OLIVEIRA DANTAS
Universidade Federal de Uberlândia
MAO SEN

Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, China

Optical absorption measurements were performed in the visible, IR and UV regions of a special glass, designed for laser safety purpose. No changes were detected in the spectra, as taken before and after exposure of 2.58 C/kg of a ^{60}Co γ -ray source. It was noticed also the absence of TL, which was attributed to a specific mechanism of killing effect due to the concentrated Cu^{2+} ion content. The CuO -doped borosilicate glass was melted in platinum crucible at 1420 °C. The boron oxide was used in order to increase the bridging oxygen content in order to improve the thermal stability of the material of the glass. The presence of Na_2O increases the UV transmittance, in addition of the usual glass modifier function. This laser safety eye protection glass has high optical density in the range of laser emission wavelengths and sufficient transmission in the visible, so that the operator is provided with adequate protection and comfortable conditions to see clearly the

beam target. Our purpose is to present and discuss same particular features of the observed spectra.

EMISSION SPECTRA AND TL GLOW CURVES OF BRAZILIAN GREEN COLOURED FLUORITE UNDER HEAVY IRRADIATION

NOELIO OLIVEIRA DANTAS
UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
SHIGUEO WATANABE
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Sample of fluorite, CaF_2 :natural, widely found in Brazil, is a thermoluminescent material very sensitive to ionizing radiation. In the present work, green coloured fluorite, collected from Criciuma, Santa Catarina, was investigated subject to very high radiation exposures of ^{60}Co γ -rays ranging from 2.58 C/kg to 2.58×10^3 C/kg. They were heat treated at 555°C for 10 min, cooled and annealed at 400°C for 2 hs. TL glow curves show peaks at around 90, 150, 250 and 330°C. Heating rate for TL read out was 1°C/s. Fluorite glow curves present seven peaks in the temperature range between room temperature and 400°C, and they are: $(90 \pm 5)^\circ\text{C}$, $(125 \pm 5)^\circ\text{C}$, $(145 \pm 5)^\circ\text{C}$, $(230 \pm 5)^\circ\text{C}$, $(242 \pm 5)^\circ\text{C}$, $(272 \pm 5)^\circ\text{C}$, $(330 \pm 5)^\circ\text{C}$. The result shows that the peak called II (peak at around 150°C), in literature, is composed of two peaks ($II'' \approx 125 \pm 5$, $II' \approx 145 \pm 5)^\circ\text{C}$. The peak called III (peak at around 250°C), in literature, is composed of three peaks ($III''' \approx 225 \pm 5$, $III' \approx 242 \pm 5$, $III'' \approx 272 \pm 5)^\circ\text{C}$. The growth of high temperature peaks III' , III'' and III''' takes place at different rates such that the ratio of heights can be used high dose dosimetry. TL emission spectra of fluorite subjected to 12.9 C/kg γ -rays exposure in range 300 and 600 nm in step of 10 nm present several peaks with maximum emission at 480 nm and 380 nm for both peaks II and III, respectively. Compared to known spectra it was possible to identify additional impurities contained in the Criciuma fluorite, besides those found by usual techniques.

OPTICAL ABSORPTION (OA) SPECTRA OF FLUORITES BY HEAVY GAMMA IRRADIATION

NOELIO OLIVEIRA DANTAS
UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
SHIGUEO WATANABE
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Optical absorption spectra of heavily irradiated Brazilian fluorite have been obtained. Radiation doses (^{60}Co - γ -rays) of up to 10^5 Gy induce absorption bands at 225, 260, 335, 400, 580, 780 and 1450 nm, the two last ones being in infrared region. Since, several authors found 225, 335, 400 and 580 nm in both undoped and doped

CaF_2 , suggestion is made that the defects responsible for these bands are so called modified V_K -centers contrary to the proposed model according to which, the above bands are due to the f to d transitions in induced divalent rare-earths ions. The OA bands detected in the present work are associated with hole centers assisted by monovalent or trivalent ions. We did not check which one among the rare-earths contained in the Criciuma fluorite (Ce, La, Y, Dy, Tb) is available to produce 260 nm absorption band, if that is the case. Such an experiment is now under way.

LATERAL LAMBS WAVES OF PIEZOCOMPOSITES 1-3 IN RECEPTION REGIME AND FAR FIELD.

A. AULET, C. A. NEGREIRA

Lab. Acústica Ultrasonora- Instituto de Física- Facultad de Ciencias - Montevideo- URUGUAY

L. A. BASORA, J. A. EIRAS

Grupo de Cerâmicas Ferroelétricas-Dpto. Física- UFSCar-BRASIL

Composite piezoelectric ceramics are of increasing importance in transducer technology. In particular, interest has been focused on piezoelectric ceramic polymer composites 1-3 PZT for the MHz frequency range, i. e. for medical diagnosis and use in nondestructive testing. These piezocomposites present spurious lateral modes. There are a combination of the Lamb's waves in the polymer substrate and Bragg's reflection in the square ceramic rods. Particularly this work show that in the reception regime the lateral resonance frequencies are easily detectable for the low fraction volume percent (11 and 32 %). This work verified also that these spurious modes not perturb the radiation far field. Acousto-optical and acoustic field measurements of the piezocomposites presented a very well agreement with the diffraction theory.

Exact Solution of Problem of Dielectric Anisotropic Ellipsoid in External Electric Field and Generalization of Frohlich Theorem for Anisotropic Media

ALEXANDER VICTOR GHINER, ANTONIO SERGIO BEZERRA SOMBRA

Departamento de Física, UFC

Well known exact solution of the electrostatic problem of dielectric sphere in external electric field [1] produces so called Frohlich theorem[2], which may be used as a foundation for calculation of macroscopic dielectric permittivity. Accordingly to this theorem the thermodynamically averaged polarization of medium induced by external electric field is proportional to the thermodynamical average of square of dipole moment inside

Lorentz's sphere under zero external field. So Frohlich theorem produces the essential simplification of dielectric permittivity calculation through the microscopic properties of medium. It was proved for isotropic media only when dielectric permittivity is a scalar value. To generalise this theorem for anisotropic medium we considered the electrostatic problem of ellipsoid with one dielectric permittivity tensor embedded in medium with another dielectric permittivity tensor under the action of external homogeneous electric field. With the help of special substitution of variables we have found the simple exact solution of problem in case when the axes of ellipsoid are proportional to the eigenvalues of permittivity tensor of the external medium. As a result the generalization of the Frohlich theorem was deduced. It was shown that the average polarization of the medium in external field is proportional to the thermodynamical average of square of dipole moment of ellipsoid (instead of Lorentz's sphere) in absence of the external field. Instead the known scalar local field factor in Frohlich case of isotropic medium now we have its natural tensor generalization in case of arbitrary anisotropic medium. It was found that similar the isotropic situation in case of purely elastic mechanism of polarizability dielectric permittivity tensor don't depend on temperature and is the same as a result of [3] where it was calculated at zero temperature.

References:

1. L.D.Landau, E.M.Lifshitz, P.L.Pitaevskii, *Electrodynamics of Continuous Media*, 2nd ed. (Pergamon, Oxford, 1984).
2. H.Frohlich, *Theory of Dielectrics* (Clarendon Press, Oxford, 1958).
3. A.V.Ghiner, G.I.Surdutovich, *Phys. Rev. A* 49, 1313 (1994)

CRISTALIZAÇÃO DE VIDROS

MAURÍCIO ANTONIO PEREIRA DA SILVA

Instituto de Química - UNESP - Araraquara

BENHARD JOACHIN MOKROSS

Instituto de Física de São Carlos - USP

Levando em consideração modelos específicos para a velocidade de nucleação e para a velocidade de crescimento de cristais, desenvolvemos uma fórmula para a velocidade de cristalização de vidros. Podemos reproduzir os resultados experimentais ajustando os parâmetros teóricos e mediante a interpretação dos mesmos podemos concluir sobre a natureza do mecanismo de cristalização atuante no vidro em estudo. Também tecemos considerações sobre a caracterização de vidros.

METAIS E MATERIAIS MAGNÉTICOS

Workshop: *Relaxação Sistemas Complexos*
(MMM) – 07/06/95

THE GRIFFITHS PHASE CONJECTURE: EVIDENCE OF DILUTION-AND MAGNETIC-FIELD INDUCED WEAK SINGULARITIES AND CROSSOVER INTO RANDOM-FIELD CRITICAL BEHAVIOR.

WOLFGANG KLEEMANN

Angewandte Physik, Gerhard-Mercator-Universität Duisburg, D-47048 Duisburg, Germany

Low-Frequency SQUID susceptibility measurements on the 2D Heisenberg ferromagnet $K_2Cu_{0.9}Zn_{0.1}F_4$ ($T_c=3.7K$) and on the 3D Ising antiferromagnet $Fe_{0.46}Zn_{0.54}F_2$ ($T_N=3,7K$) reveal dilution-induced contributions below the ordering temperatures of the corresponding pure compounds ($T_c^0=6.25K$ and $T_N^0=78.3K$, respectively). They are evidenced by error analysis with respect to the analytical background and traced back to weak Griffiths singularities as predicted 26 years ago [1]. Analogous magnetic field-induced quasi-critical fluctuations have been observed in the metamagnetic antiferromagnets $FeCl_2$ [2] and $FeBr_2$ [3]. Owing to fluctuating demagnetizing fields local phase transitions are encountered at any temperature T within the interval $T_N(H) \leq T \leq T_N(0)$. They are manifest by sizeable contributions to the low-frequency magnetic loss, χ'' vs T , which exhibits a distinct change of curvature at the Griffiths temperature, $T_N(0)$. Within Landau theory a phenomenological distribution of local T_c values allows unequivocal modeling of χ'' vs T at $T > T_c(H)$. In $Fe_{0.46}Zn_{0.54}F_2$ a bump-like anomaly of χ' was previously interpreted as a dynamically rounded random-field-induced singularity [4,5]. It is now identified and successfully modeled within a Landau theoretical approach as the response function of the Griffiths phase-like dynamic domain state. It crosses over into random-field criticality as $T \rightarrow T_c(H)$, where a new very sharp critical anomaly arises. Its critical exponent seems to confirm recent Monte Carlo predictions, $\alpha \approx -1$ [6]. Destruction of the singularity within $|t| < 10^{-2}$ (at $B=4T$) seems to hint at random-field-induced antiferromagnetic domain freezing on laboratory time scale even after zero-field cooling similarly as conjectured previously [7].

[1] R.B. Griffiths, Phys. Rev. Lett. 23 (1969) 17.

[2] C.Binek, W.Kleemann, Phys. Rev. Lett 72 (1994) 1287.

[3] C.Binek, M.M.P.de Azevedo, W.Kleemann, D.Bertrand, J.Magn. Mat (1995).

[4] A.R.King, J.A.Mydosh, V.Jaccarino, Phys. Rev. Lett. 56 (1986) 2525.

[5] A.E.Nash, A.R.King, V.Jaccarino, Phys. Rev. B43 (1991) 1272.

[6] H.Rieger, A.P.Young, J. Phys. A26 (1993) 5279.

[7] Y.Shapir, in; Recent Progress in Random Magnets, D.H.Ryan Ed. (World Scientific, Singapore 1992).

Dynamics of the Order Parameter in the Random Field Ising System $Fe_xZn_{1-x}F_2$

D. P. BELANGER

Physics Department, University of California, Santa Cruz, USA 95064

We have done neutron Bragg scattering experiments on a $3.4\mu m$ epitaxial film of the $d = 3$ dilute Ising antiferromagnet $Fe_{0.5}Zn_{0.5}F_2$ to investigate the behavior of the order parameter in the random field Ising model (RFIM), which applies for $H > 0$. For $H = 0$ the resolution limited Bragg peak height vs. T below T_c follows the random-exchange Ising model, establishing high film quality and the lack of extinction effects which severely limit measurements in bulk samples. The peak height versus T for $1.5T < H < 4.5T$ exhibits a curvature opposite to that for $H = 0$ since a significant amount of scattering occurs in very narrow wings which form around the Bragg peak as T increases below T_c . The large scale RFIM structure implied by the existence of these Bragg wing structures, observed in transverse scans with $|q| < 0.03$ r.l.u., may in part be related to slow RFIM dynamics and to the complicated structure of the magnetic ordering. The results will be discussed in the context of other RFIM experiments, simulations and theory. This work is in collaboration with S-J. Han, J. Wang and Z. Slanic, R.M. Nicklow, M. Lui, C.A. Ramos, and D. Lederman. The author's work is supported by DOE grant DE-FG03-87ER45324.

RELAXAÇÃO EM SISTEMAS MAGNÉTICOS NANOSCÓPICOS: ATIVAÇÃO TÉRMICA E TUNELAMENTO QUÂNTICO

MIGUEL ALEXANDRE NOVAK

Universidade Federal do Rio de Janeiro

Sistemas magnéticos nanoscópicos podem ser hoje sintetizados por técnicas de química orgânica, formando cristais moleculares com agregados de metais de transição interligados por átomos leves. As propriedades magnéticas de uma nova família de compostos de coordenação com agregados formados por 12 átomos de Mn bem isolados uns dos outros serão apresentadas. A alta anisotropia magnética aliada ao fato das partículas magnéticas serem idênticas explicam o comportamento superparamagnético ideal observado. Pela primeira vez observou-se um decaimento exponencial puro da magnetização remanente, com os tempos de relaxação seguindo um lei de Arrhenius $\tau = \tau_0 e^{\Delta/k_b T}$, por várias décadas de tempo. O prefator τ_0 tem um valor extremamente alto para superparamagnetos tradicionais ($\sim 10^{-7}$ s) e independe de campo magnético aplicado. Medidas do tempo de relaxação obtidos através da susceptibilidade complexa em função da temperatura apresentam um comportamento de ativação térmica. A dependência dos tempos de relaxação com um campo magnético externo apresenta um comportamento surpreendente podendo ser explicado devido a ocorrência de tunelamento quântico da magnetização dos agregados através da barreira de anisotropia. O estudo destes sistemas será fundamental para a compreensão de efeitos quânticos a nível macroscópico previstos teoricamente e observados recentemente em vários sistemas.

Efeitos de Distribuição de Barreiras de Energia na Relaxação Magnética de Pequenas Partículas de Ferrita de Bário a Baixas Temperaturas

L. C. SAMPAIO

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas / CNPq

B. BARBARA

Laboratoire Louis Néel / CNRS - Grenoble - França

Realizamos um estudo detalhado das medidas de relaxação da magnetização $S(H,T)$ ('magnetic viscosity') variando o campo magnético aplicado e a temperatura em pequenas partículas de Ferrita de Bário (≈ 300 Å). A motivação deste trabalho é estudar o(s) mecanismo(s) de relaxação da magnetização a baixas temperaturas; uma possível relaxação por efeito túnel tem sido recentemente relatada na literatura. Com este fim, calculamos $S(H,T)$ considerando: i) uma função de distribuição de barreiras de energia $f(E,H)$ e ii) uma relaxação ativada termicamente. A distribuição $f(E,H)$ é calculada a partir das funções de distribuição de volume $\rho(V)$ e de campo de rotação da magnetização $\nu(H\%)$, ambas obtidas experimentalmente. No limite de baixas temperaturas encontramos para $S(H,T)$ uma dependência em \sqrt{T} e não uma dependência linear em T como é esperado para uma relaxação via ativação térmica. Ressaltamos que a dependência em \sqrt{T} pode ser erroneamente interpretada como uma relaxação por efeito túnel se as medidas de $S(H,T)$ não forem feitas a muito baixas temperaturas. A distribuição $f(E,H)$ nos permite calcular também a dependência em temperatura do campo coercivo $H_c(T)$ e $S_{Max}(H \approx H_c, T)$. Um excelente acordo é observado entre todas as grandezas calculadas a partir de somente $f(E,H)$ e as medidas experimentais.

Metais e Materiais Magnéticos I (MMM) -
07/06/95

INTRINSIC VERSUS EXTRINSIC MAGNETISM IN MAGNETIC POLYMERS

FERNANDO PALACIO

Instituto de Ciencia de Materiales de Aragon CSIC-Universidad de Zaragoza

The search for molecular based magnets possessing transition temperature at or above 300K is a current challenging problem that has received growing attention in the last ten years. A large part of these efforts are being focussed towards polymeric materials. In the past recent years several substances of this kind have been reported to order as ferromagnets above room temperature. However, in most cases the reported materials have been plagued by

illdefined composition and poor reproducibility. The research and achievements of making and characterizing polymeric materials possessing magnetic behavior is reviewed and the current state of the art is summarized. The issue of the source of the magnetic behavior, whether intrinsic or extrinsic to the polymeric material, is addressed and discussed. The research has been supported by grants MAT91-0681 and MAT94-0043 from the CICYT.

*Modelos Teóricos e Cálculo de Parâmetros I
(MMM) - 07/06/95*

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

MARIO E. FOGLIO

Universidade Estadual de Campinas

MARCOS S. FIGUEIRA

Universidade Federal Fluminense

A expansão em cumulantes tem sido utilizada por Metzner (W. Metzner, Phys. Rev B **43**, 8549 (1991)) para estudar o modelo de Hubbard numa rede hipercúbica de dimensão infinita, usando o "hoping" como perturbação. No presente trabalho aplicamos a mesma técnica a uma rede hipercúbica de Anderson, usando a hibridização como perturbação (M. S. Figueira, M. E. Foglio e G. G. Martinez, Phys. Rev. B **50**, 17933 (1994)) e mostramos que quando a hibridização é local, a dimensão infinita da rede não permite eliminar diagramas na expansão perturbativa. Assim, consideramos o caso de hibridização entre vizinhos mais próximos, sem componentes locais, e mostramos que neste modelo se recupera a eliminação de muitos diagramas no limite de dimensão infinita. Este modelo é mais realista que o da hibridização puramente local, pois permite a hibridização de elétrons f com elétrons s e d , que é proibida em redes cujos sítios são invariantes em relação à inversão. Aplicamos ao modelo acima definido varias das aproximações que usamos no modelo com hibridização local: aproximação de cadeias e aproximação de múltiplos anéis (cf.: Phys. Rev. B **50**, 17933 (1994)). Mostramos que a completude é conservada na aproximação de cadeias quando modificada seguindo uma conjectura já apresentada no XVII ENFMC (M. S. Figueira e M. E. Foglio, pg 219; cf.: M. S. Figueira, Tese de Doutorado, UNICAMP (1994)).

**COMPETITION BETWEEN KONDO
EFFECT AND MAGNETIC ORDER IN A
HEAVY FERMION SYSTEM**

JOSÉ ROBERTO IGLESIAS

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

BERNARD COQBLIN

Laboratoire de Physique des Solides, Université Paris-Sud,

Bâtiment 510, F-91405 - Orsay, France

CLAUDINE LACROIX

Laboratoire de Magnetisme Louis Néel, CNRS, B.P. 386,

F-38042 - Grenoble, France

We consider a system with competing interactions: a Kondo local term J_K that couples localized and conducting electrons and a RKKY - type interaction J_H between the localized spins. The Hamiltonian of the system is

$$H = E_o \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma}^{\uparrow} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma} - \frac{J_H}{2} \sum_{i,\delta} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+\delta} - J_K \sum_i s_i \cdot \mathbf{S}_i$$

and it is treated within a generalized mean field approximation. The correlation functions between conduction and localized electrons $\langle c_{i,\sigma}^{\dagger} f_{i,\sigma} \rangle$, between localized electrons on different sites $\langle f_{i,\sigma}^{\dagger} f_{i+\delta,\sigma} \rangle$ and the magnetic moments are calculated analytically as a function of the parameters of the Hamiltonian and numerically for finite temperature. The results are different from the original proposition of the so - called Doniach diagram and in better agreement with experimental data.

*Metais e Materiais Magnéticos I (MMM) -
07/06/95*

Magnetometry under high pulsed fields

J. L. SANCHEZ, J. C. TELLEZ, N. SUAREZ

Laboratorio de Magnetismo, Facultad de Fisica-IMRE, Universidad de La Habana, La Habana 10400, Cuba

Pulsed field magnetometry is a powerful technique for the investigation of magnetic phenomena in solids since it allows the determination of the magnetization and its derivatives using commonly available electronic devices. This technique is particularly suitable for the study of hysteresis curves, anisotropy field and field induced transitions in highly anisotropic materials. In the present work the pulsed field magnetometer that has been set-up at the University of La Habana is described. The generation and application of different field waveforms are discussed in

connection with the kind of measurement performed. The principle, accuracy and calibration problems involved in hysteretic and anisotropy field measurements in permanent magnets are illustrated. Representative examples of the different measurements performed in the facility are reported.

Modelos Teóricos e Cálculo de Parâmetros I (MMM) - 07/06/95

A Model for the Schottky Anomaly in Metallic $Nd_{2-y}Ce_yCuO_4$

ROBERTO E. LAGOS, ALZIRA C. M. STEIN-BARANA
Departamento de Física, IGCE, UNESP, Rio Claro, SP
GUILLERMO G. CABRERA
IFGW, UNICAMP, SP

Here we present a simple model for the doped compound $Nd_{2-y}Ce_yCuO_4$. Taking at face value some recent experimental results for these compounds, namely specific heat and magnetic susceptibilities measurements, we successfully explain the experimental results, in a quantitative fashion, at least in the temperature range 50mK to 10K. We consider, within a HF scheme an Anderson like model. Following the experimentalists' conjecture, we incorporate into our model the magnetic splitting of the $Nd-4f$ ground state Kramers doublet due to exchange interactions with the ordered Cu moments. Our results are in very good agreement with the experimental data, yielding a Schottky Anomaly peak for the specific heat that decreases, broadens and shifts to lower temperatures, upon Ce doping (increasing value of y). For overdoped compounds we find a linear behaviour in temperature for the specific heat (below 300mK), a Pauli like susceptibility at low temperatures, and a Curie like behavior at high temperatures, all these in agreements with experimental data. Our results show these compounds not to be "heavy fermions", curiously, an issue that remains controversial as shown by diverse experimental data. Our model is amenable to several improvements, and more experimental data is required. We discuss both issues.

CÁLCULOS DE PRIMEIROS PRINCÍPIOS PARA Fe e Mo COMO IMPUREZAS INTERSTICIAIS MAGNÉTICAS EM Ca e Sr fcc.

LUIZ ADOLFO DE MELLO*, SONIA FROTA-PESSÔA
IFUSP* ICET-UNIP

Recentemente investigamos o comportamento do Fe como impureza intersticial em Sc , Ti , Y e Zr , e verificamos que o Fe intersticial não apresenta momento local para esses hospedeiros[1]. No entanto um estudo das tendências observadas nesses sistemas de valência 4 (Ti e Zr), e de valência 3 (Sc e Y), nos levou a esperar formação de momento magnético local para o Fe como impureza intersticial em hospedeiro de valência 2 (Ca

e Sr). Neste trabalho, utilizamos o método RS-LMTO-ASA[2] para determinar, a partir de primeiros princípios, dentro do formalismo do Funcional Densidade Local, a estrutura eletrônica ao redor de impurezas intersticiais de Fe em Ca e Sr . Devido a existência de dados experimentais para impurezas de Mo nesses hospedeiros, resolvemos inclui-lo também nesse nosso estudo. As impurezas de Fe e Mo foram colocadas nos interstícios octaédricos da estrutura Fcc dos hospedeiros e relaxação dos primeiros vizinhos da impureza foi considerada. Potenciais de pares tipo Leonard-Jones foram utilizados para determinar essa relaxação. O aparecimento de momento na impureza nesses hospedeiros é explicado em termos do modelo de Wolff[3] e do critério de Stoner. Nossos resultados para momento magnético e interações hiperfinas são comparados com dados experimentais da literatura.

- [1] S.Frota-Pessôa, L.A.de Mello, H.M.Petrilli, and A.B.Klautau. Phys.Rev.Lett. vol.71,N-25 (1993), 4206
- [2] S.Frota-Pessôa - Phys. Rev. B46 , 14570 (1992)
- [3] P.A.Wolff - Phys.Rev. 124, N-4, 1030 (1961)

Metais e Materiais Magnéticos I (MMM) - 07/06/95

SIMULAÇÕES DE MONTE CARLO EM SISTEMAS DAFF $d = 2$

FABIANO KONZEN, ULISSES AZEVEDO LEITÃO
Dep. Física, Universidade Federal de Minas Gerais,
E-Mail fabiano@fisica.ufmg.br

O antiferromagnético Ising diluído com campo magnético aplicado (DAFF) é uma realização experimental do Sistema Ising em Campo Aleatório (RFIM). Desde que foi estabelecido que a ordem de longo alcance (LRO) no modelo de Ising, para $d = 2$, é destruída por campos aleatórios (RF), este sistema não tem recebido muita atenção na literatura. Contudo, seria muito interessante entender o comportamento dinâmico deste estado de domínios, devido as flutuações de aglomerados desconectados e droplets.

O principal objeto deste trabalho é avaliar o comportamento do sistema RFIM $d = 2$, sendo que um dos aspectos desse estudo é sua relaxação dinâmica, através de quantidades termodinâmicas como energia interna E e magnetização homogênea M e de subrede M_s . Através de Simulações de Monte Carlo, são reproduzidos alguns importantes resultados experimentais, como magnetização remanente e irreversibilidades[1].

As relaxações não exponenciais de M_s em presença de campos aleatórios, ajustam-se muito bem através das leis:

$$M_s = A \exp[-B(\log(t))^k] \text{ e } M_s = [A+B(\log(t))^k]^{-1} \quad [2].$$

Finalizando, apresentaremos e discutiremos o diagrama de fase, bem como irreversibilidades.

[1] U. A. Leitão, W. Kleemann e I. B. Ferreira; Phys. Rev. **B38** (1988) 4765.

[2] H. Ikeda, Y. Endoh e S. Itoh; Phys. Rev. Lett. **64** (1990) 1266.

Modelos Teóricos e Cálculo de Parâmetros I (MMM) - 07/06/95

ESTUDO DE PROPRIEDADES LOCAIS NAS IMPUREZAS DE Fe OU Co EM LIGAS DE Nb E Mo.

RENATA NASCIMENTO NOGUEIRA, HELENA MARIA PETRILLI
IFUSP

Neste trabalho, utilizamos o RS-LMTO-ASA, que é um método de primeiros princípios dentro da aproximação de densidade local, para estudar o comportamento de algumas propriedades locais de impurezas substitucionais de Fe ou Co nos metais Mo e Nb e ligas $Nb_{1-x}Mo_x$. Resultados experimentais da literatura mostram que ambos como impurezas substitucionais em ligas $Nb_{1-x}Mo_x$ apresentam momento magnético quando $x \geq 0.4$, e não são magnéticas caso contrário. Existe na literatura um modelo, devido a Jaccarino e Walker, que propõe que este comportamento esteja condicionado ao número de primeiros vizinhos Nb da impureza. Inicialmente, procuramos averiguar a validade deste modelo, tomando algumas configurações possíveis da primeira vizinhança das impurezas de Fe ou Co nestas ligas e estudando o seu comportamento magnético em cada situação. Além disso calculamos, em cada caso, os campos hiperfinos no Fe e no Co e o deslocamento isomérico nos sítios de Fe.

Trabalho financiado pela FAPESP

Metais e Materiais Magnéticos I (MMM) - 07/06/95

Evidências da existência de domínios antiferromagnéticos nos compostos $X_2Fe_{1-x}In_xCl_5.H_2O$ ($X = Rb, K$)

V. B. BARBETA, C. C. BECERRA, A. PADUAN-FILHO

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, CP 20516, 01452-990, São Paulo, Brasil

M. GÁBAS, F. PALACIO

Instituto de Ciencia de Materiales de Aragon, CSIC, Universidad de Zaragoza, E-50009, Zaragoza, Spain

Recentemente tem sido observada uma magnetização remanente em cristais de vários sistemas antiferromagnéticos diluídos [1]. A interpretação destes resultados em termos de um excesso de magnetização remanente proveniente da contribuição das paredes de domínios induzidos por Random Fields (R.F.) não é possível, já que os efeitos observados em nosso trabalho ocorrem em campos da ordem de apenas alguns gauss. Além disso, esta magnetização remanente não cresce com o quadrado do campo externo aplicado como é esperado para o caso de domínios induzidos por R.F. e satura para campos muito baixos. Uma explicação para a origem desta magnetização remanente é a presença de domínios que se formam mesmo na ausência de R.F. e que são estabilizados pelas vacâncias não magnéticas presentes no cristal. Curvas de magnetização em função do campo externo aplicado apresentam uma série de saltos para várias das amostras estudadas. Tais saltos na curva de magnetização são interpretados como sendo causados pela reorientação destes domínios magnéticos. É importante notar que a inversão da magnetização ocorre através de um pequeno número de saltos, o que pode indicar a presença de um pequeno número de domínios no cristal. O número de saltos e a forma da curva de histerese para as amostras de $Rb_2Fe_{1-x}In_xCl_5.H_2O$ são bastante diferentes daquelas observadas para as amostras de $K_2Fe_{1-x}In_xCl_5.H_2O$. Para um dado composto, tais características são também fortemente dependentes da concentração de íons não magnéticos (In) presentes. [1] C.C. Becerra, A. Paduan-Filho, T. Fries, Y. Shapira e F. Palacio, J. Phys. Condens. Matter **6**, 5725 (1994).

Modelos Teóricos e Cálculo de Parâmetros I (MMM) - 07/06/95

ANÁLISE ESTATÍSTICA DE DADOS DE CORRELAÇÃO ANGULAR PERTURBADA EM LIGAS MAGNÉTICAS.

M. OLZON-DIONYSIO, SYLVIO D. SOUZA

DF-UFSCar- S. Carlos

VITO R. VANIN

IFUSP- S.Paulo

A utilização de sistemas multidetectores produziu grandes avanços no estudo de interações hiperfinas obtidas pela técnica TDPAC (Correlação Angular Perturbada Diferencial no Tempo). O método usual de redução dos dados [1] utiliza combinações entre os mesmos, e não inclui, na análise, as correlações nelas envolvidas. Normalmente no caso de interações elétrica e magnética combinadas, este método produz várias soluções, havendo dificuldade em discriminar a solução correta das espúrias. Pretendemos analisar simultaneamente o conjunto inteiro de dados - doze espectros de um sistema de quatro detectores - sem qualquer combinação entre eles. Neste tratamento, o método dos mínimos quadrados é formulado por meio de matrizes [2]. Em particular, a função a ajustar é representada por uma matriz de planejamento, com um número de linhas igual ao de dados e tantas colunas quantos parâmetros descrevem o sistema liga-detectores, na prática, 6000 linhas por 20 colunas. Como as variâncias dos dados são preservadas, é possível discriminar a melhor solução dentre os diversos mínimos obtidos no ajuste dos parâmetros.

[1] A.R.Arends et al- Hyp.Int. 8 (1980), 191. [2] The Advanced Theory of Statistics- M. Kendall, A. Stuart & J.K.Ord, Charles Griffin & Co.Ltd, London, Vol.2, 4th Ed. (1979)

Metais e Materiais Magnéticos IV (MMM) - 07/06/95

Correlações eletrônicas em cadeias magnéticas inhomogêneas

THEREZA CRISTINA DE LACERDA PAIVA

PUC-Rio de Janeiro

RAIMUNDO ROCHA DOS SANTOS

UFF

Multicamadas magnéticas são estruturas compostas pela repetição alternada de camadas de um material ferromagnético e de camadas de um material não-magnético, chamado espaçador. Foi notado que à medida em que a largura do espaçador é aumentada ocorrem oscilações na constante de *exchange*; ou seja, à medida em que a largura da camada não-magnética muda, o acoplamento das camadas magnéticas oscila entre ferromagnético e antiferromagnético. Isto ocorre para diferentes espaçadores e diferentes materiais magnéticos, sendo o período de oscilação diferente para cada combinação dos dois.

Neste trabalho as camadas são substituídas por átomos de modo a tornar o sistema unidimensional. A interação entre eles é descrita por uma Hamiltoniana tipo Hubbard onde, além do termo de hopping, há um termo que simula a repulsão Coulombiana em cada

sítio. Esta repulsão é nula no espaçador (de modo a simular um material não-magnético) e não nula nos sítios magnéticos (facilitando a formação de momentos magnéticos).

Esta Hamiltoniana é resolvida via método de Lanczos para cadeias de 6 a 12 sítios, para vários preenchimentos de banda. O fator de estrutura magnético é analisado e o papel das correlações eletrônicas no comportamento oscilatório da constante de *exchange* é estudado.

Acoplamento de Troca entre Planos Magnéticos em Sistemas Metálicos de Baixa dimensionalidade

AUGUSTO CÉSAR DE CASTRO BARBOSA, MARCUS

VINÍCIUS TOVAR COSTA, ROBERTO BECHARA

MUNIZ, JOSÉ D'ALBUQUERQUE E CASTRO

UFF

A estabilidade magnética de multicamadas metálicas depende da interação de troca entre as camadas magnéticas do sistema. Um ponto importante para este entendimento é o papel desempenhado pela dimensão do sistema sobre o acoplamento entre dois de seus planos. Calculamos o acoplamento J_s entre planos próximos à superfície de um meio semi-infinito, e comparamos com o valor calculado para o volume J_b . J_b e J_s são determinados calculando-se a variação do potencial termodinâmico $\Delta\Omega$, isto é, o trabalho realizado para girar a magnetização de cada plano de um ângulo arbitrário θ em relação à magnetização dos outros planos. As expressões neste trabalho foram obtidas em termos dos propagadores monoelétrônicos. Devido à rotação da magnetização em um determinado plano, surge uma flutuação de carga; esta flutuação é corrigida através da introdução de um potencial local independente de spin, mediante a imposição da neutralidade local de carga.

Fônons em ligas binárias bcc de Lítio-Sódio

BERNARDO LAKS, FLÁVIO DJANIKIAN

Instituto de Física, Unicamp-Campinas

MOMOTARO IMAIZUMI

Depto de Física, Unesp-Bauru

Calculou-se a Dinâmica de Rede em ligas binárias de lítio e sódio com três concentrações de sódio i.e, 25%, 50% e 70% em lítio. Usou-se nestes cálculos o modelo de pseudo-potencial modificado de Hoshino e Young para o lítio e o modelo de Harrison para o sódio para descrever as interações entre os átomos das ligas. Determinou-se relações de dispersão dos fônons nas direções principais de simetria, a densidade de estados de fônons, o desvio médio quadrático e as curvas $(\Theta - T)$ onde Θ é a temperatura de Debye. Os resultados obtidos são considerados bons comparados aos resultados experimentais do lítio e sódio.

**STRUCTURAL AND MAGNETIC STUDY
IN THE SYSTEM $REBaCuFeO_{5+\delta}$ (RE =
RARE EARTH) AT 10 K.**

ALVARO W. MOMBRÚ

Univ. de la República - Uruguay

KOSMAS PRASSIDES

Univ. of Sussex - United Kingdom

M. PISSAS, C. MITROS, D. NIARCHOS

NCSR "Demokritos" - Greece

The magnetic and crystal structures of the perovskites $REBaCuFeO_{5+\delta}$ have been determined with powder neutron diffraction methods. The importance of this system is due to the yttrium parent compound of the family, that is structurally related to the YBCO superconductor. They all crystallise in the non-centrosymmetric tetragonal space group $P4mm$ except the La sample that crystallises in the space group $I4/mmm$. It has been possible to determine the magnetic ordering in both the Fe and Cu sublattices for the Pr, Nd, Dy, Er and Lu samples and only for the Fe sublattice for the Tm sample. No magnetic peak could be observed in the La perovskite. The Tm sample exhibits a helicoidal spin structure denoted by the appearance of satellites in the (111) magnetic peak. The structural and magnetic data is informed and the comparison with the yttrium sample is done.

Reference: Mombrú, A.W., Christides, C., Lappas, A., Prassides, K., Pissas, M., Mitros, C., Niarchos, D., *Inorg. Chem.*, 7, 1994

Acknowledgments: NIST (USA), SERC (UK), CONICYT (Uruguay)

**MICROMAGNETICS STUDY OF DOMAINS
IN COUPLED FILMS NEAR STRONG
VARIATIONS OF THE INTERFILM
COUPLING**

A. L. DANTAS, A. S. CARRIÇO

*Departamento de Física/UFRN, Campus Universitário,
59072-970 - Natal/RN*

The formation and stability of Bloch walls in thin ferromagnetic films in bilayers is analyzed from the point of view of micromagnetic theory. The system consisting of two uniaxial thin ferromagnetic films coupled through a nonmagnetic spacer is studied in the limit appropriate to bilayers containing one soft and one hard ferromagnet. In this limit one of the films is represented by an infinite anisotropy medium. A strong variation in the interfilm coupling (J), changing from positive to negative value, is shown to induce wall pinning. The soft film magnetization is assumed to vary slowly and the wall profile and stability are studied by solving Brown's equations. Magnetostatic contributions to the wall energy are not considered and the perpendicular variation of the magnetization is neglected, as appropriate to thin

films. The interfilm coupling turns out to be equivalent to an effective field which changes sign across the J discontinuity. The applied field is along the soft film anisotropy axis. The wall asymmetry in applied fields is shown to decrease for large interfilm coupling. J is shown to be an upper bound for the field for which wall detachment from the pinning site occurs.

**INTERFACE EFFECTS IN THE MAGNETIC
PHASES OF FERRO/ANTIFERRO
SYSTEMS**

A. L. DANTAS, A. S. CARRIÇO

*Departamento de Física/UFRN, Campus Universitário,
59072-970 - Natal/RN*

The existence of shifted hysteresis has been attributed to the coupling through the interface between ferromagnetic thin films and antiferromagnetic substrates. The prototype system, Co/CoO, is known to exhibit perpendicular anisotropy, adding an extra feature to the rich magnetic structure of F/AF systems. In these systems, under special circumstances, inverted hysteresis have been observed. We present a study of the magnetic phases of a uniaxial F/AF bilayer, with perpendicular anisotropy in the surface of the ferromagnetic film and antiferromagnetic coupling across the interface. The stacking of planes in the AF corresponds to the (111) surface of CoO. Therefore spins in planes parallel to the interface are supposed to be equivalent. For applied fields in arbitrary directions in the planes of the bilayer the magnetic structure is obtained by minimizing the internal energy. In this process the spins are allowed to align with the local, self-consistently determined, effective field. We find very weak biasing fields even for strong interface coupling. We, therefore, believe that the measured biasing fields may be the result of a more complex magnetic structure along the AF side of interface, as appropriate to other crystallographic orientations in which spins from both sublattice are found in each plane parallel to the F/AF interface.

**Comportamento Crítico Estático em Ligas
 $Fe_{1-x}Al_x$**

NELSON O. MORENO, FREDERICO C. MONTENEGRO
Departamento de Física - UFPE

O comportamento crítico das ligas ferromagnéticas desordenadas $Fe_{1-x}Al_x$, com $x = 0.10, 0.20$ and 0.30 , foi investigado em altas temperaturas e baixos campos magnéticos através de medidas de magnetização, usando a técnica de amostra vibrante. A temperatura de Curie e os expoentes críticos β , γ e δ foram determinados para cada valor de x . Dentro do erro experimental, os valores dos expoentes não se alteram na faixa $0.10 \leq x \leq 0.30$ e satisfazem às relações de escala. Os valores obtidos para os expoentes estão de acordo com

o critério de Harris e são próximos daqueles previstos pelo modelo Heisenberg em três dimensões.

**Comportamento Irreversível no
Antiferromagneto Diluído $Fe_xZn_{1-x}F_2$ em
Campos Intensos**

KATHERINE A. LIMA, FREDERICO C. MONTENEGRO
Departamento de Física - UFPE
ALEX LACERDA
*National High Magnetic Field Laboratory Mail Stop E536,
Los Alamos NM8745, USA*

O antiferromagneto diluído e fortemente anisotrópico $Fe_xZn_{1-x}F_2$ foi estudado, através da técnica de magnetização por amostra vibrante em campos magnéticos intensos, para amostras com concentrações próximas a $x = 0.50$. Um comportamento irreversível dependente da temperatura é encontrado nas proximidades da transição spin-flop das amostras. Os resultados são mapeados em um diagrama de fase (H,T) e comparados com estudos¹ similares realizados no sistema isoestrutural, porém mais fracamente anisotrópico $Mn_xZn_{1-x}F_2$. [1] F.C. Montenegro, J.C.O. de Jesus, F.L.A. Machado, E. Montarroyos, and S.M. Rezende, *J. Magn. Magn. Mater.* **104**, 277 (1992).

**Cálculo da Estrutura eletrônica das
Multicamadas de Ni/Ag (0 0 1)**

ANTÔNIO VANDERLEI DOS SANTOS
UFRGS

No presente trabalho iremos analisar a estrutura eletrônica das multicamadas de Ni/Ag; para tanto realizamos cálculos da densidade de estados, transferência de carga, momento magnético e coeficiente de calor específico usando o método da combinação Linear de Orbitais Muffin-Tin (LMTO) de Andersen com aproximação de esferas atômicas (ASA), estes cálculos serão realizados com polarização de spin, e valendo a parametrização de van Barth e Hedin para correlação e troca para um gás de elétrons. O cálculo da energia total para vários parâmetros de rede, vai nos proporcionar o volume de equilíbrio das multicamadas de Ni/Ag. Da análise da densidade de estados no volume de equilíbrio das multicamadas nós vamos tirar importantes propriedades das multicamadas e associada com a transferência de carga tiramos as alterações provocadas na estrutura dos materiais em bulk.

**Propriedades Magnéticas de $Cu(L-asp)(H_2O)_2$
por Medidas de Capacidade Calorífica**

F. ARTUR B. CHAVES, BENEDITO C. M. TORRES
*Laboratório de Baixas Temperaturas, Instituto de Física,
UFRJ*

RAFAEL CALVO
*INTEC (CONICET-UNL), Facultad de Bioquímica y
Ciencias Biológicas, Santa Fé, Argentina*

E. LERNER

*Laboratório de Baixas Temperaturas, Instituto de Física,
UFRJ*

Apresentamos as medidas de Capacidade Calorífica de $Cu(L-asp)(H_2O)_2$ obtidas no intervalo de temperatura de 2.5 K a 15 K. Analizando a contribuição magnética para a capacidade calorífica encontramos um máximo em (3.9 ± 0.1) K. Propomos para o sistema o modelo (1) de uma cadeia linear anti-ferromagnética onde a interação se dá por super-troca. Usando como valor para a constante de acoplamento do Spin 1/2 do Cobre com um de seus vizinhos $J_0/K = -5.5$ K e com o outro, $\alpha J_0/K = (2.2)$ K ($\alpha = 0.39$), o modelo se ajusta perfeitamente aos dados experimentais. O valor proposto para J_0 coincide com o encontrado através de medidas de susceptibilidade magnética (2). No entanto o valor de α é 64% maior. As medidas de Capacidade Calorífica foram feitas com um calorímetro adiabático, descrito em outro trabalho (2).

Bibliografia:

- 1) Magnetic Properties of $Cu(L-asp)(H_2O)_2$: An Alternating Linear Chain Antiferromagnet, Rafael Calvo, Mario C. Paseggi, Gaston E. Barberis, Benedito C.M. Torres F. Artur.B. Chaves, Eugenio Lerner (a ser publicado).
- 2) Propriedades magnéticas de $Cu(L-asp)(H_2O)_2$ Benedito C. M. Torres, Tese de Mestrado

**The Antiferromagnetic Phase of Europium
Metal**

ROBERTO E. LAGOS, ALZIRA C. M. STEIN-BARANA
Departamento de Física, IGCE, UNESP, Rio Claro, SP
MIGUEL KIWI
Facultad de Física, PUC, Santiago de Chile
JAIME RÖSSLER
*Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago de
Chile*

We present a simple selfconsistent model for the *Eu* Fermi Surface, incorporating the "superzone" distortions of the latter, associated to the wave vector \vec{Q} of the observed magnetic order, namely the spiral anti-ferromagnetic phase. The model is based on the usual *RKKY* indirect exchange interaction. The gaps appearing in the conduction band, due to superzone effects are function of \vec{Q} , the exchange coupling constant and the geometrical parameters characterizing our non-spherical Fermi Surface model. The wave vector \vec{Q} of the antiferromagnetic spiral is related to the position of the maxima of the (static) susceptibility function, which in turn depends upon the detailed structure of the Fermi Surface, rendering a selfconsistent calculation. Within this context we show that *both* the non-spherical Fermi Surface features and the superzone effects have to be considered in order to obtain a stable antiferromagnetic phase (at zero temperature). Our

model introduces some parameters, all of them readily available, either from band structure calculations or from experimental data. Our results are in good agreement with the latter. Work still in progress suggests some optical parameters can be inferred from our calculations via the fluctuation-dissipation relation.

Magnetic properties of H-doped Gd_2CuO_4 *

C. H. WESTPHAL, R. F. JARDIM

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

P. A. SUZUKI

FAENQUIL, Lorena, SP

S. GAMA

IFGW, UNICAMP, SP

Magnetic measurements at low temperatures and under applied magnetic fields in Gd_2CuO_4 compounds revealed a complex magnetic behavior.[1] We have found two characteristic susceptibility maxima at $T_N = 7$ K, which is associated with the antiferromagnetic ordering of the rare-earth sublattice, and at $T_w = 20$ K, which is believed to be associated with the development of a weak antiferromagnetism. In this work we focus on the magnetic properties associated with the magnetic ordering of the CuO planes in Gd_2CuO_4 and H-doped Gd_2CuO_4 . We found that the Cu antiferromagnetic ordering develops below $T_{Cu} = 260$ K in all samples studied. While the Neel temperature is insensitive to H doping up to = 0.05 wt.%, its behavior as a function of excitation field reveals a significant decrease of T_{Cu} for doped samples. Also, we found a complex behavior of both ac magnetic susceptibility components χ' and χ'' below T_{Cu} . [1] R. F. Jardim, C. H. Westphal, A. Paduan-Filho, and C. C. Becerra, Phys. Rev. B 45, 10485 (1992). * Work supported by FAPESP under Grant No. 93/4204-4.

A TRANSIÇÃO "SPIN-FLIP" E O DIAGRAMA DE FASES MAGNÉTICAS DE LIGAS DE Cr-V

ADILSON JESUS APARECIDO DE OLIVEIRA, WILSON AIRES ORTIZ

Grupo de Supercondutividade e Magnetismo - DF-UFSCar

OSCAR FERREIRA LIMA

Instituto de Física "Gleb Wataghin" - Unicamp

PAULO CÉSAR DE CAMARGO

Departamento de Física - UFPR

O Cromo e as ligas de $Cr - xat.\%V$ que apresentam estado antiferromagnético são caracterizados por ondas de densidade de spin (SDW) incomensuráveis com a rede recíproca. Em determinadas faixas de concentrações estas ligas possuem três fases distintas: a fase paramagnética (P) acima da temperatura de Néel; a fase AF_1 entre a temperatura de Néel e a temperatura de "spin-flip" (T_{SF}) na qual a SDW tem polarização transversal; e a fase AF_2 abaixo de T_{SF} na qual a SDW

tem polarização longitudinal. Portanto, a fase AF_1 é caracterizada por domínios magnéticos do tipo (Q_i, S_j) onde $i \neq j$, que nos dá uma simetria ortorrômbica, enquanto que a fase AF_2 tem domínios magnéticos $i = j$ e apresenta simetria tetragonal. Efetuamos medidas de suscetibilidade magnética DC através de um magnetômetro tipo SQUID em amostras de $Cr - xat.\%V$ ($x=0, 0.1, 0.2, 0.4$ e 0.67) em função da temperatura. A fronteira entre as fases AF_1 e AF_2 foram determinadas e estabelecido um limite inferior para a transição de "spin-flip" (SF) em $x = 0.67$

SPECIFIC HEAT OF SUPERPARAMAGNETIC ORGANIC CLUSTER COMPOUND $Mn_{12}Ac$

ANGELO MARCIO DE SOUZA GOMES, MIGUEL

ALEXANDRE NOVAK

Universidade Federal do Rio de Janeiro

We made specific heat measurements on a $Mn_{12}Ac$, $Mn_{12}O_{12}(CH_3COO)_{16}(H_2O)_4 \cdot 2CH_3COOH \cdot 4H_2O$, polycrystal powder. This organic cluster compound has $S=10$ total spin with a high anisotropic barrier ($\Delta 64 \sim K$) with the $m_s = \pm 10$ zero field splitted ground state and behaves like a perfect superparamagnet. Data from 1.6 up to 17 K indicate no phase transition anomaly. These data can be fitted to a $\alpha T^{-2} + \beta T^3 + C_m$ curve. These different contributions are difficult to determine precisely due to small value of Debye temperature and the presence of the magnetic Schottky term (C_m) due $m_s = \pm 9$ doublet 13 K above the ground state. Measurements done with a DC magnetic field lifts the degeneracy of the ground state showing up as a small anomaly around 3K, where the magnetization becomes unblocked and able to change its orientation. The sample loses easily some acetic acid and water of crystallization with repeated thermal cycles under vacuum affecting considerably the T^3 lattice contribution.

AC SUSCEPTIBILITY MEASUREMENTS ON SUPERPARAMAGNETIC COMPOUND:

$Mn_{12}Bz$

ANGELO MARCIO DE SOUZA GOMES, MIGUEL

ALEXANDRE NOVAK

Universidade Federal do Rio de Janeiro

We have studied the superparamagnetic properties of the $Mn_{12}Bz$ using the technique of ac susceptibility and high field magnetization measurements. The AC complex susceptibility is typical of an assembly of identical superparamagnetic particles with mono exponential decay of the remanent magnetization showing a semi-circular Argand diagram. From these data we obtain the temperature dependence of relaxation time which follows an Arrhenius law, $\tau = \tau_0 e^{\frac{E_a}{kT}}$ above 4 K with

$\Delta \sim 60K$. Low temperature and high field static magnetization measurements done in single crystals show that the ground state is $S=9$ with a high anisotropy barrier in agreement with dynamic measurements. The similarity of these results with those of another cluster compound, $Mn_{12}Ac$ which has $S=10$ indicate that we can also expect the same quantum effects at low temperatures such as tunneling through the barrier.

Magnetic Properties of $Ce_{0.8}Nd_{0.2}Ni$ and $La_{0.8}Nd_{0.2}Ni$ Compounds

I. S. OLIVEIRA

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

K. NISHIMURA

Department of Engineering, Toyama University, Toyama 930, Japan

Y. ISIKAWA

Department of Physics, Toyama University, Toyama 930, Japan

The intermetallic compounds $Ce_{0.8}Nd_{0.2}Ni$ and $La_{0.8}Nd_{0.2}Ni$ have been studied by magnetisation, electrical resistivity, magnetic susceptibility and specific heat. Both compounds order ferromagnetically at $T_c \sim 1.6$ K with the easy direction of magnetisation along the a-axis, but $Ce_{0.8}Nd_{0.2}Ni$ presents a strong Kondo behaviour with $\gamma \sim 350$ mJ/molK². This is a new type of Kondo lattice where the ordering RKKY interaction occurs only between the trivalent Nd ions. At very low temperature (~ 10 mK) the Ce ions do not show magnetic moment.

Propriedades magnéticas de compostos intermetálicos $Nd_6Fe_{13-x}Al_x$

SHINTARO JONEN, HERCÍLIO RODOLFO RECHENBERG
Instituto de Física da USP, São Paulo

Compostos do tipo $R_6Fe_{13}X_1$ ($R=Nd$ ou Pr ; $X=Si, Cu, Ge, Sn, Al, \dots$), de estrutura tetragonal, apresentam a particularidade incomum de serem antiferromagnéticos ($T_N \sim 250$ a 450 K). Em muitos deles foi observada uma transição metamagnética para campos aplicados da ordem de 4 T. No caso específico em que X é o alumínio, existe um largo intervalo de solubilidade, com o excesso de átomos de Al ocupando parte dos sítios do Fe. Estamos investigando em detalhe a dependência das propriedades magnéticas com a concentração de Al, em particular a temperatura de Néel e o campo crítico da transição metamagnética a diferentes temperaturas. Através da espectroscopia Mössbauer determinamos também a preferencialidade da substituição de Fe por Al em determinados sítios cristalográficos, bem como a dependência dos campos hiperfinos do Fe em relação à concentração de Al.

Bonding Structure and Magnetism of the Quaternary Intermetallic Compounds

GdM_2B_2C ($M=Fe, Ni$)

ZENG ZHI

CBPF

D. E. ELLIS

Dep. of Phys., Northwestern Univ., USA

DIANA GUENZBURGER, E. M. B. SAITOVITCH

CBPF

Electronic structure and magnetic properties of the Gd-based quaternary intermetallic borocarbide compounds GdM_2B_2C ($M=Fe, Ni$) are analyzed, based upon the local density embedded-cluster approach. The Discrete Variational method is employed and 75 atoms clusters are considered. The density of states (DOS), charge density and spin densities and bond orders are examined to understand interaction and coupling between alternating M-B and Gd-C slabs of these highly anisotropic compounds. Metallic, covalent, and ionic bonding structures are simultaneously present and interacting with each other, so that the large Gd moments suppress all evidence of superconductivity contrary to many other REM_2B_2C (RE: rare earth; M: transition metal) systems. The main contribution to the DOS near the Fermi level and thus to transport properties comes from transition metal (TM) planes, as found in band structure calculations on related materials. Contour plots and bond order analysis of charge density show the expected strong charge transfer $Gd \rightarrow C$ and the strong B-C covalent bonding which provides a rigid lattice structure coupling to Ni through the four-fold Ni-B covalent bonds. Gd is found to be an essentially trivalent ion which electrically stabilizes the B-C covalent lattice, while providing a small sd contribution to conduction states. The contour plots of spin density reveal the magnetic structure of these compounds, which is dominated by the large f^7 Gd moment. Spin transfer from Gd to the TM through the B-C lattice is calculated; hyperfine interaction parameters are calculated at the Fe site for clusters representing $Gd(M_{1-x}Fe_x)_2B_2C$ ($M=Fe, Ni$) and, in the case of $M=Ni$, compared with experimental results obtained by Mössbauer spectroscopy ($x \leq 0.1$)[1].

1. E. M. Baggio-Saitovitch, S.L. Bud'ko and M.B. Fontes, LACAME 94, Santiago do Chile.

ESTUDO DE PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DE LIGAS BINÁRIAS DE TERRA RARA

M. OLZON-DIONYSIO, S. D. DE SOUZA

DF-UFSCar, São Carlos

C. J. MAGON, R. R. DE SOUZA

IFSC-USP, São Carlos

Ligas de Terra Rara de mesma família isoestrutural são de grande importância em estudos sistemáticos de propriedades magnéticas. Estamos estudando algumas ligas

cúbicas ferromagnéticas da família RAl_2 , $R= Ho, Dy, Gd$ e Tb [1]. Na preparação das amostras, foram fundidas quantidades estequiométricas dos metais constituintes de alta pureza, em forno de arco, em atmosfera de argônio. A difração de raios-x das amostras pulverizadas indicou uma só fase. As medidas de susceptibilidade magnética em função da temperatura (4.2 K a 300 K), realizadas em um susceptômetro AC [2], mostraram que na fase paramagnética as ligas apresentam comportamento tipo Curie-Weiss. Tanto os parâmetros de rede como as temperaturas de Curie encontradas, estão de acordo com resultados disponíveis na literatura. Serão também discutidos os últimos resultados obtidos com as ligas $TbIn$ e Tb_2In , que complementam o trabalho apresentado no Encontro anterior [3]. Nosso objetivo é utilizar estes resultados na análise dos valores de campos hiperfinos magnéticos a serem medidos nessas ligas

[1] *Advances in Physics* 39, n.4, 309-405, (1990). [2] R. R. Souza, C.J.Magon- Susceptômetro para medidas automáticas da susceptibilidade magnética AC- XV ENFMC-Caxambu, 1992. [3] M. Olzon-Dionysio, S.D. Souza, R.R. Souza, C.J.Magon- Estudo de susceptibilidade em ligas binárias de Terra Rara- XVI ENFMC - Caxambu, 1994.

Trabalho parcialmente financiado pela FAPESP.

Propriedades Magnéticas dos compostos

$R(Ni_{1-x}Cu_x)_5$, onde $R=Nd$ e Tb

VITÓRIA BARTHEM, EDUARDO ANDRÉ R. M. DA GAMA
UFRJ

Os sistemas $R(Ni_{1-x}Cu_x)_5$ cristalizam em uma estrutura hexagonal do tipo $CaCu_5$. Nos compostos RNi_5 e RCu_5 o magnetismo vem predominantemente da terra rara e ambos apresentam um comportamento ferromagnético. O Ni, com uma contribuição mais significativa é responsável por curvaturas nas curvas de magnetização e de susceptibilidade. Ocorre porém que a introdução do Cu no RNi_5 ou Ni no RCu_5 varia de uma maneira bastante significativa as propriedades magnéticas destes materiais. Neste trabalho estudamos o mecanismo pelo qual a pequena contribuição do Ni e do Cu se torna de fundamental importância nas propriedades magnéticas dos sistemas $R(Ni_{1-x}Cu_x)_5$, tanto para $R=Nd$ como Tb . A análise é feita a partir de medidas de magnetização, em campos de até 5 tesla, e susceptibilidade magnética AC, a temperaturas entre 4.2K e 300K.

EFEITOS DE RELAXAÇÃO MAGNÉTICA EM FERRITAS NANOCRISTALINAS

JOSÉ ANTONIO HUAMANÍ COAQUIRA, HERCILIO RODOLFO RECHENBERG
Instituto de Física USP, São Paulo

Pequenas partículas ($\sim 1-10$ nm) de materiais ferromagnéticos apresentam efeitos bem conhecidos de relaxação superparamagnética. O tempo de relaxação de uma partícula de volume V é $\tau = \tau_0 \exp(KV/kT)$, onde $\tau_0 \sim 10^{-9}$ s e K é uma constante de anisotropia efetiva. A relaxação se manifesta em diferentes intervalos da razão V/T , dependendo da técnica experimental utilizada: as "janelas do tempo" características de medidas de magnetização remanente e de espectroscopia Mössbauer são de $\sim 10-10^2$ s e $\sim 10^{-9}-10^{-7}$ s, respectivamente. Neste trabalho, utilizamos as duas técnicas mencionadas para caracterizar amostras nanocristalinas de ferritas MFe_2O_4 ($M=Mn, Fe$ e Co) do ponto de vista da distribuição de volumes $P(V)$ e da constante de anisotropia K . A consistência dos resultados obtidos pelas duas técnicas será enfatizada na discussão.

MAGNETORESISTIVE EVIDENCE OF THE FIELD-INDUCED MAGNETIC PHASE TRANSITIONS IN THE REENTRANT SUPERCONDUCTOR $HoNi_2B_2C$

M. EL MASSALAMI, M. A. CONTINENTINO, E. M. BAGGIO-SAITOVITCH
CBPF

Magnetoresistivity isotherms of polycrystalline intermetallic $HoNi_2B_2C$ compound show for $T < T_N$, a cascade of field-induced magnetic phase transitions. The observed critical fields are in excellent agreement with those fields that were determined from single crystal high field measurements. The observed magnetic phase transitions (and the reported H-T phase diagram) are interpreted as follows: an external magnetic field (H_{c2}) transforms the superconducting antiferromagnetic ground state into a non-superconducting distorted helical state. On increasing the field further, such a (distorted) helical state is transformed into the ferromagnetic state via two types of fan-like spin-structures. These types of field-induced transformations are reminiscent of the ones observed in the Ho-metal and our theoretical interpretations follows similar lines. Furthermore, the conditions under which the helical state is formed in the $HoNi_2B_2C$ compound are evaluated and are found to be related to the antiferromagnetic character of the RKKY exchange interactions. The transformation of the helical state into the superconducting commensurate antiferromagnetic state at lower temperatures is considered and finally the influence of the helical state by magnetic field, pressure, impurity, etc., are also discussed.

THE MAGNETIC PROPERTIES OF THE QUATERNARY INTERMETALLIC COMPOUNDS $GdNi_2B_2C$

B. GIORDANENGO, M. EL MASSALAMI, S. L. BUD'KO, E. M. BAGGIO-SAITOVITCH
CBPF

J. VOIRON
 Lab. Louis Néel (France)
 A. SULPICE
 CRTBT (France)

Structural, transport and magnetic studies were used for the characterization of the intermetallic $GdNi_2B_2C$ compound. Its structure is the body-centered tetragonal with a space group $I4/mmm$. No superconductivity is observed down to 1.2K. The effective moment in the paramagnetic phase is found to have the same value as expected from the free Gd^{3+} . Furthermore high-field magnetization studies (over a wide temperature and field ranges) reveal two magnetic phase transitions at 19.5(5) K and at 7.2(3)K. At $T = 1.7K$, the full Gd-moment saturation is attained only for $H > H_c = 133(3)kOe$. It is observed that the overall magnetic features are similar to the magnetic properties of the RNi_2B_2C ($R = Tm, Er, Ho, Dy, Tb$) isomorphs. Attempts are made to interpret these features in terms of the picture that assumes the weakly-anisotropic Gd-moments to be RKKY-coupled ferromagnetically in plane and antiferromagnetically out-of-plane.

THE MAGNETIC PROPERTIES OF $RNiBC$
 ($R = Ho, Gd$): ABSENCE OF
 SUPERCONDUCTIVITY AND HELICAL
 STATE

M. EL MASSALAMI, J. C. MONDRAGON, E. M.
 BAGGIO-SAITOVITCH
 CBPF
 A. SULPICE
 CRTBT (France)

The magnetic and transport properties of new quaternary intermetallic $RNiBC$ ($R=Ho, Gd$) compounds were studied in the following ranges of temperatures and fields: $1.2K < T < 300K$ and $H < 80kOe$. Their structures (as being determined from room temperature X-ray powder diffraction analysis) are found to be of tetragonal-types and with $P4/nmm$ space group. The lattice parameters for $R= Gd$ are $a=3.6289(1)\text{\AA}$, $c=7.5463(2)\text{\AA}$ while for $R = Ho$ are $a = 3.563(1)\text{\AA}$, $c = 7.546(1)\text{\AA}$. These compounds order antiferromagnetically at 9.8(3)K and 14.2(3)K for, respectively $R= Ho$ and Gd . The ordering temperatures are found to scale well with the de Gennes factor, $(g - 1)^2 J(J + 1)$. The low temperature Ho-moment in the $HoNiBC$ compound is found to saturate to $8.5(1)\mu_B$. In contrast with the structurally-related reentrant superconductor $HoNi_2B_2C$, neither superconductivity nor helical ground-state are observed in $HoNiBC$ for the whole temperature range. Their absences are attributed, respectively, to the positioning of the Fermi level at a DOS minimum and the presence of the HoC double layers that inhibits the establishment of a helical spin arrangement.

**FLUTUAÇÕES DE SPIN E MÍNIMOS NA
 VARIAÇÃO TÉRMICA DA
 RESISTIVIDADE ELÉTRICA DE
 COMPOSTOS RM_2 ($R=TERRA RARA$ E
 $M=METAL$ DE TRANSIÇÃO)**
 FLÁVIO GARCIA, ARMANDO YOSHIHAKI TAKEUCHI,
 SONIA FRANCO DA CUNHA
 CBPF

Independente de haver ou não indução nos metais de transição M pela terra rara R, as curvas de resistividade elétrica de alguns compostos com $M=Ni$ ou Co apresentam um mínimo. Este mínimo está relacionado ao espalhamento dos elétrons de condução pelas flutuações de spin aumentados pelos momentos $4f$ e também com as instabilidades dos momentos da terra rara em temperaturas pouco maiores que T_C . Este é um dos resultados do estudo dos compostos $(Er, Tb)M_2$ com $M=Co$ ou Ni através de medidas de resistividade elétrica em função da temperatura. Estes compostos são fases de Laves onde o Co têm um momento induzido pela terra rara, o que não acontece com o Ni . Foi observado que $ErCo_2$ e $TbCo_2$ têm transições de primeira e segunda ordem respectivamente e que pequena quantidade, 10%, de Tb , em $ErCo_2$, muda o tipo de transição. Os compostos de Ni são sempre de segunda ordem. Estas diferenças são provocadas pelo fato da energia de Fermi estar numa região de forte declínio da curva de densidade de estados da banda d nos compostos RCO_2 e de quase constante variação, nos compostos RNi_2 . Este fato está também diretamente ligado ao comportamento da resistividade para $T < T_c$. Por outro lado, as flutuações de spin são extintas pelo campo molecular para $T < T_c$. Observa-se então uma transição abrupta característica de transição de primeira ordem. Outros parâmetros como temperatura de transição, resistividade residual e parâmetro de rede foram estudados.

**ESTUDO DAS PROPRIEDADES
 ELÉTRICAS E MAGNÉTICAS DOS
 COMPOSTOS INTERMETÁLICOS
 $(Er, Ho)Co_2$**

MÁRCIA REGINA SOARES DA SILVA, ARMANDO
 YOSHIHAKI TAKEUCHI, SONIA FRANCO DA CUNHA
 CBPF

O estudo das propriedades elétricas e magnéticas dos compostos intermetálicos RCO_2 ($R=terra\ rara\ pesada$) tem sido objeto de estudo durante vários anos, tanto experimentalmente quanto do ponto de vista teórico. Nestes compostos, o comportamento é determinado pelas peculiaridades da estrutura eletrônica. O nível de Fermi nos RCO_2 se situa pouco acima do pico (bastante estreito) da curva de densidade de estados. Estudos indicam que para $R=Er, Ho$ e Dy apresentam transição

magnética de primeira ordem enquanto que para $R=Gd$ e Tb a transição é de segunda ordem. Recentemente tem crescido o interesse no estudo destes compostos devido à utilização dos mesmos no desenvolvimento de um novo material regenerador criogênico em substituição ao chumbo (exemplo: $Er(Co,Ni)_2$). Neste trabalho apresentamos resultados preliminares de resistividade elétrica e magnetização no sistema $(Er, Ho)Co_2$. Nestes compostos intermetálicos, os dois extremos da série $ErCo_2$ e $HoCo_2$ apresentam transições magnéticas de primeira ordem com $T_C=32$ e $78K$, respectivamente. O magnetismo dos elétrons $3d$ do cobalto nestes compostos é satisfatoriamente descrito em termos do modelo de magnetismo de banda levando em conta as flutuações de spin. O objetivo deste trabalho é acompanhar a evolução da transição magnética de primeira ordem existente no $ErCo_2$ com a substituição gradual da terra rara pesada Er por Ho e além disso, determinar a mudança de direção de fácil magnetização existente a baixas temperaturas nestes compostos.

ESTUDO POR EFEITO MÖSSBAUER DAS PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DAS LIGAS DESORDENADAS $Fe_{1-x}Mn_x$ NA FASE ϵ (HCP).

JOÃO ALBERTO VALCANOVER, CLEDERSON PADUANI, JOÃO CARDOSO DE LIMA
UFSC

As ligas desordenadas $Fe_{1-x}Mn_x$ são obtidas na fase hcp no intervalo $0.1 \leq x \leq 0.3$, sendo paramagnéticas na temperatura ambiente e antiferromagnéticas abaixo de $250K$. Investigamos o comportamento magnético destas ligas com substituição de átomos de ferro pelos átomos de manganês em todo o intervalo de composição em que esta fase é estável, com as técnicas experimentais de difração de raios-x, espectroscopia Mössbauer na temperatura ambiente e em baixas temperaturas (nitrogênio líquido) e calorimetria diferencial de varredura. Observamos que nesta fase, as ligas são estáveis na temperatura ambiente, apresentam elevada resistência mecânica e um bom módulo de elasticidade. Contudo as ligas com mais alto teor de manganês se oxidam mais rapidamente, principalmente em altas temperaturas. O alto ponto de fusão deste material indica uma forte ligação entre os átomos de ferro e manganês nesta fase. A temperatura de Néel e o desdobramento quadrupolar são independentes da composição.

TRANSPORT PROPERTIES OF NANOSTRUCTURED MAGNETIC MATERIALS

GUSTAVO JESUS BRACHO RODRIGUEZ, MARINES GRANDE MALCUM MIRANDA, MARIO NORBERTO BAIBICH
IF - UFRGS

The magnetic coupling and associated Giant Magneto Resistance effects have been observed in a number of systems, ranging from MBE grown superlattices to microcrystallized amorphous metals or chemically obtained powders. We have measured the low temperature resistivity vs. temperature for pristine and annealed Co/Ag multilayers with thicknesses ranging from 0.5 to 1.5 nm for Co, and 4.5 for Ag obtained by electron beam deposition at low rates. The results are interpreted with the help of Fuchs-Sondheimer formalism for multilayers, in order to understand the behavior of the magneto resistance as a function of temperature. Also, the coupling measured by the ratio of the zero and remanent fields, as previously proposed by one of us, is studied as a function of temperature.

SIZE AND ROUGHNESS BEHAVIOR OF THE MAGNETOTRANSPORT PROPERTIES OF NANOSTRUCTURED MAGNETIC MATERIALS

MARINES GRANDE MALCUM MIRANDA, GUSTAVO JESUS BRACHO RODRIGUEZ, MARIO NORBERTO BAIBICH
Instituto de Física, UFRGS

The magnetic coupling and associated Giant Magneto Resistance effects have been observed in a number of systems, ranging from MBE grown superlattices to microcrystallized amorphous metals or chemically obtained powders. For some pairs of metals-compositions, the "back diffusion" effect can be used to modify the roughness of interfaces or, in higher temperature-time anneals, to break the layers and so obtain a composite of highly planar "islands" of, say, Co in a "sea" of Ag, as was previously shown by one of us. By properly monitoring the transformations and establishing the corresponding magnetic behavior, a "scale" for roughness or size of the particles can be built, and this associated to the corresponding magnetic properties. This knowledge is vital to any optimization of these properties for industrial use. We have measured the high temperature resistivity vs. time for the above mentioned systems to establish the apparent kinetic parameters that characterize the transformation. The samples used in this first part of our work are Co/Ag multilayers with thicknesses ranging from 0.5 to 1.5 nm for Co, and 4.5 for Ag obtained by electron beam deposition at low rates. The results are interpreted with the help of a Landauer-like model for the conduction in composites.

MAGNETIC PROPERTIES OF $Gd(Ni_{1-x}Co_x)_2B_2C$ SERIES OF BOROCARBIDES

S. L. BUD'KO, M. B. FONTES, E. BAGGIO-SAITOVITCH
CBPF

Recently discovered series of quaternary borocarbides RT_2B_2C (R = rare earth, T = transition metal) caused a great deal of attention due to the elevated superconducting transition temperature for $LuNi_2B_2C$ and rich magnetic phase diagram for the borocarbides with R - magnetic rare earth. In the present work we performed X - ray diffraction and AC susceptibility measurements in $Gd(Ni_{1-x}Co_x)_2B_2C$ series of compounds. Substitution of Ni by Co in this series causes overall decrease of two magnetic ordering temperatures, T_a and T_b which is probably determined by the combination of two effects: increase of the distance between GdC layers and changes of the density of states near the Fermi level and the band structure due to different contribution of Ni and Co to the filling of the 3 d bands.

PHYSICAL AND CHEMICAL PRESSURE EFFECT ON TRANSPORT PROPERTIES

OF $Ce(Ru_{1-x}Fe_x)_2Ge_2$

S. L. BUD'KO, M. B. FONTES

CBPF

M. A. CONTINENTINO

IF-UFF

M. EL MASSALAMI, E. BAGGIO-SAITOVITCH

CBPF

We report the change of resistivity in pseudo - ternary $Ce(Ru_{1-x}Fe_x)_2Ge_2$ series with Fe substitution ($0 \leq x \leq 1$) and under hydrostatic pressure up to 17 kbar. Despite the different directions of changes in c - axis with Fe substitution (c increases) and under pressure (c decreases), the unit cell volume decreases in both cases. Under hydrostatic and chemical pressure resistivity was found to scale with the unit cell volume. Results are compared with the literature data for hydrostatic pressure and Si substitution effect in $CeRu_2(Ge_{1-x}Si_x)_2$ and are found to be similar to each other. The possible picture of the changes in the physical properties under chemical and hydrostatic pressure is discussed within the frame of the model of the competition between the RKKY interaction and Kondo spin compensation and the model of $Ce - f$ and d, p, s - bands hybridization.

EFEITOS DO ESTREITAMENTO DA ESTRUTURA FINA NO ESPECTRO DE EPR DE $Ce_xLa_{1-x}Os_2 : Gd$.

MARLI DE F. OLIVA FERREIRA, PABLO A. VENEGAS
Departamento de Física, UNESP-Campus Bauru

A técnica de ressonância paramagnética eletrônica tem sido usada nas últimas duas décadas para o estudo de íons magnéticos diluídos em metais, em particular, tentou-se usar para o estudo de íons magnéticos diluídos em compostos de Ce . Os compostos de Ce quando estudados com várias técnicas que envolvem por exemplo medidas de susceptibilidade magnética, efeito Hall, constante de rede, resistividade, calor específico,

etc, apresentam comportamentos anômalos associados a efeitos de flutuação de valência no Ce . No caso particular do espectro de ressonância do Gd diluído em $Ce_xLa_{1-x}Os_2$, que é o sistema que nos interessa analisar aqui, o comportamento térmico da largura de linha apresenta também comportamento anômalo. Contrariamente ao que acontece em metais normais, em que o comportamento térmico da largura de linha é linear com a temperatura, a largura de linha do Gd diluído em $Ce_xLa_{1-x}Os_2$ apresenta um aumento além do esperado a altas temperaturas ($70 \leq T \leq 300K$). Num trabalho prévio [1] mostramos que o comportamento a altas temperaturas do espectro de ressonância pode ser descrito pelos efeitos da flutuação de valência do Ce . No entanto, para descrever o comportamento a baixas temperaturas ($4.2 \leq T \leq 70K$) é necessário incluir outros efeitos. É largamente conhecido que o Gd apresenta estrutura fina resolvida a baixas temperaturas, a qual se estreita quando a temperatura é aumentada. Neste trabalho mostramos que o efeito de estreitamento da estrutura fina é responsável pelo comportamento não linear a baixas temperaturas. Mostramos também que incluindo os efeitos de valência intermediária e estreitamento, é possível descrever o comportamento térmico da largura de linha do Gd diluído em $Ce_xLa_{1-x}Os_2$, em toda a faixa de temperaturas. (Trabalho realizado com o apoio do CNPq e Fapesp).

[1] P.A. Venegas and G.E. Barberis, Phys. Rev. B, **46**, 911(1992).

COMPORTAMENTO MAGNÉTICO DE METAIS EM MATRIZES POLIMÉRICAS
VALÉRIA CRISTINA GELFUSO, WILSON AIRES ORTIZ
Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos
Carlos
ANTONIO APRÍGIO DA SILVA CURVELO
Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo

A lignina é uma macromolécula natural muito abundante na natureza, razão pela qual desperta grande interesse para possíveis aplicações. Sendo sua estrutura bastante complexa, é usual substituí-la, em estudos experimentais, por um composto que exiba características estruturais semelhantes, e que possa simular seu comportamento físico e químico. Um composto adequado a tais propósitos é o Poliestireno Sulfonado de Sódio (NaPSS), um polieletrólito sintético que é um modelo simplificado de componentes macromoleculares biológicos.

Neste trabalho, estamos interessados em verificar a possibilidade de utilização do NaPSS - e por extensão, da lignina - como base para um meio magnético, em que íons Na^+ sejam substituídos por íons magnéticos como o Mn^{++} , o Fe^{++} e o Cu^{++} .

As amostras são preparadas por titulação do polímero, na forma ácida, por meio da solução do metal na forma

de base. Amostras de controle, em que o íon magnético não está ligado quimicamente à matriz polimérica, são preparadas por mistura física do polímero com o metal na forma iônica.

A caracterização magnética de amostras com diferentes concentrações do íon magnético é feita através de medidas de suscetibilidade AC, pela técnica de mútua-indutância.

CÁLCULO DAS PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DO SISTEMA DE LIGAS DESORDENADAS Fe_xMn_{1-x} .

CLEDERSON PADUANI
UFSC

EUSTAQUIO GALVAO DA SILVA
UFMG

Investigamos as propriedades magnéticas locais de ligas Fe-Mn com o método de orbitais moleculares variacional discreto (DVM). Os cálculos foram realizados com polarização de spin, onde utilizamos o termo de correlação e troca de Barth-Hedin. Os aglomerados foram construídos com 15 átomos considerando a primeira e a segunda vizinhança numa rede bcc. Calculamos os parâmetros hiperfinos desvio isomérico e campo magnético hiperfino para o átomo central de cada aglomerado, onde investigamos a dependência desses parâmetros com a composição, ao substituir átomos Fe por átomos Mn na primeira e segunda vizinhança. Obtivemos um momento magnético de $-3,18 \mu_B$ para o átomo Mn isolado na matriz do ferro bcc. Observamos uma forte dependência do momento magnético do átomo Fe central com o número de vizinhos Mn. Calculamos ainda as densidades parciais de estados para investigar o efeito da adição de átomos Mn na estrutura de banda deste composto. Os resultados calculados são comparados com resultados experimentais conhecidos para elucidar o comportamento magnético singular deste sistema de ligas.

Propriedades Termodinâmicas em $Rb_{0.71}K_{0.29}$

FLAVIO DJANIKIAN, BERNARDO LAKS
Universidade Estadual de Campinas - Unicamp

Apresentamos um estudo das propriedades termodinâmicas da liga $Rb_{0.79}K_{0.21}$ através da conjunção de cálculos de Dinâmica Molecular e de Dinâmica de Rêde. Os cálculos de Dinâmica Molecular foram realizados para um sistema de 1024 partículas distribuídas aleatoriamente em rede b.c.c. Efeitos de superfície foram minimizados considerando-se condições periódicas de contorno. A dinâmica do sistema é descrita através da teoria do pseudo-potencial. Curvas de pressão e energia contra temperatura a volume constante são apresentados. Apresentamos ainda o comportamento da temperatura harmônica de Debye e temperatura característica clássica com o volume, obtido

através da Dinâmica de Rêde. Expansão a altas temperaturas nos permitem separar as contribuições anarmônicas para as grandezas termodinâmicas. Discute-se o comportamento analítico destas expressões.

BAND HYBRIDIZATION IN $Ce(Ru_{1-x}Fe_x)_2Ge_2$ SERIES OF COMPOUNDS.

MAGDA BITTENCOURT FONTES, SERGEY
LEOKADIEVICH BUD'KO

CBPF

MÚCIO AMADO CONTINENTINO

UFF

MOHAMED EL-MASSALAMI, LUIZ C. SAMPAIO,
ALBERTO PASSOS GUIMARÃES, ELISA MARIA

BAGGIO-SAITOVITCH

CBPF

$CeRu_2Ge_2$ is a normal ferromagnet at $T_c=7.5$ K with $f - Ce$ localized magnetic moments, around $2\mu_B$, aligned along the c direction of the tetragonal $ThCr_2Ge_2$ type of crystalline structure. Substitution of Ru by Fe atoms drives this system from ferromagnetism to Pauli paramagnetism (for the end compound $CeFe_2Ge_2$), with no indication of Curie-Weiss behavior in the range of temperatures from 2 to 300 K. In the present work we have monitored the change of the physical properties of $CeRu_2Ge_2$ with Fe substitution using X-ray diffraction, ac susceptibility, magnetization, resistivity and Mössbauer effect. The obtained results favored the description of the physical properties within the model of hybridization of $Ce - f$ orbitals with s , p bands of Ge and/or d band of transition metal (Ru and Fe). In this picture, the decreasing of the density of states in the Fermi level due to the broadening of the bands is responsible for the loss of magnetism, when the Stoner criterium is not satisfied at a critical concentration $x - Fe = 0.7$.

MICROSCOPIC MAGNETIC MEASUREMENTS IN RT_2B_2C ($R = Y$, rare earth, $T = Ni, Co$).

ELISA MARIA BAGGIO-SAITOVITCH, MAGDA
BITTENCOURT FONTES, SERGEY LEOKADIEVICH
BUD'KO, DALBER SÁNCHEZ CANDELA, DOMINGO
ALIAGA-GUERRA

CBPF

RT_2B_2C family of quaternary borocarbides shows a variety of interesting physical properties: superconductivity, interplay between superconductivity and magnetism, rather complex magnetic order. In the present work NMR signal from ^{11}B and ^{59}Co nuclei for $Gd(Ni_{1-x}Co_x)_2B_2C$ series of compounds was measured at 4.2 K in a range of frequencies between 40 and 100 MHz. A transferred hyperfine field, probably from the rare earth ions, was observed in both sites, and its value was estimated to be about 6 T. Doping with ^{57}Fe

in RT_2B_2C ($R = Y$, rare earth, $T = Ni, Co$) series was performed in order to follow by Mössbauer spectroscopy as a function of temperature the structural variations and magnetic order, induced by the different rare earth metals. Results of the "local probe" measurements are discussed together with the magnetic phase diagram suggested by macroscopic magnetic studies.

COMPORTAMENTO VIDRO DE SPIN EM LIGAS DE CROMO E DE CROMO-SILÍCIO DOPADAS COM MANGANÊS

VLADIMIR YUREVICH GALKIN, PAULO CÉSAR DE CAMARGO
UFPR
JACOB SCHAFF
IFUFRGS.

Os exemplos clássicos de vidro de spin são ligas diluídas de metais não magnéticos dopados com materiais magnéticos. O sistema Cu-Mn(1) é um exemplo onde a ocorrência do fenômeno vidro de spin vem associada a onda de densidade de spin típica do cromo e de suas ligas antiferromagnéticas. Ligas antiferromagnéticas de cromo-ferro contendo entre 10 e 18 at de ferro mostram o efeito vidro de spin, próximo da transição ferromagnética(2). Neste trabalho apresentamos novos resultados onde a transição vidro de spin ocorre a temperaturas bem acima daquelas já reportadas. A susceptibilidade magnética χ DC de Cr e de Cr-1,3at Si dopados com Manganês mostra um pronunciado máximo a temperaturas entre 20 K e 40 K. O máximo em χ DC torna-se mais agudo na medida que o campo magnético decresce de 1000 Oe para 10 Oe com histerese a baixas temperaturas. Quando a amostra é resfriada de 300 K a 4,2 K, em campos relativamente altos (acima de 600 Oe), χ sobe até o valor máximo entre 20 e 30 K permanecendo constante na medida que a temperatura é abaixada. A matriz cromo é um típico antiferromagneto itinerante com onda de densidade de spin (SDW) incomensurável com a rede (2). A matriz de Cr1,3at Si também apresenta antiferromagnetismo itinerante, porém com SDW comensurável com a rede (2). Tipicamente, ambas matrizes mostram χ crescente com a temperatura na fase ordenada. Cabe ressaltar, no entanto, que nem mesmo a susceptibilidade magnética do cromo puro esta bem estabelecida. Algumas publicações(2) mostram χ decrescente para o cromo e para ligas de Cr-Si em temperaturas crescentes abaixo de aproximadamente 50 K. Os resultados aqui apresentados são os primeiros exemplos de vidros de spin em ligas de cromo, onde as evidências sugerem que quantidades tão pequenas quanto 0,1at Mn são suficientes para induzir o pico em χ típico de transições vidro de spin. (1) F. J. Lamelas et al. Phys. Rev B51 1995. (2) E. Fawcett et al. Rev. Mod. Phys. 66 (1994) 25.

CARACTERÍSTICAS MAGNETOELÁSTICAS DA LIGA DE Cr - 0,18at%Re INVESTIGADAS POR ULTRA-SOM.

S. FÁVARO
CEFET-PR.
P. G. IWANOWSKI, P. C. DE CAMARGO, V. YU. GALKIN
DF-UFPR

Em geral, ligas ricas em cromo apresentam transição de fase Paramagnética (PM)- Antiferromagnética (AFM). As consequências desta transição podem ser observadas nas constantes elásticas, na atenuação ultrasônica, na expansão térmica e em outras propriedades físicas destes materiais.[1]. Neste trabalho investigamos as constantes elásticas e a atenuação ultrasônica em um monocristal de Cr - 0,18at%Re cuja transição de fase ocorre em 316K. O cristal foi obtido por técnica de fusão zonal em forno a arco[2]. A partir do material policristalino foi separado o monocristal desta investigação, que tem faces paralelas as direções [100] e [110], com dimensões 9,2X7,6X5,4 em milímetros. O método de medida de velocidade foi o pulso-eco ultrasônico, onde aplicou-se pulsos de radiofrequência a um transdutor piezoelétrico de quartzo de 10MHz. Na geração e detecção de sinal utilizou-se um gerador Matec 6000 com "plug-in" 950, ligados a um osciloscópio digital Tektronix TDS320 com interface RS232, ligado a um microcomputador PC AT386. A partir dos pulsos de radiofrequência digitalizados, para cada temperatura de trabalho, determina-se a a velocidade do pulso ou a velocidade de fase pelo tempo de percurso de cada eco. Quando a atenuação não é muito grande e o meio não é dispersivo, fica fácil estabelecer a correspondência entre as fases em cada pulso, porém, próximo da transição de fase tanto a atenuação quanto a dispersão do meio são significativas e assim a indentificação da correspondência entre os máximos não é trivial. Discutimos assim a questão da pertinência em tomar-se a velocidade de fase, a velocidade de grupo ou a velocidade do sinal. A atenuação ultrasônica foi determinada por dois métodos distintos. No primeiro ajustou-se uma curva exponencial aos máximos dos pulsos retificados obtendo-se assim o coeficiente de atenuação. Este método torna-se difícil de aplicar a temperaturas próximas da transição de fase PM-AFM, onde além da grande atenuação os pulsos se deformam devido ao caráter dispersivo do meio. Nesta região não temos uma queda exponencial de atenuação e assim torna-se sem sentido o coeficiente da curva exponencial que seguiria os máximos de cada pulso. Para evitar tal dificuldade adotou-se como referencial de tempo os máximos dos pulsos retificados, porém a atenuação considerada foi aquela da perda de energia que é proporcional a área delimitada pelos pulsos. Os resultados obtidos indicam a ocorrência de um

pronunciado mínimo na constante elástica C_{11} e um correspondente pico na atenuação, na temperatura de transição PM-AFM. Estes resultados são semelhantes àqueles que se obtêm para um bom cristal de cromo puro. A transição ocorre essencialmente em um estreito intervalo de temperatura de aproximadamente 2K, diferentemente dos resultados obtidos por Alberts[2], onde as transições ocorrem em faixas de 50K., indicando a melhor qualidade cristalina desta amostra. Refer=88ncias. 1. Fawcett E., Alberts H.L., Galkin V.Yu., Noakes D.R. and Yakmi J.V. Rev. Modern Phys. 68, (1994) 25-127. 2. Alberts, H.L. Physica B 161 (1989) 87-90.

O MÉTODO DINÂMICO APLICADO AOS METAIS NA DETERMINAÇÃO DAS CURVAS DO COEFICIENTE DE EMISSÃO TOTAL(σ).

CARLOS ALBERTO FONZAR PINTÃO

Depto. de física- Fac. de Ciências- Unesp- Campus de Bauru.

BERNHARD GROSS

Instituto de Física e Química de São Carlos- USP- São Carlos, SP.

ROBERTO HESSEL

Instituto de Geociências e Ciências Exatas- Unesp- Rio Claro, SP.

Através de um arranjo e sistema de medidas adequados, utilizo um feixe de elétrons monoenergético($E_p = 0,2a10keV$) e incido sobre uma amostra metálica para determinar a curva do coeficiente de emissão total(σ) em função da energia. O metal em estudo é colocado sobre a superfície de um filme de polímero metalizado com alumínio em ambas as superfícies, sendo que a parte traseira é colocada em contato com o eletrodo porta-amostra. Este último elemento é polarizado através de uma fonte de tensão(0 a 3kV) desacoplada da rede e isolada. Ao fixar um valor de voltagem de polarização, estabeleço a energia efetiva inicial para o feixe incidente e determino a região da curva do coeficiente emissão total (σ) de interesse. O sistema permite registrar a evolução temporal do potencial de superfície (V_s) da amostra e da corrente medida (I_m) no eletrodo porta-amostra. Com as relações $\sigma(E_{ef}) = 1 - I_m/I_p$ e $E_{ef} = E_p + eV_s$, determino a curva $\sigma \times E$, dentro do intervalo de energia estudado. A corrente do feixe de elétrons(I_p) é mantida constante e da ordem de $10^{-9}A$, as medidas são realizadas em um vácuo da ordem de 10^{-7} Torr. Este método de medida foi aplicado aos polímeros por Gross e Hessel e puderam verificar que o processo de carregamento interfere nos valores de σ e depende da energia efetiva inicial com que o feixe incide. O mesmo método aplicado para os metais não apresentou este tipo de efeito, portanto isto o torna vantajoso quando aplicado a esta classe de materiais.

ESPECTROSCOPIA MECÂNICA EM MOLIBDÊNIO E TUNGSTÊNIO

MÁRCIO ROGÉRIO CAPELLI, CARLOS ROBERTO GRANDINI

UNESP - Bauru

ODILA FLORÊNCIO, HIROSHI TEJIMA

UFSCar

O comportamento de defeitos intersticiais em metais do grupo V, como nióbio, tântalo e vanádio, vem sendo bastante estudados por intermédio de Espectroscopia Mecânica (Atrito Interno) desde o final da década de 30. Porém, para metais do grupo VI, como molibdênio e tungstênio, este estudo não tem sido tão extensivo. Este trabalho mostra a Espectroscopia Mecânica em molibdênio e utilizando-se um Pêndulo de Torção, operando com frequência compreendida entre 1.0 e 5.0 Hz, num intervalo de temperatura entre 300 e 700 K. Os resultados revelam picos de relaxação nos espectros de atrito interno como função do inverso da temperatura que são atribuídos à presença de intersticiais pesados em solução sólida, dissolvidos intersticialmente na matriz metálica. (Apoio: CNPq e FUNDUNESP).

DINÂMICA DE REDE EM VIDROS

METÁLICOS $Mg_{70} Zn_{30}$

MADAN MOHAN SHUKLA

UNESP - Bauru

Há alguns anos atrás, Bhatia e Singh¹ propuseram um modelo para vidros metálicos considerando-os como um quase cristal. Eles consideraram a estrutura cristalina de vidros metálicos como fcc e utilizaram um modelo cristalino de metal com estrutura fcc, modificando a maneira como se calcula a interação de um átomo com seu primeiro vizinho. Para um cristal, considera-se a posição atual dos átomos e para vidros metálicos é suposto que todos os átomos primeiros vizinhos são encontrados numa superfície de raio igual à distância do primeiro vizinho. Bhatia e Singh calcularam a dinâmica de rede do vidro metálico $Ca_{70} Mg_{30}$. Shukla² fez uma modificação no modelo de Bhatia e Singh com extensão da interação de átomos para segundos vizinhos e aplicou este resultado para $Ca_{70} Mg_{30}$. Neste trabalho, nós usamos o esquema de Shukla para dinâmica de rede no vidro metálico $Mg_{70} Zn_{30}$ e verificamos com valores experimentais de fonons de ondas longitudinais³.

1. A. B. Bathia and R. N. Singh - Phys. Rev. B, 31, 4751 (1985). 2. M. M. Shukla - 45^a. Reunião Anual da SBPC, Recife, Resumo D-1.4, 1993. 3. J. B. Suck; H. Ruddin; H. J. Guntherodt and H. Beck - J. Phys. C, 13, L1045 (1980).

**SUPER-RESFRIAMENTO DA LIGA
Pd-Cu-Si PELA TÉCNICA DE
MINIMIZAÇÃO DE HETEROGENEIDADES
POR FLUXO**

MOISÉS MEZA PARIONA, ANGELO MERCADANTE
SANTINHO, EDSON ROBERTO D'ALMEIDA, CLAUDIO
S. KIMINAMI

*Departamento de Engenharia de Materiais, Universidade
Federal de São Carlos/SP*

Um alto grau de super-resfriamento do metal líquido pode levar, através de solidificação rápida, a formação de novas microestruturas incluindo fases metaestáveis e amorfa. Em metais ou ligas metálicas fundidas, o grau de super-resfriamento é normalmente pequeno devido à ocorrência de nucleação heterogênea que ocorre nas partículas não dissolvidas (impurezas) ou na parede do cadinho. Com a eliminação desses catalisadores para a nucleação heterogênea, um alto grau de super-resfriamento pode ser alcançado. A técnica de "Fusão em presença de fluxo" é uma das alternativas para minimização do caráter heterogêneo de nucleação através do uso de um fluxo. O fluxo fundido envolve o metal ou liga metálica com as funções de evitar o contato do metal fundido com a parede do cadinho e de ab-

sorver impurezas. Esta técnica tem ótimas perspectivas de aplicações tecnológicas e também científicas pela sua simplicidade, eficiência e a possibilidade de se obter grandes volumes de metal super-resfriado. Os principais parâmetros que afetam o grau de super-resfriamento com esta técnica são: taxa de resfriamento, característica do fluxo, temperatura de super-aquecimento, número de ciclos, fusão-solidificação e volume da amostra. O presente trabalho apresenta resultados obtidos na aplicação desta técnica na liga *P* da mostra foi monitorada através de um termopar tipo K e um sistema de aquisição de dados computacional e cadinho de quartzo. Em atmosfera inerte foram feitos ciclos de aquecimento-resfriamento até 1200 °C. Os valores de super-resfriamento atingidos nos últimos resfriamentos foram relacionados com as microestruturas metaestáveis obtidas.

*Multicamadas e Filmes Finos (MMM) -
08/06/95*

**STRUCTURAL AND MAGNETIC PROPERTIES OF SURFACE LAYERS, ULTRATHIN FILMS
AND MULTILAYERS BY MOSSBAUER SPECTROSCOPY**

W. KEUNE, R. A. BRAND, J. JUNGERMANN, S. NEUMANN, T. RUCKERT, A. SCHATZ, B. SCHOLZ, J.
TAPPERT, K. WILMERS

Laboratorium für Angewandte Physik, Gerhard Mercator Universität Duisburg, D-47048 Duisburg, Germany

F. RICHOMME

U.R.A. CNRS 808, Faculté des Sciences de Rouen, 76134 Mont-Saint-Aignan, France

P. VULLIET, J. -P. SANCHEZ

Centre d'Etudes Nucleaires de Grenoble, 38041 Grenoble, France

In recent years, the study of magnetic surfaces, thin films and multilayers has undergone a renaissance, partly due to the development of controlled growth and new characterization techniques, and even more so by the discovery of new properties and new metastable phases in the atomic-monolayer thickness range. When the samples contain Mössbauer resonance nuclei, Mössbauer spectroscopy is a powerful method to study local magnetism *and* structure on the *same* sample in zero and non-zero external fields, independent of the type of magnetic ordering (e.g. ferromagnetic or antiferromagnetic), and thus is sometimes superior to other magnetic techniques. Moreover, probe layers selectively enriched in Mössbauer nuclei may provide depth-selective information. The knowledge achieved by Mössbauer spectroscopy is demonstrated particularly for: (i) metastable fcc-like Fe(001) ultrathin films grown epitaxially in UHV on Cu(001) at 300 K, for which a thickness dependent transition from a high-moment ferromagnetic state (fcc-like structure, $c/a > 1$) to a low-moment antiferromagnetic isotropic fcc state was observed. (ii) Polycrystalline Tb/Fe and Dy/Fe multilayer samples. Under certain conditions the preferred ^{57}Fe -spin direction was found to be out-of-plane. Also ^{161}Dy -Mössbauer results are discussed.

Work supported by DFG (SFB 166) and DAAD.

**DOMAIN WALLS IN BILAYERS OF THIN
UNIAXIAL FERROMAGNETIC FILMS**

A. S. CARRIÇO

Departamento de Física/UFRN

R. L. STAMPS

*Department of Physics, Ohio State University, 174 West
18th Ave., Columbus, Ohio 43210-1106*

The effect of strong variation of interfilm coupling on the magnetic structure of ferromagnetic bilayers is studied. The bilayers consist of thin uniaxial ferromagnetic

films coupled through a nonmagnetic spacer. As appropriate to the thin film limit case the magnetization is supposed to be uniform in the direction perpendicular to the interfaces. A strong variation of the interfilm coupling (J) induces a nonuniform magnetization profile along one direction parallel to the interfaces. The system is modeled by two spin chains in which the spin directions are allowed to adapt to the variation of effective field imposed by the J discontinuity. The magnetic structure is obtained by solving Bloch's equations self-consistently. A discussion of selected features (wall pinning, stability, coercive field) is presented, for fields applied in arbitrary directions and for arbitrary values of the anisotropies of the ferromagnetic films. The implications of the results on present interpretations of experiments with wedge shaped samples are briefly discussed.

FERROMAGNETIC RESONANCE PROPERTIES OF Ni/Ag/Ni SANDWICHES

CARLOS CHESMAN, ANTONIO AZEVEDO, LUIS
GUSTAVO PEREIRA, SERGIO REZENDE
UFPE

The magnetic coupling between the two Ni layers in the Ni/Ag/Ni sandwich has been investigated by ferromagnetic resonance (FMR) techniques. Former [1] results had suggested that the Ni layers couple antiferromagnetically when the magnetic field is in the plane of the film and ferromagnetically when the field is perpendicular. The sandwiches have been sputtered on silicon substrate using Ag over- and underlayer and an Ag interlayer with the thickness ranging between 10 and 30 Å. When the Ni films have different thicknesses the acoustic and the optical mode can be excited. In this work we have measured the FMR spectra for variable frequencies for X- and K-bands. The results confirm that the coupling between the two magnetic layers changes from antiferromagnetic to ferromagnetic when the angle between the applied field and the plane of the film changes. Although the results are still preliminary we have found that for in-plane magnetic field the Ni layers coupling.

[1] S.M. Rezende et al, J. Appl. Phys. 73(10), 6341 (1993).

Estudo do comportamento Magnético do sistema $Fe/Cr/(Fe)Nd$

LUIS GUSTAVO PEREIRA, MARCIO CABRAL DE
MOURA, CARLOS CHESMAN FEITOSA, ANTÔNIO
AZEVEDO COSTA, SERGIO MACHADO REZENDE
Departamento de Física-UFPE
SERGIO RIBEIRO TEIXEIRA
Instituto de Física - UFRGS

Sistemas $Fe/Cr/Fe$ apresentam um comportamento oscilatório com relação ao acoplamento magnético entre

as camadas de Fe através da camada de Cr segundo a espessura desta camada. O sistema Fe/Nd tem como propriedade a indução dos momentos do Fe perpendicular ao plano da multicamada, segundo a espessura da camada de Nd . Neste trabalho estamos combinando estes dois sistemas com a intenção de observar o comportamento do acoplamento magnético quando os momentos estão alinhados numa mesma direção. Medidas de *magnetometria Kerr*, *efeito Mössbauer* e *FMR* servem como base experimental para determinar a direção dos momentos, assim como a possibilidade de acoplamento magnético entre as camadas de Fe .

Neste trabalho será apresentado uma discussão a respeito do comportamento magnético do sistema acima descrito para espessuras de Cr onde o acoplamento é antiferromagnético, assim como espessuras de Nd dentro da região na qual os momentos magnéticos do Fe são induzidos perpendicularmente ao plano das camadas.*

ESTUDO DE BICAMADAS FERRIMAGNÉTICAS MACROSCÓPICAS Y-Co/Gd-Co AMORFAS

TAEKO YONAMINE, ANTONIO DOMINGUES DOS
SANTOS

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo,
Brasil

Os sistemas estudados correspondem à bicamadas amorfas $YCo_2/GdCo_2$, os quais apresentam uma transição ferri-ferromagnética. Quando $H \geq H_t$ (campo de transição), temos uma parede de domínios na região da interface da bicamada. Essa parede é criada para minimizar a interação de troca entre átomos de cobalto. Os filmes analisados foram depositados por co-deposição, utilizando dois canhões de feixes de elétrons, e também por "sputtering". Em ambos os casos, o substrato foi resfriado à temperatura do N_2 líquido, para garantir o seu estado amorfo. A determinação de espessura e composição dos filmes foi feita através da análise dos espectros de RBS. A caracterização magneto-óptica foi feita utilizando-se um magnetômetro à efeito Kerr, que, além das curvas de histerese, fornece a medida de susceptibilidade transversal magneto-óptica (χ_t), através da qual podemos extrair o valor de campo de anisotropia de cada camada do filme. A caracterização magnética, no volume do filme, foi efetuada utilizando-se dois sistemas experimentais: um magnetômetro de amostra vibrante e um traçador de curvas de histerese. O modelo teórico para descrever a parede de domínios, que se forma em torno da interface da bicamada amorfa, foi baseado nas energias de troca, de anisotropia e magnetostática. Como resultado, obtivemos três equações interdependentes, relacionando espessura de parede (δ), posição relativa da parede (Δ) e constante de troca (A). Os valores calculados de δ , Δ e A serão apresentados. Trabalho parcialmente finan-

ciado por FAPESP, FINEP e CNPq.

**CARACTERÍSTICAS ESTRUTURAIS E
PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DE
FILMES FINOS de $\text{Co}_{1-x}\text{Cr}_x$**

MAURÍCIO M. WATANABE, IVETTE C. OPPENHEIM,
FRANK P. MISSELL, ROBERTO M. FERNANDEZ,
ELIANE F. CHINAGLIA
*Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo
- SP, Brasil*

Filmes finos magnéticos de $\text{Co}_{1-x}\text{Cr}_x$ tem aplicação como mídia de gravação magnética digital, usada, por exemplo, em discos rígidos. Neste trabalho, estudamos o campo coercivo longitudinal de filmes de $\text{Co}_{1-x}\text{Cr}_x$ como função da composição da liga e da temperatura do substrato durante o processamento dos filmes. Os filmes foram depositados por evaporação por canhão de elétrons, sobre substratos de Si, com uma estrutura de camadas do tipo $\text{Co}_{1-x}\text{Cr}_x / \text{Cr} / \text{C}$. As texturas cristalográficas das subcamadas de Cr, que influenciam a anisotropia magnética dos filmes de $\text{Co}_{1-x}\text{Cr}_x$, também foram correlacionadas com os campos coercivos. Os campos coercivos foram obtidos com Magnetometria de Amostra Vibrante e/ou Magnetometria de Efeito Kerr. As composições dos filmes foram determinadas através de Retroespalhamento de Rutherford (RBS) e Análise por Reação Nuclear e as texturas cristalográficas caracterizadas por Difração de Raios-X. Observamos que, tanto a textura {100} da subcamada de Cr (que favorece uma anisotropia magnética longitudinal nos filmes de $\text{Co}_{1-x}\text{Cr}_x$) como o isolamento magnético dos grãos de CoCr por contornos de grão ricos em Cr (mais pronunciado para altas temperaturas do substrato durante o processamento) tem papel

relevante para a maximização do campo coercivo.

**MAGNETOTRANSPORT PROPERTIES OF
SMALL MAGNETIC NANOSTRUCTURED
PARTICLES**

MARIO NORBERTO BAIBICH
Instituto de Física, UFRGS
R. D. SÁNCHEZ, M. LOPEZ-QUINTELA, J. RIVAS
Universidad de Santiago, Santiago de Compostela, España

The magnetic coupling and associated Giant Magneto Resistance effects have been observed in a number of systems, ranging from MBE grown superlattices to microcrystallized amorphous metals or chemically obtained powders. We report the giant magnetoresistance of small particles obtained by chemical precipitation method. The grains are about 5 nm large, and present a Co core covered by a relatively thick Ag layer. By simple pressure molding, a pellet can be made of the powder, thus allowing the measurement of the magnetoresistance. The value seen for room temperature, around 15%, is way beyond what is expected for Co/Ag multilayers with the equivalent Ag thickness. This striking result is interpreted with the help of a Landauer-like model for the conduction in composites, considering that transport in such samples occurs both parallel and perpendicular to the interacting "planes".

*Workshop: Magneto-Óptica (MMM) -
08/06/95*

MAGNETIZATION REVERSAL STUDIES IN ULTRA-THIN MAGNETIC FILMS

J. FERRE
Laboratoire de Physique des Solides, Université Paris-Sud, 91405 Orsay, France
A. KIRILYUK
Laboratoire de Physique des Solides, Université Paris-Sud
J. P. JAMET
Laboratoire de Physique des Solides, Université Paris-Sud, 91405 Orsay, France
D. RENARD
IOTA Bât. 503 - Université Paris-Sud, 91405 Orsay, France

It is fundamental to determine the mechanisms of the field induced magnetization reversal in ultrathin (few atomic layer thick) magnetic films. Investigations are limited here to films with perpendicular anisotropy where the role of the applied magnetic field is to switch the magnetization between the two stable saturated Ising states. Ultrathin cobalt metallic films, sandwiched between gold layers and grown by thermal evaporation in ultrahigh vacuum, are considered in this study. Their perpendicular magnetic anisotropy can be controlled and strongly enhanced when reducing the cobalt layer thickness t_{Co} down to 3 atomic layers (AL), as a result of the large surface anisotropy contribution. For this system the structure and morphology of the Co layer is not modified when increasing t_{Co} up to 10 AL and the Co/Au interface roughness conserved. We demonstrate that the magnetization reversal occurs through slow dynamics. By means of time resolved magneto-optical magnetometry and microscopy we show that it is governed by domain nucleation and wall motion [1]. The lateral dimension of the Barkhausen volumes involved

in domain nucleation and domain wall propagation processes was found to be of the order of 200 Å, a value which is close to that of the size of crystallites or atomically flat Co terraces [2]. The thickness dependence of the coercive field H_c at low temperature varies closely to $t_{Co}^{-5/2}$, a behaviour which is predicted if Co atomic steps limiting terraces act as energy barriers for domain wall propagation. These barriers result as local changes of the anisotropy. The relative domain nucleation and wall-motion contributions to magnetization reversal phenomena is discussed as a function of t_{Co} . Since domain nucleation and domain wall motion processes are thermally activated, magnetic aftereffects manifest themselves at high temperature dependence of H_c . We demonstrate that the thermal variation of H_c is strictly associated to two contributions: the variation of the anisotropy, determined independently from our magneto-optical anisotropy measurements [3], plus a term related to dynamics. A simple model, taking into account the nanocrystalline structure of our film, is able to explain consistently the variation of coercivity both as a function of anisotropy and temperature. Simulations on a patchy magnetic lattice with a distribution of local coercivities are able to interpret well the fractal character of the magnetic domain structure and its time evolution.

[1] J.Pommier, P.Meyer, G.Pénissard, J.Ferré, P.Bruno and D.Renard, Phys. Rev. Lett 65,2054 (1990)

[2] A.Kirilyuk, J.Ferré, J.Pommier and D.Renard, J.Magn. Mat. 121,536 (1993)

[3] V.Grolier, J.Ferré, A.Maziewski, E. Stefanowicz and D.Renard, J.Appl. Phys. 73,5939 (1993).

EFEITO KERR MAGNETO-ÓPTICO APLICADO À CARACTERIZAÇÃO DA MAGNETO-IMPEDÂNCIA GIGANTE EM FITAS AMORFAS

LUIZ GUILHERME C. MELO, ANTONIO DOMINGUES DOS SANTOS
Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo, S.P., Brasil

FERNANDO L. A. MACHADO, SERGIO REZENDE
Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco

YVES SOUCHE
Laboratoire de Magnétisme Louis Néel - CNRS, Grenoble, França

Recentemente alguns dos autores relataram resultados surpreendentes de magneto-impedância gigante (GMI) em fitas amorfas de $Co_{70.4}Fe_{4.6}Si_{15}B_{10}$, submetidas à tratamentos térmicos sob campo magnético transversal ao eixo da fita. Neste trabalho apresentaremos uma descrição do comportamento magnético deste tipo de material, onde as técnicas experimentais usadas baseiam-se nos efeitos Kerr magneto-ópticos transversal e longitudinal. Efeitos Kerr magneto-ópticos representam uma série de fenômenos onde perturbações no estado de polarização da luz refletida por uma amostra, podem ser correlacionadas à condição de magnetização da mesma. Usando-se microscopia óptica à efeito Kerr longitudinal determinamos o comportamento da estrutura de domínios em função da intensidade e frequência do campo magnético aplicado. Outra técnica utilizada foi a de magnetometria a efeito Kerr transversal e longitudinal, neste caso pudemos determinar a direção média da magnetização em função do campo magnético e estudar a correlação entre a susceptibilidade magneto-óptica transversal e os resultados experimentais de GMI. Um modelo teórico para GMI, evidenciado por estas observações, será apresentado. Trabalho parcialmente financiado por FAPESP, FINEP e CNPq/RHAE.

MAGNETISMO DE FILMES EPTAXIAIS DE Fe CFC SOBRE $Cu_{84}Al_{16}$ (100) INVESTIGADOS POR SPES

WALDEMAR AUGUSTO DE ALMEIDA MACEDO

Centro de desenvolvimento da Tecnologia Nuclear, Belo Horizonte

FAUSTO SIROTTI, GIORGIO ROSSI, GIANCARLO PANACCIONE

Laboratoire pour l'Utilisation du Rayonnement Electromagnetique, Orsay

AXEL SCHATZ, WERNER KEUNE

Universität Gerhard Mercator, Duisburg

WAGNER NUNES RODRIGUES

Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte

Filmes epitaxiais ultrafinos de Fe cfc (1-10 ML), crescidos pela primeira vez sobre $\text{Cu}_{84}\text{Al}_{16}(100)$ foram investigados utilizando fotoemissão com polarização em spin (SPES) e luz síncrotron linearmente polarizada, da linha de luz SU7 do anel Super-Aco / LURE. A caracterização do substrato e dos filmes cfc foi realizada por fotoemissão (Fe-3s, Fe-3p, Al-2p, Cu-2p, Cu-3d e bandas de valência) e o crescimento epitaxial controlado por LEED. Informações sobre as propriedades magnéticas dos filmes de Fe cfc foram obtidas in situ, em ultra-alto vácuo, pela medida da polarização em spin dos elétrons secundários, usando o Dicroísmo Magnético Linear na Distribuição Angular de Fotoelétrons (LMDAD). Para os filmes de Fe cfc crescidos a 150 K, a partir de 2,5 ML de espessura nossos resultados mostram ferromagnetismo com magnetização no plano, conforme obtido da assimetria LMDAD pico a pico apresentada pela linha 3p do Fe. O aquecimento de tais filmes ferromagnéticos at 330 K resulta na perda da magnetização no plano, sendo que um posterior resfriamento a 150 K resulta em uma assimetria LMDAD significativamente menor. Esta irreversibilidade da magnetização com o processo de recozimento sugere mudanças estruturais em tais filmes de Fe cfc durante o mesmo.

Metais e Materiais Magnéticos II (MMM) - 08/06/95

MARCUS VINÍCIUS TOVAR COSTA, ANTONIO TAVARES DA COSTA JR
UFF

Calor Específico de um Sistema de Dois Níveis Adsorvidos em um Metal

JOÃO VÍTOR BATISTA FERREIRA, VALTER LUÍS LIBERO

Instituto de Física de São Carlos - DFI - USP

Estamos estudando o tunelamento de um elétron entre dois níveis localizados em dois sítios distintos de um metal, considerando o acoplamento coulombiano com os elétrons de condução¹. Em particular, temos calculado a contribuição ao *calor específico*, que fornece informações sobre a renormalização da taxa de tunelamento eletrônico inter-sítio. Essa taxa poderá ser comparada com cálculos anteriores que utilizaram propriedades de fotoemissão². Utilizamos a técnica de *Grupo de Renormalização* (NRG) nesse problema de dois centros, nos moldes que foi utilizado para o problema Kondo de duas impurezas. O uso do método NRG tradicional resulta em oscilações nas curvas de calor específico, inerentes ao processo de discretização logarítmica da banda de condução. Para contornar este problema estamos utilizando a técnica de NRG com o recente método de intercalamento³ obtendo ótimos resultados. Esse método se baseia numa generalização da discretização logarítmica tradicional: em vez de usar apenas um parâmetro como originalmente proposto por Wilson, usa-se dois parâmetros. O controle dessas oscilações permite que se obtenha melhores resultados em temperaturas mais baixas.

(1) J. Kondo, *Physica* 84b,40 (1976).

(2) Valter L. Líbero e Luiz N. Oliveira, *Phys. Rev. Lett.*, 65, 2042 (1990).

(3) Wanda C. Oliveira e Luiz N. Oliveira, *Phys. Rev. B*, 11986 (1994).

Estabilidade Magnética de Sobrecamadas Metálicas

Atualmente é possível sintetizar e estudar sobrecamadas metálicas muito finas e de alta qualidade em diversos substratos. Dentre os vários aspectos interessantes desses sistemas podemos destacar a questão delicada da estabilidade magnética. O objetivo deste trabalho é estudar o comportamento da estabilidade magnética utilizando-se um modelo simplificado de estrutura eletrônica. Essa estrutura eletrônica é calculada, para sistemas de sobrecamadas metálicas em substratos magnéticos e não magnéticos, com base no modelo de ligações fortes multi-orbital, com parametrização de bandas canônicas. Os propagadores monoelétrônicos do sistema são obtidos exatamente através do método das camadas adicionadas. O estado fundamental Hartree-Fock é calculado de forma autoconsistente. Foram efetuados cálculos numéricos para sistemas compostos por Ag, Pd e Fe. Diversas orientações cristalinas da rede FCC foram analisadas. As densidades de estados para ambas as direções de spin (majoritária e minoritária) das sobrecamadas são apresentadas.

Difusão de Impurezas Próximo a Superfícies de Metais de Transição

MARCUS VINÍCIUS TOVAR COSTA, AUGUSTO CÉSAR DE CASTRO BARBOSA, JOSÉ D'ALBUQUERQUE E CASTRO
UFF

Sistemas de multicamadas metálicas e superfícies exibem propriedades magnéticas e eletrônicas que são de grande relevância do ponto de vista do desenvolvimento tecnológico. Os problemas de segregação e difusão em tais sistemas estão intimamente relacionados com suas propriedades físicas. Desta forma, torna-se muito importante o entendimento dos mecanismos que afetam o processo de difusão. Com base no modelo de ligações fortes multi-orbital, foi investigada a estrutura eletrônica de impurezas substitucionais próximo a superfícies metálicas. A variação da energia eletrônica

total é calculada para diferentes posições da impureza relativamente à superfície. Verificamos que esta oscila em função de sua distância à superfície, e que o período de oscilação mantém relação com a topologia da superfície de Fermi do substrato, da mesma forma que o acoplamento de troca em multicamadas. Diferentes substratos, impurezas e direções cristalinas são considerados. Para auxiliar a compreensão destas oscilações na variação da energia eletrônica foi feito o mesmo tipo de cálculo empregando-se um modelo simplificado de uma banda, utilizando a aproximação das fases estacionárias.

Dinâmica de Rede de $Li_{.75}Na_{.25}$: Cálculo de Dinâmica Molecular.

MOMOTARO IMAIZUMI

Depto de Física, Unesp-Bauru

FLÁVIO DJANIKIAN, BERNARDO LAKS

Instituto de Física, Unicamp-Campinas

O método da Dinâmica Molecular foi usado no cálculo do fator de estrutura dinâmico $S(\vec{Q}, \omega)$ da liga binária de $Li_{.75}Na_{.25}$ com 1024 partículas distribuídas numa rede bcc. Modelos de pseudo-potencial local foram usados para descrever as interações entre os átomos da liga e usou-se também as condições periódicas de contorno para aproximar o sistema ao material real. Fônons de vetores de ondas particulares \vec{Q} são identificados por picos em $S(\vec{Q}, \omega)$. Calculamos as relações de dispersões nas principais direções de simetrias e os resultados foram comparados aos obtidos por outros métodos clássicos de dinâmica de rede e aos resultados experimentais do lítio e sódio.

Dinâmica de Rede de $Cs_{.50}Na_{.50}$: Cálculo de Dinâmica Molecular.

FLÁVIO DJANIKIAN, BERNARDO LAKS

Instituto de Física, Unicamp-Campinas

MOMOTARO IMAIZUMI

Depto de Física, Unesp-Bauru

O método de Dinâmica Molecular foi usado no cálculo do fator estrutura dinâmico $S(\vec{Q}, \omega)$ de ligas binárias de $Cs_{.50}Na_{.50}$, com 1024 partículas distribuídas em rede bcc. O modelo de pseudo-potencial local de Harrison foi usado para descrever as interações entre os átomos das ligas e usou-se as condições periódicas de contorno para excluir os efeitos de superfície. Fônons de um vetor de onda particular \vec{Q} são identificados pelos picos em $S(\vec{Q}, \omega)$. Calculamos as relações de dispersão nas principais direções de simetria e os resultados obtidos são comparados aos obtidos do espalhamento inelástico de neutron.

CALOR ESPECÍFICO DO MODELO DE ANDERSON DE UMA IMPUREZA POR

GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO NUMÉRICO

SANDRA CRISTINA COSTA, VALTER LUIZ LÍBERO

Instituto de Física de São Carlos

Neste trabalho calculam-se o calor específico e a entropia do Modelo de Anderson Simétrico de uma impureza usando o Grupo de Renormalização Numérico (GRN). O método é baseado na discretização logarítmica da banda de condução do metal hospedeiro à qual a impureza está acoplada. Porém, esta discretização introduz oscilações nas propriedades termodinâmicas. Esta inconveniência, inerente ao método, é desprezível para a suscetibilidade magnética, mas é crítica para o calor específico, restringindo o alcance do GRN. Para sobrepor esta dificuldade é usado o novo procedimento denominado *intercalado* que foi desenvolvido para o cálculo da suscetibilidade magnética de modelos de duas impurezas. Para reduzir as matrizes e o tempo computacional, é usado, também, o operador carga axial recentemente definido no contexto do Modelo de Kondo de duas impurezas, e que é conservado pelo Hamiltoniano de Anderson Simétrico. As curvas obtidas são comparadas com resultados exatos obtidos por *ansatz* de Bethe e pelo Modelo de Nível Ressonante.

APROXIMAÇÕES COMPLETAS PARA A REDE DE ANDERSON: CASO RENORMALIZADO

MARCOS SERGIO FIGUEIRA DA SILVA

Universidade Federal Fluminense

MARIO EUSEBIO FOGLIO

Universidade Estadual de Campinas

A expansão diagramática em cumulantes, derivada em um trabalho anterior (cf.: Phys. Rev. B 50, 17933, (1994)) é aplicada ao modelo de Anderson periódico, no limite de repulsão infinita ($U \rightarrow \infty$), para uma banda de condução retangular. Estudamos uma nova classe de aproximação as funções de Green cumulantes: "Funções de Green Completas - FGC", XVII ENFMC (M. S. Figueira e M. E. Foglio, pg 219; cf.: M. S. Figueira, Tese de Doutorado, UNICAMP (1994)), a partir do qual calculamos números de ocupação que satisfazem automaticamente a completiza no espaço dos elétrons localizados. Nesse trabalho desenvolvemos uma versão renormalizada das FGC que considera um subconjunto de diagramas de cadeias e anéis renormalizados de qualquer tamanho com no máximo cumulantes de até 4^ª ordem. Ao mesmo tempo fizemos um estudo intensivo das aproximações Φ -deriváveis (cf. M. Wortis, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, edited by C. Domb and M. S. Green (Academic, London, 1974), Vol. 3, pag.113.), que também consideram o mesmo tipo de combinações de cadeias e anéis. Calculamos as FG de uma partícula correspondentes a esses dois métodos e a partir daí os números de ocupação para os elétrons de condução e localizados. Apresentamos

uma discussão crítica dos resultados das aproximações completas e Φ -deriváveis.

MAGNETIC PHASES OF BIQUADRATIC COUPLED MULTILAYERS

C. G. BEZERRA, A. S. CARRIÇO

Departamento de Física/UFRN, Campus Universitário, 59072-970 - Natal/RN

For selected values of the spacer thickness the bilinear interfilm coupling in ferromagnetic multilayers can be very small. In this case the dominant coupling is biquadratic and tends to align successive films perpendicularly. We present a study of the magnetic phases of multilayers in this limit. For an infinite multilayer there are a few magnetic structures compatible with the simultaneous effect of the cubic anisotropy, which tends to keep the moments in each film parallel to one of the easy axis, and the biquadratic coupling. For finite multilayers the lower coordination at the surfaces may produce new phases, which result from the competing effects of the Zeeman energy, exchange and anisotropy. The model is based on the assumption that spins within a ferromagnetic film are held parallel to each other by the strong ferromagnetic exchange. The magnetizations of the ferromagnetic films are allowed to adapt to the proximity of surfaces and to the biquadratic coupling between films. The numerical algorithm consists in solving Bloch's equations self-consistently for a finite number of spins. Applied fields of arbitrary orientation with respect to the easy axis are considered. Anomalous hysteresis curves are obtained for strong values of the biquadratic coupling.

Fluxo de Energia em Cilindros Magnéticos Anisótropicos

ELONEID FELIPE NOBRE, GIL DE AQUINO FARIAS
UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ

Neste trabalho consideramos a propagação de polaritons em sistemas cilíndricos. Atenção particular é dada ao caso da propagação dos polaritons superficiais, isto é, aqueles que se propagam junto à interface do cilindro. O sistema em estudo é um longo cilindro condutor de raio a , caracterizado por uma permeabilidade magnética dependente da frequência envolto por um meio infinito, isotrópico e não magnético. O sistema apresenta anisotropia uniaxial, sendo caracterizado pelo tensor permeabilidade magnética representado por uma matriz diagonal cujos elementos não nulos são dependentes da frequência. Utilizando esse mesmo sistema, calculamos a relação de dispersão tanto para os modos confinados no volume, quanto para aqueles que se propagam na interface. Para calcular o fluxo de energia determinamos o vetor de Poynting, calculando a média temporal da densidade do fluxo de potência instantânea. Para isso determinamos os campos eletro-

magnéticos utilizando as equações de Maxwell em coordenadas cilíndricas. Calculamos também a densidade de energia, bem como a velocidade da energia que é igual à velocidade de grupo que pode ser calculada da relação de dispersão. Aplicações numéricas são feitas para o Fluoreto de Manganês, que é um antiferromagneto uniaxial de Heisenberg descrito pelo modelo de duas sub-redes. Os casos limites, quando comparamos com um cilindro isotrópico, mostram total concordância com os resultados. Fazemos também aplicação para o caso em que o raio do cilindro tende para o infinito obtendo o resultado de uma superfície plana.

TENDÊNCIAS DE ESTABILIDADE ESTRUTURAL ENTRE ELEMENTOS COM LIGAÇÃO DO TIPO SP

JOSÉ CARLOS CRESSONI

Universidade Federal de Alagoas - UFAL

Um modelo simples do tipo tight-binding com interações entre primeiros vizinhos é utilizado para explicar as tendências de estabilidade estrutural observadas entre os elementos com ligações do tipo sp. As energias de bandas, E_{band} , são comparadas diretamente usando o teorema de diferença de energia entre estruturas, o que permite preparar os comprimentos de ligação apropriadamente. Os cálculos são efetuados no espaço real através do uso do método de recorrência com um terminador para as frações contínuas otimizado para reproduzir corretamente os momentos das densidades de estado, dos . As energias $E_{band}(N)$ são calculadas em função do número de elétrons, (N), na banda e relativamente a uma densidade de estados trapezoidal determinada através dos três primeiros momentos da dos da estrutura cúbica simples. O modelo reproduz qualitativamente as tendências observadas experimentalmente e é capaz de separar corretamente estruturas tão diferentes quanto dimers, cadeias lineares (grafite) e compactas tipo fcc e hcp. O método, além de simples, possui a vantagem adicional de permitir uma interpretação direta dos resultados em termos dos momentos da densidade de estados.

Dynamical Localization in Quasicrystals. The Interplay Between Disorder and Electric Field.

HUGO NICOLAS NAZARENO

CIFMC - UnB

C. ALESSANDRO . A. DA SILVA, PAULO E. DE BRITO
CIFMC - Departamento de Física - UnB

In this work we focus on the influence of disorder and applied electric field on the propagation of carriers in quasicrystals with emphasis on Fibonacci, Thue-Morse and Harper lattices. We have introduced a numerical procedure to solve the time dependent Schrodinger equation for a given initial condition, which allows us to obtain the time dependence of the propagators. It is

well known that the effect of the field on a perfect crystal is to produce oscillations of the carriers, they are the so called Bloch oscillations, named after the pionnering work of Bloch in the early days of Quantum Mechanics. That is, in a system without disorder the field produces a dynamical localization of the wave packet. As for the Harper model in which the on-site energies follow a periodic law whose period is incommensurate with that of the underlying lattice, there is a critical value of the disorder potential above which all states are localized. On the other hand, for smaller values of the disorder potential all states are delocalized. When we apply the field we get a localization of the wave packet, i.e. the mean-square displacement (MSD) is bound at all time and for any degree of disorder. For the Fibonacci and Thue-Morse lattices we have found that in the field-free case, a particle initially localized in a well propagates in a superdiffusive way in both lattices. When the field is applied, propagation is severely suppressed, the more so the more intense the field is. The main conclusion that can be drawn for the studied cases is that as far as producing dynamical localization the electric field is more effective than disorder is. Finally, a common feature from all cases treated in this work is the appearance of resonances when certain conditions are accomplished that result in a strong oscillation of the wave packet of a characteristic (universal) period $T = 2(\pi)\hbar/2V$ where V is the hopping potential. For superlattices this would result in the emission of electromagnetic radiation in the terahertz range.

DEPENDÊNCIA COM A DOPAGEM DA ESTRUTURA ELETRÔNICA DO MODELO DE HUBBARD EM 1 E 2 DIMENSÕES

BEN HUR BERNHARD

Udesc

O modelo de Hubbard é estudado na cadeia linear e na rede quadrada através de uma expansão dimérica [Phys. Rev. B **47**, 12408 (1993)]. Utiliza-se um método de interpolação recentemente introduzido [Phys. Rev. B **50**, 9522 (1994)], que apresenta similaridades com a aproximação CPA, para investigar a variação gradual do espectro de uma partícula com a dopagem. É feita uma comparação com os resultados da expansão atômica (Hubbard I) e com os resultados exatos de 1 dimensão. O rearranjo da estrutura eletrônica com a dopagem, a partir de uma banda semi-preenchida, implica numa redefinição do gap de Hubbard. Obtém-se a curva do potencial químico em função da concentração eletrônica. Discute-se a aplicabilidade do modelo na descrição dos estados de gap dos óxidos supercondutores.

Determinação Simultânea da Suscetibilidade e da Resistividade em Amostras Metálicas

CLAUDIA CRISTINA DE FÁRIA, WILSON AIRES ORTIZ

UFSCar - Depto. de Física, C.P. 676, 13565-905, São Carlos

Neste trabalho obtivemos a partir das equações de Maxwell e da lei de Ohm as expressões para as componentes em fase e em quadratura da tensão de saída de um transformador duplo balanceado de simetria cilíndrica, empregado usualmente em suscetômetros AC típicos. Para o caso em que o núcleo deste transformador é uma amostra cilíndrica longa, submetida à campos de excitação de baixas frequências, aquelas componentes são expressas como:

$$V_R = -NH_a\omega\mu_o\pi a^2 \left[\chi'' + \frac{(1+\chi')^2 - \chi''^2}{8} \mu_o\omega\sigma a^2 \right] \left[1 - \exp\left(-\frac{\ell}{2\Delta}\right) \right] \quad (1)$$

$$V_L = NH_a\omega\mu_o\pi a^2 \left[\chi' - \frac{(1+\chi')\chi''}{4} \mu_o\omega\sigma a^2 \right] \left[1 - \exp\left(-\frac{\ell}{2\Delta}\right) \right] \quad (2)$$

onde o fator $\left[1 - \exp\left(-\frac{\ell}{2\Delta}\right) \right]$ representa a dependência com o comprimento ℓ da amostra, e Δ é a profundidade de penetração efetiva do material. O estudo da tensão de saída em função da condutividade, realizado para amostras de cobre comercial de vários raios, demonstra a validade das expressões.

Aplicação do Método da Máxima Entropia para a Obtenção da Densidade de Estados

LUIS CRACO, MIGUEL A. C. GUSMÃO

UFRGS

A continuação analítica mais comumente utilizada para se obter a função de Green retardada a partir da função de Green de Matsubara é dada pela substituição direta $i\omega_n \rightarrow \omega + i0^+$. Para determinadas aproximações perturbativas esta continuação analítica pode levar ao conhecido problema da violação da regra de soma da densidade de estados e, conseqüentemente, inviabilizar o estudo das propriedades estáticas da referida aproximação. Como a substituição direta $i\omega_n \rightarrow \omega + i0^+$ não é a única continuação analítica possível, uma vez que em princípio existem várias possibilidades (caminhos) de se prolongar analiticamente uma função definida sobre o eixo imaginário para o eixo real, e como diferentes caminhos podem levar a resultados diferentes, deve-se encontrar o caminho adequado a cada aproximação. Até o presente momento não se conhece um método sistemático que efetue tal operação. Uma opção alternativa é a de obter a densidade de estados diretamente a partir da função de Green de Matsubara. O problema aqui consiste em calcular a transformada de Hilbert inversa, ou seja, obter a densidade de estados que melhor

reproduza a função de Green de Matsubara. Um dos métodos utilizados para este fim é o método da Máxima Entropia. Aplicamos esse método em específico para o cálculo da densidade de estados do modelo de Hubbard, quando da inclusão da correção de *one-loop* na aproximação de cadeia (Hubbard I), num tratamento perturbativo em torno do limite atômico. Conseguimos obter uma densidade de estados cuja transformada de Hilbert apresenta uma boa concordância com a função de Green de Matsubara calculada, além de verificar corretamente a regra de soma. Na aproximação considerada, essa densidade de estados mostra a existência de uma transição metal-isolante, na situação de banda semi-preenchida, para valores suficientemente grandes da interação Coulombiana.

MODELO DE HUBBARD ESTENDIDO COM ACOPLAMENTO ENTRE PLANOS

ANDERSON BEATRICI, MIGUEL A. C. GUSMÃO
UFRGS

O modelo de Hubbard estendido descreve de uma forma simples as principais interações eletrônicas existentes nas redes de cobre-oxigênio (CuO_2) dos supercondutores de alta T_c . Utilizando teoria de perturbação em torno do limite atômico, densidades de estados de uma partícula são obtidas dentro da aproximação que considera apenas diagramas do tipo "cadeia" para as funções de Green totais, utilizando ainda uma autoconsistência tipo Hubbard I. Em nossa abordagem, além dos termos usuais de corralação local e "hopping" entre sítios de cobre e oxigênio, incluímos um termo de "hopping" entre planos, passando assim a descrever uma rede tridimensional formada por camadas de redes CuO_2 . Este "acoplamento" entre planos é estudado de três diferentes formas; na primeira os planos se ligam por um termo de "hopping" entre os sítios de cobre, na segunda por "hopping" entre os oxigênios, e na terceira os planos são unidos por oxigênios situados entre cobres de planos distintos formando uma rede CuO_3 . Nossos resultados nesta mesma abordagem, mas para as redes de cobre-oxigênio sem o acoplamento, mostram que a região de estabilidade do estado isolante antiferromagnético reside ao redor do preenchimento estequiométrico de lacunas, e o momento magnético local é compatível com resultados experimentais. Neste trabalho avaliamos o efeito de cada acoplamento sobre a região da transição metal paramagnético-isolante antiferromagnético verificando qual rede tridimensional efetiva descreve esta transição nos moldes em que a mesma ocorre nos supercondutores de alta T_c .

EFEITO DO CAMPO MAGNÉTICO NA LOCALIZAÇÃO DOS ESTADOS ELETRÔNICOS EM SISTEMAS DESORDENADOS

QUASI-UNIDIMENSIONAIS

DENISE FERNANDES DE MELLO
Depto. de Física - Fac. de Ciências - Unesp - Campus de
Bauru
GUILLERMO G. CABRERA
IFGW - Unicamp

No presente trabalho discutimos como a presença do campo magnético afeta a localização dos estados eletrônicos em sistemas desordenados quasi-unidimensionais. Usamos um hamiltoniano tipo Tight-Binding, com interação entre primeiros vizinhos e desordem apenas diagonal. O efeito do campo magnético é incluído através de uma fase no termo de "hopping". Dentro da idéia de Finite-Size-Scaling, o sistema é tratado como uma barra de secção reta finita e comprimento essencialmente infinito. A direção do campo magnético aplicado é perpendicular a secção reta. A quantidade física calculada é a Densidade de Estados Eletrônicos (DOS), e o método empregado é uma extensão do método por nós desenvolvido anteriormente para o caso de uma faixa (Caxambú 94), onde a DOS da barra é obtida em função da DOS de cadeias lineares. Efeitos de tamanho e efeitos de ordem de curto alcance (SRO) são também discutidos.

DINÂMICA MOLECULAR PARA MICRO-CUSTERS DE Pd: ESTUDO DA ABSORÇÃO DE HIDROGENIO

E. Z. DA SILVA, A. ANTONELLI
Instituto de Física "Gleb Wataghin", UNICAMP

Usamos dinâmica molecular com um potencial de muitos corpos apropriado para Pd, para estudar a formação e estabilidade de custer de Pd. Estudamos também a capacidade de absorção de H por estes clusters. Mostramos que é possível armazenar mais H por átomo de Pd que no caso do Pd sólido.

EIGENVALUES OF THE CRYSTAL FIELD HAMILTONIAN FOR RARE-EARTH IONS IN HEXAGONAL SYMMETRY VIA COMPUTER ALGEBRA: MAGNETIC APPLICATIONS.

R. R. SOBRAL¹, A. P. GUIMARÃES, X. A. DA SILVA
CBPF

Crystal Field theory has become a standard tool for calculating thermal, spectroscopic and magnetic properties of solids containing transition ions. Using computer algebra, we have obtained Crystal Field eigenvalues for rare-earth ions of $J=4, 6, 8, 5/2, 7/2, 9/2$ and $15/2$ in hexagonal symmetry. We have also solved the Hamiltonian for the case of a crystal field combined with an effective magnetic field applied in the directions $(0,0,1)$ and $(1,0,0)$ for different values of J . For the cases $J=4$ and $J=9/2$ we have obtained, also using computer

methods, analytical expressions for the high temperature magnetic susceptibility, which depends only on the exchange parameter and on the B_2^0 parameter of the Crystal Field hamiltonian, which is expressed in terms of the Stevens operators. The eigenvalues of \mathcal{H}_{CF} are the roots of the polynomial equation in the variable y :

$$\det | \langle n, J | \mathcal{H}_{CF} - y\delta_{n,m} | J, m \rangle = 0 \quad (3)$$

These roots are obtained explicitly for the different values of J . Substituting $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{CF} + \mathcal{H}_{mag}$, where $\mathcal{H}_{mag} = -g\mu_B \mathbf{h} \cdot \mathbf{J}$, for \mathcal{H}_{CF} , we may factorize the new polynomial equation in simple factors; these are classified and listed for different J 's. These simple polynomials are then used to obtain the high temperature magnetic susceptibilities (in the cases $J=4$ and $J=9/2$) in two directions $((0,0,1)$ and $(1,0,0))$. ¹CNPq post-doctoral fellow.

Metal-insulator transitions and dilute electron and hole doping in the extended Hubbard (d-p) model

H. KAGA, T. SAIKAWA

Department of Physics, Niigata - Japan

ALVARO FERRAZ

CIFMC - UnB

PAULO E. DE BRITO

CIFMC - Departamento de Física - UnB

Metal-insulator transitions in the three-band extended Hubbard model are studied within the mean-field theory of the Kotliar-Ruckenstein slave-boson formalism. It is shown that the charge-transfer (CT) insulator transition ($\Delta \ll U$) takes when twice the CT-energy loss 2Δ exceeds eight times the average kinetic-energy gain per site E , contrary to the Mott-Hubbard (MH) transition ($U \ll \Delta$) which occurs when the Coulomb-energy loss U exceeds E . The positions of the renormalized d levels of quasiparticles formed on dilute doping are analyzed. A dilute hole doping into the insulator phase gives rise to several qualitatively different doping regimes, e.g., those with d -hole or d -electron doping determined by some simple rules, in which dilute hole doping just inside the boundary always induces d electron doping. We will show that the dilutely hole-doped phase diagram is remarkably symmetric with respect to U and Δ , i.e., the MH and CT insulators. The optical conductivity gap E_{gap} of the MH and CT insulators is interpreted as a jump in the chemical potential $\Delta\mu$ between dilute electron and hole doping, and is strongly renormalized from the bare Hubbard gap U or CT gap Δ near the metal-insulator boundary, while it is roughly fixed by the bare gap well inside the insulator phase.

IMPUREZA SUBSTITUCIONAL DE Fe EM Zr bcc; UMA AVALIAÇÃO DA UTILIZAÇÃO DE SUPERCELAS NO TRATAMENTO DE DEFEITO ISOLADO

SERGIO BENITES LEGOAS, SONIA FROTA-PESSÔA
IFUSP-Instituto de Física da USP

A aplicação de métodos tradicionais para o cálculo de estrutura eletrônica e outras grandezas na vizinhança de impurezas e outros defeitos isolados é dificultada pela ausência de periodicidade. Assim, frequentemente supercelas, que procuram preservar a periodicidade, são usadas para investigar esses sistemas. No entanto, a repetição periódica do defeito em todo o espaço pode influenciar os resultados de forma difícil de ser avaliada. Neste trabalho investigamos as propriedades locais na região de uma impureza substitucional de Fe em Zr na estrutura bcc. Para isso utilizamos o RS-LMTO-ASA, método de primeiros princípios, dentro do formalismo de funcional densidade local, que pode ser usado tanto para sistemas periódicos [1] como na ausência de periodicidade [2]. Efetuamos o cálculo de duas maneiras; primeiramente para a impureza substitucional de Fe no Zr bcc e a seguir utilizando a cela de 8 átomos Zr_7Fe , usada recentemente na literatura para simular a impureza [3]. Uma comparação entre resultados obtidos utilizando o mesmo formalismo nas duas situações permite uma avaliação esclarecedora da eficiência e das limitações do uso da supercela para simular um defeito isolado.

[1] P. R. Peduto and S. Frota-Pessôa, Phys. Rev. B **44**, 13283 (1991).

[2] S. Frota-Pessôa, Phys. Rev. B **46**, 14570 (1992).

[3] T. Beuerle, K. Hummler, C. Elsässer and M. Fähnle, Phys. Rev. B **49**, 8802 (1994).

USO DO MODELO DE SCHWARTZ-ASANO PARA CÁLCULO DE CAMPOS HIPERFINOS EM LIGAS FERROMAGNÉTICAS CONTENDO IMPUREZAS NÃO MAGNÉTICAS

MARIA DE FÁTIMA SATUF REZENDE, FLÁVIO ALVARENGA FRANÇA, ABA ISRAEL COHEN
PERSIANO

Universidade Federal de Minas Gerais

A presença de impurezas não magnéticas em ocupação substitucional em uma liga magneticamente ordenada produz reduções da saturação magnética do material com resultados negativos sobre o campo hiperfino. Neste trabalho estudamos os efeitos causados por impurezas vanádio em ligas FeCo ordenadas (superestrutura B2) e desordenadas (bcc) aplicando o modelo estatístico de Schwartz-Asano para cálculo da superposição de lorentzianas. Os parâmetros considerados envolvem a concentração da impureza bem como diferentes reduções do campo hiperfino e índices de preferência de ocupação da mesma nas duas primeiras esferas de coordenação do átomo Fe. Os resultados são comparados com dados experimentais obtidos por espectroscopia Mössbauer de ligas FeCoV ordenadas e

desordenadas, analisados por distribuição de campos hiperfinos, produzindo boas concordâncias. A aplicação do método a ligas com dissoluções parciais de vanádio permitiu-nos determinar os limites de solubilidade da impureza com precisão melhor que 0,5%.

CÁLCULOS EM AGLOMERADOS MOLECULARES SIMULANDO LIGAS

$$\gamma' - Fe_{4-x}Mn_xN.$$

JOÃO CARLOS KRAUSE, CLEDERSON PADUANI
UFSC

Investigamos as propriedades magnéticas locais de ligas $\gamma' - Fe_{4-x}Mn_xN$ com o método variacional discreto (DVM). O átomo Mn entra preferencialmente no sítio FeI de acordo com resultados experimentais. Calculamos o campo magnético hiperfino (HF), o desvio isomérico (IS) para o átomo de ferro no centro do aglomerado substituindo os átomos dos sítios FeI primeiros vizinhos por átomos Mn e apresentamos estes resultados em função da concentração de Mn.

ANISOTROPIA DO FATOR g E DA INTERAÇÃO DE TROCA EM INTERMETÁLICOS DE TERRAS RARAS: APLICAÇÃO PARA $ErNi_5$

P. J. VON RANKE, A. CALDAS, N. A. DE OLIVEIRA
Universidade do Estado do Rio de Janeiro
L. PALERMO
Universidade Federal Fluminense

Neste trabalho é utilizado um modelo simples para estudar o efeito do campo cristalino sobre a anisotropia do fator g e da interação de troca no ion Er^{+3} no intermetálico $ErNi_5$. Na formulação do problema foram feitas as seguintes aproximações: o Hamiltoniano associado ao Campo cristalino foi representado na forma matricial, considerando somente os dois primeiros níveis de energia do multipletto fundamental; e a interação de troca foi tratada na aproximação de campo molecular. A grande vantagem em se fazer estas aproximações consiste na obtenção de expressões analíticas para a magnetização e susceptibilidade magnética. Utilizando dados experimentais da susceptibilidade magnética vs temperatura, é possível determinar valores para o fator g e para o parâmetro de interação de troca J_0 no ion Er^{+3} no intermetálico $ErNi_5$ nas direções "a" e "c" da estrutura cristalina hexagonal. Os resultados obtidos permitem fazer uma análise da direção de fácil magnetização e do efeito de quenching no momento angular.

EFEITO DO CAMPO CRISTALINO E DA INTERAÇÃO DE TROCA NA RESISTIVIDADE: ELÉTRICA: UM MODELO SIMPLES

A. CALDAS, N. A. DE OLIVEIRA, P. J. VON RANKE

Universidade do Estado do Rio de Janeiro

L. PALERMO

Universidade Federal Fluminense

Neste trabalho são estudados os efeitos do campo cristalino com simetria axial sobre a resistividade elétrica de um sistema de ions magnéticos, com momento angular total $J=1$. Utiliza-se um modelo no qual os ions, além da interação com o campo cristalino, interagem entre si via uma interação de troca direta. É considerada também a interação com um campo magnético externo aplicado nas direções $\langle 100 \rangle$ e $\langle 001 \rangle$. Devido a simplicidade deste modelo, obtém-se os autovetores e autovalores de energia através da diagonalização completa da matriz Hamiltoniana que descreve o sistema. A partir do conhecimento deste autovalores, e autovetores, obtém-se expressões analíticas para a magnetização e contribuição magnética para a resistividade elétrica ao longo das direções $\langle 100 \rangle$ e $\langle 001 \rangle$. Utilizando estas expressões é feito um estudo sistemático onde é avaliado o efeito do campo cristalino e da interação de troca sobre estas grandezas magnéticas ao longo de cada direção.

EFEITO DA INTERAÇÃO QUADROPOLAR NO SISTEMA $PrMg_2$

N. A. DE OLIVEIRA, A. CALDAS
Universidade do Estado do Rio de Janeiro
L. PALERMO
Universidade Federal Fluminense
P. J. VON RANKE
Universidade do Estado do Rio de Janeiro

Neste trabalho analisamos o efeito da interação quadropolar na magnetização espontânea do intermetálico $PrMg_2$. Este estudo é feito, utilizando um Hamiltoniano que incorpora além dos termos do campo cristalino e da interação de troca, o efeito da interação quadropolar. O Hamiltoniano do campo cristalino foi tratado dentro um modelo reduzido, considerando somente os dois níveis de energia mais baixos do multipletto do estado fundamental, que para o ion Pr^{+3} no intermetálico $PrMg_2$ são respectivamente dubleto e tripleto. Utilizando este modelo, obtém-se um par de equações que acopla a magnetização com a interação quadropolar. Este sistema de equações é resolvido autoconsistentemente na fase ferromagnética para um dado conjunto de parâmetros do modelo. Os resultados obtidos mostram a relevância da interação quadropolar, no ajuste dos dados experimentais da magnetização espontânea vs temperatura para este intermetálico.

ESTRUTURA ELETRÔNICA DE IMPUREZAS SUBSTITUCIONAIS 3d NO

$$\gamma' - Fe_4N.$$

JOÃO CARLOS KRAUSE, CLEDERSON PADUANI
UFSC

O método variacional discreto de primeiros princípios na aproximação de carga auto-consistente (DVM-SCC) é usado para investigar a estrutura eletrônica de impurezas localizadas 3d (Sc, Ti, V, Cr, Mn, Co, Ni, Cu e Zn) no composto ferromagnético γ' -Fe₄N. Obtivemos dos cálculos o campo magnético hiperfino (HF), o momento magnético, a densidade local de estados (DOS) e a transferência de carga para o átomo central do aglomerado embebido no potencial do cristal. O átomo Mn apresentou o maior valor para HF (-535 kG) no sítio FeII, enquanto o maior momento magnético obtido foi também para o átomo Mn (-3.38 μ_B) no sítio FeI.

IMPUREZAS MAGNÉTICAS 3d NA MATRIZ DO Fe HCP.

FERNANDO FRANÇA, CLEDERSON PADUANI
UFSC

Realizamos cálculos de primeiros princípios com o método variacional discreto com polarização de spin para investigar a estrutura eletrônica de átomos 3d na matriz do Fe HCP. Escolhemos para os átomos de impurezas os elementos de transição Sc, Ti, V, Cr, Mn, Co, Ni, Cu e Zn. Obtivemos a densidade parcial de estados, o momento magnético, o campo magnético hiperfino e a ionização para cada átomo. Nossos resultados indicaram que a impureza Mn tem maior momento magnético e o maior campo magnético hiperfino nesta matriz, i. é, 0,31 μ_B e -91 kG, respectivamente, enquanto o átomo de Sc exibe a maior ionização.

UM MODELO COMPLETO E CONSISTENTE PARA DINÂMICA DE REDE EM METAIS CÚBICOS

CARLOS ROBERTO GRANDINI, MADAN MOHAN
SHUKLA
UNESP - Bauru

Há quase quarenta anos, dois modelos fenomenológicos de cristais foram propostos por Bhatia¹ e de Launey². Eles mostraram um resultado importante, que as constantes elásticas C_{12} e C_{44} tornam-se diferentes quando se usa o modelo de gás de elétrons. Também é conhecido que a força angular tem o mesmo efeito. Vários autores ou usam o gás de elétrons ou somente usam a força angular para um modelo de metal. Recentemente, Wallis et al³ mostraram num cálculo de fonons em alumínio que o uso do gás de elétrons, força angular e também a condição de equilíbrio do cristal são importantes para um modelo consistente. Nós propomos um modelo onde consideramos todos os efeitos juntos e calculamos a curva de dispersão de fonons em lantânium e β -scandium, ambos de estrutura bcc, em todas as direções de simetria. Os resultados teóricos concordam bem com os dados experimentais. (Apoio: CNPq e FUNDUNESP).

1. A. B. Bhatia - Phys. Rev., 97, 363 (1955). 2. J. de Launey - Sol. St. Phys., 2, 219 (1956). 3. D. C. Wallis; A. A. Maradudin; V. Bortolani; A. A. Equiluz; A. A. Quong; A. Franchini and G. Santoro - Phys. Rev. B, 48, 6043 (1993).

EXCITONIC PHASE TRANSITION IN CORRELATED ELECTRONIC SYSTEMS

MUCIO AMADO CONTINENTINO

UFF

GLORIA MIGUEL JAPIASSÚ

UFRJ

AMÓS TROPER

CBPF

The existence of a phase transition to an excitonic state has been predicted theoretically many years ago^a. Efforts to observe this transition were concentrated on semi-metals under the effect of external pressure. These experiments could not confirm the theoretical predictions. Recently Wachter and Jung^b have claimed to observe a transition to an excitonic insulator in a doped narrow-band-gap semiconductor at moderate pressures. We have studied the possibility of an excitonic transition in the presence of hybridization in a two-band model with a correlated electronic band. We show that a true phase transition never occurs 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 study the dependence of the zero temperature order parameter on different parameters characterizing the system as: i) the relation between the effective masses of the two-bands, ii) the strength of the hybridization and iii) the intensity of the electron-hole attraction.

^aB.I.Halperin and T.M.Rice, Rev. Mod. Phys. 40, 755 (1968).

^bP.Wachter and A.Jung, IEEE Transactions on Magnetics 30, 954 (1994).

CORRELAÇÕES DE CARGA E SPIN NO GÁS DE ELÉTRONS INTERAGENTES EM DENSIDADES METÁLICAS

JENER JUSCELINO DA SILVA BRITO

UnB

Neste trabalho apresenta-se um cálculo a seis parâmetros das correções de campo local de spins paralelos e antiparalelos para a função dielétrica e a susceptibilidade magnética do gás de elétrons interagentes. Nossas correções são obtidas numericamente impondo, simultaneamente, todas as propriedades exatas atualmente conhecidas: a regra de soma da compressibilidade, a condição de cuspide de Kato-McWeeny-Kimball para a correlação de spins antiparalelos, o princípio de exclusão de Pauli, as condições de Rajagopal-Kimball-Banerjee para

a inclinação, curvatura e terceira derivada da função de correlação de spins paralelos, e a regra de soma da susceptibilidade magnética estática. Mostramos que uma correção de campo compatível com todas estas condições exatas não pode ser monotonicamente crescente e deve atingir um ponto crítico máximo antes de saturar. Além disto cresce mais rapidamente, em pequenos e médios vetores de onda, que o estabelecido nas teorias autoconsistentes de Singwi-Tosi-Land-Sjolander e Vashishta-Singwi. Os efeitos sobre o fator de estrutura, a função de distribuição de pares, são discutidas e comparadas também com o cálculo Monte-Carlo de Ceperley e Alder.

BRAIN WAVES FROM A GLOBAL ELECTROMAGNETISM

R. ANDRADE, R. M. DORIA, ANDRÉ ZUKOSKI
Universidade Católica de Petrópolis

Maxwell equations can be extended to a so-called global Electromagnetism. It is a gauge model involving electric and magnetic field with puntiform and environmental natures. A consequence is the appearance of a non-linear electromagnetism. There is a Gauss law where the source of the electric field depends on the electric field. Considering that brain is an complex electrochemistry machine where neurons fire purely for electric reasons we should investigate on the origin of the magnetic field measured around the brain. Is it generated from a granular current as in Maxwell equations or is it possible a systemic electromagnetic source? Our viewpoint is that minds, being complex, should not be studied on the framework of a physics that operates at the reductionist level on simple elementary things. Thus the development of an environmental electromagnetism with environmental electric and magnetic fields obeying equations similar to the Maxwell case becomes a very attractive theoretical model for studying the brain behaviour not as a collection of atoms. Another fundamental consideration for applying this global electromagnetism is that the corresponding equations are non-linear. Hopes, thoughts, decisions must have a self-interacting origin. Thus studying the mathematical model originated by the environmental sector of this global electromagnetism the solutions for the corresponding fields are obtained. A comparison with magnetic field around the brain experimental data is proposed. Brain waves with electromagnetic nature and non-linear are obtained.

Metais e Materiais Magnéticos II (MMM) - 09/06/95

MAGNETIC CHARACTERIZATION OF THE SPIN-GLASS PHASE IN $Mn_xCd_{1-x}In_2Te_4$ SOLID SOLUTIONS

FERNANDO PALACIO
*Instituto de Ciencia de Materiales de Aragon
CSIC-Universidad de Zaragoza*

The magnetic behavior of solid solutions of $Mn_xCd_{1-x}In_2Te_4$, with $0.7 < x < 1$, has been investigated in the temperature range between 1.7 and 300 K by means of ac susceptibility and low field magnetization. All the samples exhibit irreversibility phenomena in the magnetization curves. The temperature at which the anomaly is observed lowers as decreases the concentration of Mn in the sample. For $x = 1$ the temperature where the zero field cooled (ZFC) and field cooled (FC) magnetization curves start diverging is $T_{sg} = 3.9$ K. The irreversibility behavior in the magnetization is accompanied by broad maxima in both the in-phase and the out of-phase susceptibility measurements which are also frequency dependent. The behavior is characteristic of a spin-glass phase arising at temperatures below T_{sg} . The frequency dependence of the freezing temperature, in the frequency range between 1 Hz and 1 KHz, has been analysed in terms of dynamic scaling models and of the Fulcher law. The research in Zaragoza has been supported by grants MAT91-0681 and MAT94-0043 from the CICYT. International cooperation has been possible thanks to a grant from the Programa de Cooperación Científica con Iberoamérica. On of us (JC) acknowledges a doctoral fellowship to the Gobierno de Navarra.

ANOMALOUS ANTIFERROMAGNETIC-SPIN FLOP BOUNDARY IN THE MAGNETIC PHASE DIAGRAM OF $Rb_2Fe_{1-x}In_xCl_5 \cdot H_2O$

F. PALACIO, J. CAMPO
*Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón, CSIC -
Universidad de Zaragoza, E-50009, Zaragoza, Spain*
A. PADUAN-FILHO, C. C. BECERRA
*Instituto de Física, Univ. de São Paulo, CP 20516, São
Paulo, SP*
M. T. FERNÁNDEZ, J. RODRÍGUEZ-CARVAJAL
*Laboratoire Leon Brillouin (CEA-CNRS), Centre de
Saclay, 91191 Gif sur Yvette Cedex, France*

The boundaries between the paramagnetic, antiferromagnetic (AF), and spin-flop (SF) phases in solid solutions of the low anisotropy antiferromagnets $Rb_2Fe_{1-x}In_xCl_5 \cdot H_2O$ have been studied by means of a.c. susceptibility, magnetization and neutron diffraction experiments. The sharp first order spin-flop transition that occurs in $Rb_2Fe_{1-x}In_xCl_5 \cdot H_2O$ has its width increased by one order of magnitude when

In is introduced. However, no histeretic phenomena as found in the more anisotropic related solutions $K_2Fe_{1-x}In_xCl_5 \cdot H_2O$ [1] have been observed. For $x = 0.04$ an unexpected structure in the AF-SF line boundary is observed suggesting the presence of a mixed phase, where AF and SF phases coexist in domains with weakly pinned walls due to the low magnetic anisotropy of the system. Neutron diffraction experiments show that the presence of diamagnetic impurities affect strongly to the orientation of the magnetic moments at the spin-flop phase. The research in Zaragoza has been supported by grants MAT91-0681 and MAT94-0043 from the CICYT. The research in São Paulo has been supported by grants from CNPq and FAPESP. International cooperation has been possible thanks to a grant from the Programa de Cooperación Científica con Iberoamérica. On of us (JC) acknowledges a doctoral fellowship to the Gobierno de Navarra. [1] A. Paduan-Filho, C.C. Becerra and F. Palacio, Phys. Rev. B 43 (1991) 11107.

**EFEITO DA DILUIÇÃO NO
COMPORTAMENTO MAGNÉTICO DO
FERROMAGNETO-FRACO $Cu(HCO_2)_2 \cdot 4H_2O$**

H. J. BRUMATTO, A. PADUAN-FILHO, C. C.
BECERRA

*Instituto de Física, Universidade de São Paulo, CP 20516,
01452-990, São Paulo, Brasil*

O formato de cobre tetrahidratado é um antiferromagneto bidimensional para temperaturas abaixo de $T_N = 16.8K$. Na ausência de campo externo, a estrutura magnética é a de um antiferromagneto-fraco. Os modelos de campo médio, quando se considera a existência de quatro sub-redes, descrevem o comportamento da magnetização em concordância com os dados obtidos experimentalmente, e reforçam o caráter bidimensional do sistema magnético. Medidas de NMR feitas próximas a T_N permitiram determinar o expoente crítico da magnetização $\beta = 0.22$, um valor observado em outros sistemas bidimensionais. Neste trabalho, o íon magnético é parcialmente substituído pelos íons não magnéticos de Cd e Zn . Pretende-se verificar os efeitos da diluição no diagrama magnético de fase, e nas propriedades magnéticas e críticas de um ferromagneto-fraco bidimensional.

**TRANSITION METAL IMPURITIES IN Fe:
MAGNETIC AND HYPERFINE
PROPERTIES**

N. A. DE OLIVEIRA

Universidade do Estado do Rio de Janeiro

A. A. GOMES, A. TROPER

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

A description of the local magnetic moment of dilute transition impurities embedded in Fe is presented. This description is based on a recent formulation [1], which tries to establish a connection between first principles calculations and simple model approaches for the impurity problem [2]. In this work we adopt a parametrized tight binding approximation which furnishes a simple theoretical framework to describe dilute impurities in ferromagnetic transition metals. The main ingredients in the present formulation are:

- (i) a Hartree-Fock description of the local Coulomb interaction terms;
- (ii) the charge neutrality, ensured by a generalized Friedel's sum rule, which takes into account the change in hopping between the impurity and the host next neighbors;
- (iii) s-p magnetization is proportional to the d-one. [3].
- (iv) charge screening is entirely performed within the d-band.

The use of only a few parameters and a simple self-consistent procedure is enough to account for the observed trends in the experimental data for three series of transition impurities in Fe.

1 - J. F.van Acker, W. Speier and R. Zeller, Phys.Rev.B43, 9558 (1991)

2 - see for instance P.H. Dederichs, R. Zeller, H. Akai and H. Herbert, J. Magn. Magn. Mat 100 261 (1991), and reference therein

3 - A. Troper, X.A. da Silva, A.P. Guimarães and A.A. Gomes J. Phys. F5, 160 (1975)

**ESTUDO DO CAMPO HIPERFINO
MAGNÉTICO NAS LIGAS DE HEUSLER
DO TIPO CO_2ScZ Z=Ge,Sb).**

EDUARDO JOSÉ MIOLA, M. OLZON-DIONYSIO, S. D.
DE SOUZA

Univ. Federal de São Carlos

RAJENDRA N. SAXENA, ARTUR W. CARBONARI,
WILLI PENDL JR

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN)

As ligas de Heusler são compostos intermetálicos ternários com composição química X_2YZ , onde $X=Co, Ni, Cu$; $Y=Mn, Ti, Sc, Cr$ e $Z=Al, Ga, Ge, Sb$. Estudos destas ligas são de grande interesse na compreensão das propriedades magnéticas, pois a presença de 3 elementos químicos diferentes em sua fórmula química torna possível fazer diversas combinações, mesmo não estequiométricas, dos elementos constituintes, permitindo

o estudo da interação de diferentes átomos vizinhos sobre um determinado sítio. As ligas estudadas Co_2ScGe Co_2ScSb foram preparadas a partir de quantidades estequiométricas dos seus componentes de alta pureza. As amostras foram fundidas em forno de arco em atmosfera de Ar e homogeneizadas a 800°C . Para medidas de campo hiperfino magnético, foi feita a substituição de 1% dos átomos de Sc não magnético, por ^{181}Hf radioativo. A caracterização das amostras, foram feitas por difração de raios x, que comprovam a estrutura cúbica das ligas. Realizamos também medidas de magnetometria, e as ligas mostraram-se ainda magnéticas a 850K, evidenciando possuir um alto T_c . As medidas de campos hiperfinos magnéticos realizadas a 77K, temperatura ambiente e 500K no sítio do Sc, foram feitas usando a técnica de correlação angular perturbada. Esses resultados serão apresentados e discutidos em comparação com os valores de CHM para ligas similares existentes na literatura.

-Bolsista da Capes

-Trabalho realizado com apoio parcial da FAPESP.

Hyperfine Field at the ^{147}Nd site in $\text{La}_{0.8}\text{Nd}_{0.2}\text{Ni}$ and $\text{Ce}_{0.8}\text{Nd}_{0.2}\text{Ni}$ Measured by Nuclear Orientation

I. S. OLIVEIRA⁺, D. DORAN, N. J. STONE

Department of Physics, Oxford University, Parks Rd. OX1 3PU, U.K.

K. NISHIMURA

Department of Engineering, Toyama University, Toyama 930, Japan

Y. ISIKAWA

Department of Physics, Toyama University, Toyama 930, Japan

The intermetallic compound $\text{Ce}_{0.8}\text{Nd}_{0.2}\text{Ni}$ is a magnetic dense Kondo system with $T_c \sim 1.6$ K where at low temperatures the ordering RKKY interaction occurs solely between the Nd^{3+} ions. Nuclear orientation (NO) of ^{145}Ce and ^{147}Nd isotopes shows no magnetic moment on Ce ions and yields a magnetic hyperfine field of 272(18) T at the Nd site. $\text{La}_{0.8}\text{Nd}_{0.2}\text{Ni}$ is a simple ferromagnet with T_c of the same order of magnitude, but the hyperfine field at the Nd site is found to be 380(20) T, a much larger value than that in $\text{Ce}_{0.8}\text{Nd}_{0.2}\text{Ni}$, suggesting that 4f electrons from Ce may be participating in the hyperfine field at the Nd site. It is also evident from NO results that at 10 mK $\text{La}_{0.8}\text{Nd}_{0.2}\text{Ni}$ shows a larger magnetic anisotropy than $\text{Ce}_{0.8}\text{Nd}_{0.2}\text{Ni}$.

⁺ Present address: CBPF, Rua Dr. Xavier Sigaud 150, Urca, 22290-180 - Rio de Janeiro, RJ.

MÖSSBAUER AND μ^+ SR STUDIES OF LOW DIMENSIONAL MAGNETIC ORDERING IN ILVAITE

M. A. C. DE MELO, M. CESENA, M. SCHEPKE, H. -H. KLAUSS, M. HILLBERG, F. J. LITTERST

Institut für Metallphysik und Nukleare Festkörperphysik, Technische Universität Braunschweig, Germany.

G. AMTHAUER

Institut für Mineralogie, Universität Salzburg, Austria

The magnetic structure of the mineral ilvaite $\text{CaFe}_2^{2+}\text{Fe}^{3+}[\text{Si}_2\text{O}_7/\text{O}/(\text{OH})]$ is mainly determined by the coupling between Fe^{2+} and Fe^{3+} in the center of oxygen octahedra forming a chain structure. Ilvaite reveals a quasi one dimensional ferromagnetic order along Fe chains between 50-120K. Both Mössbauer spectroscopy and μ^+ SR reveal the onset of long range order below 120K with spin dynamics which is interpreted with relatively slowly moving wide domain boundaries. Below ~ 50 K the individual chains couple antiferromagnetically, yet a considerable fraction of dynamical spins is detected from μ^+ SR down to low temperature. The Mössbauer results on synthesized Mn ($0 \leq x \leq 6.3\%$) doped ilvaite indicate that the substitution of Mn at Fe^{2+} sites, has little influence on the temperature dependent modulated antiferromagnetic structure but strong influence on the spin dynamic behavior. The substitution of Al ($0 < y \leq 6.7\%$) at Fe^{3+} sites leads to a break up of the magnetic interaction along the chain. This can be traced from the wide temperature distribution of the onset of the magnetic hyperfine splitting. The magnetic dynamics for both Mn and Al doped ilvaites is determined by the single ion anisotropy of Fe^{2+} , which is also supported by a crystal electric field analysis.

MÖSSBAUER AND μ^+ SR STUDIES IN HEDENBERGITE

M. A. C. DE MELO, J. KLENKE, H. -H. KLAUSS, M. HILLBERG, F. J. LITTERST

Institut für Metallphysik und Nukleare Festkörperphysik, Technische Universität Braunschweig, Germany.

G. AMTHAUER

Institut für Mineralogie, Universität Salzburg, Austria

Hedenbergite $\text{CaFe}^{2+}\text{Si}_2\text{O}_6$ is natural silicate mineral. Fe^{2+} ions are located in the centers of oxygen octahedra and form single chains. The magnetic coupling along single chains is ferromagnetic, however, magnetic susceptibility measurements (Coey 1985) show an antiferromagnetic cusp at ~ 30 K for hedenbergite. μ^+ SR show a change of slope of the spin dynamics below 70K which indicates antiferromagnetic short range or-

der (This can also be traced from magnetic susceptibility data). The antiferromagnetic coupling leads to a slow down of fluctuations in hedenbergite. Below $\sim 30\text{K}$ relaxation effects on the Mössbauerspektra are observed, here it can be shown to occur between a spin orbit singlet and a doublet. These relaxation effects is supported by a crystal electric field analysis.

Dinâmica da Rede e de Spins (MMM) - 09/06/95

MEASUREMENTS OF SPIN WAVE INSTABILITY MAGNON DISTRIBUTIONS FOR SUBSIDIARY ABSORPTION IN YTTRIUM IRON GARNET FILMS BY BRILLOUIN LIGHT SCATTERING

P. KABOS, G. WIESE, C. E. PATTON

Department of Physics, Colorado State University, Fort Collins, Colorado 80523

The first evidence for a wide distribution in the critical mode wave vectors above the spin wave instability threshold for subsidiary absorption is reported. The Brillouin light scattering (BLS) measurements were done on $4.15\mu\text{m}$ thick yttrium iron garnet films with the static field and the 8.47GHz linearly polarizes microwave field in plane. The distribution in the critical mode wave number is broad, with widths of about $0.5 \times 10^4 - 2 \times 10^4 \text{cm}^{-1}$ and shapes which change with field and power. These results cast doubts on the validity of sample two mode models for the analysis of self-oscillation, chaos, and related effects above threshold.

Materiais Magnéticos Moles (MMM) - 09/06/95

Magnetoimpedância Transversal Gigante e Medida do Efeito Hall em Fitas de

$\text{Co}_{70.4}\text{Fe}_{4.6}\text{Si}_{15}\text{B}_{10}$

FERNANDO LUIS DE ARAÚJO MACHADO, LUIS GUSTAVO PEREIRA, SERGIO MACHADO REZENDE, FREDERICO CAVALCANTE MONTENEGRO

Departamento de Física-UFPE

KENIA CARVALHO MENDES

Departamento de Física-UEPB

MARIA VIRGINIA PIRES ALTOÉ, FRANK PATRICK MISSELL

USP - São Paulo

A magnetoimpedância longitudinal (LMI) nas ligas ferromagnéticas amorfas CoFeSiB pode assumir valores gigantes (GLMI) que dependem da frequência f e da amplitude da corrente elétrica I_{ac} . A variação da LMI com um campo magnético aplicado H , para amostras tratadas termicamente por 15 min. na presença de um campo magnético de 2kOe , apresenta picos para $H_L < 10\text{Oe}$. GLMI da ordem 130% foi obtida para $f = 1\text{MHz}$ e $I_{ac} = 10\text{mA}$ (Phys. Rev. B, **51**, 3926, 1995). No presente trabalho serão apresentadas medidas de magnetoimpedância transversal gigante (GTMI) para $10 < f < 10^5\text{Hz}$, $2.5 < I_{ac} < 25\text{mA}$ e $-15 < H < 15\text{kOe}$. Picos que dependem de f e I_{ac} foram também observados na GTMI. Valores de GTMI da ordem de 28% foram observados para $H_T = 350\text{Oe}$, $f = 100\text{kHz}$ e $I_{ac} = 25\text{mA}$. Os val-

ores de H nos quais são observados os máximos na magnetoimpedância (H_L e H_T) estão correlacionados com a região de rotação de domínios da curva de magnetização. O coeficiente Hall espontâneo medido nessas ligas foi $R_S = 0.43\mu\Omega\text{cmkOe}^{-1}$ e os resultados não apresentaram variações significantes com a frequência. Um modelo para a variação da magnetoimpedância com a frequência e com o campo magnético será também apresentado.

Apoio FINEP, PADCT, CNPq e FACEPE.

MAGNETO-IMPEDÂNCIA GIGANTE EM FIOS AMORFOS E NANOCRISTALINOS

MARCELO KNOBEL

IFGW-UNICAMP

MARIA LUISA SÁNCHEZ, CRISTINA GÓMEZ-POLO, ANTONIO HERNANDO

Inst. Magnetismo Aplicado, Madri, Espanha

PILAR MARÍN, MANUEL VÁZQUEZ

Cons. Sup. Investigaciones Científicas, Madri, Espanha

O efeito de magneto-impedância gigante (GMI) consiste na mudança enorme (de até 400%) da impedância de materiais magnéticos duros (para frequências relativamente altas, $f \simeq 1\text{MHz}$) ao aplicar um campo magnético externo (da ordem de poucos Oe). A descoberta recente da GMI têm despertado um enorme interesse não somente devido às enormes perspectivas de aplicações tecnológicas, principalmente em sensores magnéticos, mas também no aspecto fundamental, pois o efeito revela diversas questões intrigantes ainda não explicadas. Neste trabalho apresentaremos medidas da

GMI (a temperatura ambiente) em função da amplitude e frequência da corrente elétrica aplicada em fios amorfos de diversas composições: $Co_{68.1}Fe_{4.4}Si_{12.5}B_{15}$, $Co_{71.8}Fe_{4.9}Nb_{0.8}Si_{7.5}B_{15}$ e $Fe_{73.5}Cu_1Nb_3Si_{13.5}B_9$. Nas amostras ricas em Co foi também estudado o comportamento em função da tensão mecânica aplicada, a fim de verificar o efeito da anisotropia magneto-elástica na resposta da impedância ao campo magnético. Nos fios de $Fe_{73.5}Cu_1Nb_3Si_{13.5}B_9$ foram efetuados diversos tratamentos térmicos com o objetivo de formar uma estrutura nanocristalina (que aumenta a permeabilidade magnética e diminui a resistividade), e com isso otimizar a sensibilidade e a amplitude do efeito GMI. É proposto ainda um modelo teórico simples, que permite uma fácil visualização do fenômeno. Através desse modelo é possível estimar a profundidade de penetração magnética, a permeabilidade circular dos fios e a componente em quadratura da impedância, revelando um excelente acordo com os resultados experimentais.

Dinâmica da Rede e de Spins (MMM) - 09/06/95

Intermitências Transiente e Induzida por Crise em Ressonância Ferromagnética de Alta Potência

FÁBIO CÉSAR SIQUEIRA DA SILVA, FLAVIO MENEZES DE AGUIAR, SERGIO MACHADO REZENDE
Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco

Experimentos de ressonância ferromagnética (9.0 GHz, temperatura ambiente) em níveis de potência não usuais, da ordem de 10W, revelam a existência de intermitência transiente de longa duração conhecida como intermitência tipo-III de Pomeau-Manneville e de intermitência ("bursting") induzida por crise^[1] em um sistema magnético (YIG) que apresenta uma dinâmica não linear de ondas de spin. O tempo de vida médio destes transientes caóticos específicos assim como o tempo de duração médio entre burstings caóticos consecutivos mostram um comportamento funcional do tipo lei de escala com o parâmetro de controle, que neste caso é a intensidade do campo magnético de radiofrequência. Os resultados experimentais obtidos estão em acordo razoável com simulações numéricas realizadas a partir de um modelo teórico que descreve o comportamento de dois modos de onda de spin interagindo não linearmente^[2].

[1] C. Greboggi, E. Ott, F. Romeiras and J. Yorke, Phys.Rev.A 36, 5365(1987).

[2] S.M. Rezende and A. Azevedo, Phys.Rev.B 45, 10387 (1992).

Materiais Magnéticos Moles (MMM) - 09/06/95

MAGNETORESISTENCIA AC, MAGNETIZAÇÃO E ABSORÇÃO DE MICROONDA EM MATERIAIS AMORFOS FERROMAGNÉTICOS

ANTONIO N. MEDINA, SAID SALEN-SUGUI JR,
FLÁVIO C. G. GANDRA
Instituto de Física Gleb Wataghin, UNICAMP

Apresentamos medidas de magnetoresistencia ac (MR), magnetização e absorção de microonda realizadas em materiais amorfos ferromagnéticos: $Co_{70.4}Fe_{4.6}Si_{15}B_{10}$, $Fe_{78}Si_9B_{13}$ e $Co_{80}Si_{10}B_{10}$. As amostras foram preparadas na forma de fitas com espessura de $30\mu m$. A amostra $Co_{70.4}Fe_{4.6}Si_{15}B_{10}$ foi submetida a tratamento térmico a 573K por 15 min, com um campo magnético de 2kG aplicado na direção transversal à direção da fita. Para esta amostra observamos um pico na MR, que apresenta uma forte dependência com a frequência e direção do campo aplicado, consistente com os dados encontrados na literatura^[1]. O mesmo comportamento não foi observado para demais amostras. Os experimentos de absorção de microonda realizados em banda-X (9.5GHz), em temperatura ambiente, mostram um pico na região de baixo campo que coincide com o campo de saturação da magnetização e uma ressonância ferromagnética para campos maiores. O pico de baixo campo é atribuído a mudança da impedância da cavidade devido ao efeito de saturação da magnetização e ao pico da magnetoresistencia.

Agradecimentos : Este trabalho foi realizado com suporte financeiro da FAPESP e CNPq.

[1] - F.L.A. Machado, B.L. da Silva, S.M. Rezende and C.S. Martins, J. Appl. Phys. 75 (10), 6563 (1994)

Dinâmica da Rede e de Spins (MMM) - 09/06/95

**EXCITATION SPECTRUM OF BOSONS
AND FERMIONS ON THE ONE
DIMENSIONAL SUPERLATTICE†**

JOSÉ PIMENTEL DE LIMA

UFPI

LINDBERG LIMA GONÇALVES

UFCE

A Hamiltonian which is expressed as a bilinear form of fermion or boson operators on the one-dimensional superlattice (closed chain) is considered. Each unit cell of the superlattice is composed of the two subcells, A and B, which alternate along the lattice. The quadratic terms of the Hamiltonian are restricted to operators associated to nearest neighbour sites, so that it can be written in the form:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{l=1}^N \left\{ \sum_{m=1}^{n_A} E_A a_{l,m}^\dagger a_{l,m} + \sum_{m=1}^{n_B} E_B b_{l,m}^\dagger b_{l,m} \right. \\
 & + \sum_{m=1}^{n_A-1} W_A \left(a_{l,m}^\dagger a_{l,m+1} + h.c. \right) + \\
 & + \sum_{m=1}^{n_B-1} W_B \left(b_{l,m}^\dagger b_{l,m+1} + h.c. \right) \\
 & + \sum_{m=1}^{n_A-1} V_A \left(a_{l,m}^\dagger a_{l,m+1}^\dagger + h.c. \right) + \\
 & + \sum_{m=1}^{n_B-1} V_B \left(b_{l,m}^\dagger b_{l,m+1}^\dagger + h.c. \right) \\
 & + W \left(a_{l,n_A}^\dagger b_{l,1} + b_{l,n_B}^\dagger a_{l+1,1} + h.c. \right) + \\
 & \left. + V \left(a_{l,n_A}^\dagger b_{l,1}^\dagger + b_{l,n_B}^\dagger a_{l+1,1}^\dagger + h.c. \right) \right\}
 \end{aligned}$$

where l identifies the unit cell, m identifies a site in a given subcell, and a 's and b 's are fermion or boson operators on the subcells A and B respectively. The elementary excitations of the system have been obtained by using an extension of the transfer matrix technique introduced by Albuquerque et al.[1] for the study of phonons on monoatomic superlattices. In view of the general Hamiltonian considered the solution obtained can be applied to a large class of problems, and represents a generalization of the known solutions for particular systems[2]. An explicit application is presented for the spin 1/2 XY-model[3] in a transverse field, and for the isotropic model it is shown that the results reproduce the exact ones recently obtained by using the Green function method[4].

[1] E. L. Albuquerque, P. Fulco, and D. R. Tilley, *Rev. Bras. Fis.* **16** 315 (1986).

[2] E. L. Albuquerque and M. G. Cottam, *Solid State Commun.* **89**, 249 (1994).

[3] E. Lieb, T. Schultz and D. Mattis, *Ann. Phys.(NY)* **16**, 406 (1961).

[4] L. L. Gonçalves and J. P. de Lima, *J. Magn. Magn. Mate.* **140-144**, (1995).

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

Materiais Magnéticos Moles (MMM) - 09/06/95

**ESTUDO DA EVOLUÇÃO TEMPORAL DA
ESTRUTURA DE DOMÍNIOS EM FITAS
AMORFAS DE $Fe_{64}Co_{21}B_{15}$ E $Co_{77}B_{23}$
UTILIZANDO DEPOLARIZAÇÃO
TRIDIMENSIONAL DE NEUTRONS**

JOÃO PAULO SINNECKER, REIKO SATO TURTELLI
LMBT - DFESCM - IFGW - Universidade Estadual de
Campinas - UNICAMP 13083-970 Campinas SP

GERARD BADUREK

*Institut für Kernphysik - TU Wien - Wiedner Hauptstrasse
8-10 A-1040 Viena Áustria*

ROLAND GRÖSSINGER

*Institut für Experimentalphysik - TU Wien - Wiedner
Hauptstrasse 8-10 A-1040 Viena Áustria*

A depolarização tridimensional (3d) de neutrons é uma técnica muito útil no estudo de estruturas magnéticas, como estruturas de domínio, em materiais magnéticos. Por ser uma técnica baseada em transmissão através do material, pode ser utilizada no estudo de estrutura de domínios no interior do material, ao contrário de técnicas ópticas, como por exemplo o efeito Kerr, onde apenas a superfície do material pode ser estudada. Neste trabalho, a evolução temporal da estrutura de domínios em fitas amorfas de composição $Fe_{64}Co_{21}B_{15}$ e $Co_{77}B_{23}$ partindo de um estado saturado, foi estudada utilizando depolarização 3d de neutrons. Um pulso magnético retangular de 150 A/m, 0.5ms de duração e 3ms de tempo de repetição foi aplicado às amostras na direção longitudinal da fita, durante o qual os 9 elementos da matriz (3x3) de depolarização foram medidos dinamicamente com uma resolução de 25 μ s. As medidas foram feitas com e sem aplicação de uma tensão mecânica externa de forma que foram possíveis estudos em diversas e bem definidas estruturas de domínios. A evolução temporal da estrutura de domínios a partir do estado saturado até a remanência pôde ser observada.

Dinâmica da Rede e de Spins (MMM) - 09/06/95

Dinâmica de Vórtices no Modelo Magnético XY bidimensional

JOSÉ EVARISTO RODRIGUES COSTA, BISMARCK VAZ DA COSTA

Dpto. Física, Universidade Federal de Minas Gerais

DAVID LANDAU, KUN CHEN

Center for Simulational Physics, University of Georgia, Athens

Estudamos a dinâmica de vórtices no sistema magnético XY bidimensional, descrito pelo Hamiltoniano

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \lambda S_i^z S_j^z), \quad \lambda = 0.$$

Utilizando técnicas de Monte Carlo (MC) para equilibrar o sistema a uma dada temperatura e Dinâmica Molecular (DM) para evolução temporal do sistema, fomos capazes calcular a função correlação de flutuação da densidade de vórtices $C(r, t)$ definida como

$$C(r, t) = \langle \Delta\rho(0, 0)\Delta\rho(r, t) \rangle / \langle (\Delta\rho(0, 0))^2 \rangle,$$

onde $\Delta\rho(r, t) = \langle \rho(r, t) \rangle - \rho(r, t)$ e ρ é a densidade de vórtices local.

A simulação foi feita em uma rede quadrada de lado $L=44$ e condições de contorno periódicas, onde calculamos $C(r, t)$ para $r=0, 1, 2$ em temperaturas maiores que a temperatura de transição de Kosterlitz-Thouless ($T > T_{KT}$)

Através de uma observação das configurações durante alguns passos no tempo, pudemos notar que os vórtices (ou anti-vórtices) não se movem por mais que um espaçamento de rede. Na verdade nossos resultados sugerem que a maior contribuição para a função $C(r, t)$ vem de um processo de criação e aniquilação de pares de vórtice-anti-vórtice.

Materiais Magnéticos Moles (MMM) - 09/06/95

MELHORIA DAS PROPRIEDADES FÍSICAS DE METAIS MAGNÉTICOS UTILIZANDO A TÉCNICA DE AQUECIMENTO JOULE

MARCELO KNOBEL

IFGW - UNICAMP

PAOLA TIBERTO, PAOLO ALLIA

Dip. Física, Politecnico di Torino, Torino, Itália

MARCELLO BARICCO

Università di Torino, Torino, Itália

ALDO STANTERO, FRANCO VINAI
Ist. Elett. Nazionale Galileo Ferraris, Torino, Itália

Tratamentos térmicos específicos são normalmente realizados para alterar a microestrutura (e consequentemente as propriedades físicas) de materiais magnéticos destinados a aplicações tecnológicas. O uso de tratamentos térmicos não-convencionais tem crescido nos últimos anos, sempre com o objetivo de formar estruturas peculiares e fases meta-estáveis. Em particular, um método de aquecimento que tem se destacado é o que utiliza o calor liberado por efeito Joule quando uma corrente elétrica (4-20 A) flui em uma amostra metálica por um tempo curto (de ms até s). Neste caso, as taxas de aquecimento alcançadas são muito altas, modificando completamente a cinética de transformações estruturais que ocorrem dentro do material. A técnica de aquecimento Joule com corrente contínua permite medir a evolução da resistência elétrica durante o tratamento térmico, evidenciando claramente qualquer mudança estrutural que ocorre no material. Além disso, o desenvolvimento de uma teoria que descreve completamente o aquecimento Joule, possibilitou estudos da cinética de cristalização e evolução da temperatura dentro dos materiais tratados. O aquecimento Joule foi testado em diversos sistemas magnéticos produzidos por solidificação ultra-rápida ("melt-spinning"), dos quais podemos destacar: (a) fitas amorfas de $Fe_{40}Ni_{40}B_{20}$ e $Fe_{80}Si_{10}B_{10}$; (b) fitas amorfas de composição $Fe_{73.5}Cu_1Nb_3Si_{13.5}B_9$ e $Fe_{86}Zr_7B_6Cu_1$; (c) Ligas heterogêneas de $Cu_{100-x}Co_x$ ($x=0, 5, 10$ e 15). O aquecimento Joule mostrou-se extremamente versátil e reproduzível na realização de tratamentos térmicos a baixas temperaturas para relaxar tensões internas criadas no processo de produção e indução de anisotropias peculiares. Os materiais estudados em (b) formam nanocristais após o aquecimento Joule, com propriedades magnéticas e mecânicas superiores a materiais nanocristalinos produzidos através de aquecimento convencional em fornos. Em (c), os sistemas granulares formados através de aquecimento Joule apresentam o efeito de magneto-resistência gigante da mesma ordem de magnitude de materiais tratados em fornos, com a vantagem de que cada tratamento térmico é completamente realizado em poucos segundos. Em todos os estudos realizados verificou-se que o aquecimento Joule apresenta alguma vantagem sobre tratamentos térmicos convencionais, sendo promissor para o desenvolvimento de materiais magnéticos inovativos.

Dinâmica da Rede e de Spins (MMM) - 09/06/95

A THEORETICAL STUDY OF THE DYNAMIC STRUCTURE FACTOR OF LiTbF_4

JOÃO FLORENCIO JR

UFMG and Pennsylvania State University

SURAJIT SEN

State University of New York at Albany

ZHI-XIONG CAI

Brookhaven National Laboratory

We calculate the time-dependent spin pair correlation function of the Transverse Ising model on a 2-D square lattice at $T = \infty$. We employ the method of recurrence relations together with an approximation based on a non-Gaussian terminating function for the coefficients of a continued fraction. Our study, along with known results in the 1-D case, in mean-field or ∞ -D case and in other studies, help understand the experimentally obtained longitudinal dynamic structure factor of the induced moment ferromagnet LiTbF_4 studied by Youngblood *et. al.*, ((1982) *Phys. Rev. Lett.* 49, 1724) and is consistent with the studies of Kötztler *et. al.*, ((1988) *Phys. Rev. Lett.* 60, 647).

Materiais Magnéticos Moles (MMM) - 09/06/95

NMR STUDY OF LOCAL ENVIRONMENTS IN THE AS-CAST AND NANOCRYSTALLINE ALLOY

$\text{Fe}_{73.5}\text{Cu}_1\text{Nb}_3\text{Si}_{13.5}\text{B}_9$.

DOMINGO ALIAGA-GUERRA¹, L. IANNARELLA

CBPF

I. ŠKORVÁNEK

Institute of Experimental Physics SAS, 04353 Košice, Slovakia

A. P. GUIMARÃES

CBPF

A detailed pulsed NMR study of the alloy $\text{Fe}_{73.5}\text{Cu}_1\text{Nb}_3\text{Si}_{13.5}\text{B}_9$ in the as-cast amorphous and partially crystallized states is reported. The NMR spectra are complex and the intensity of the different lines varies with the rf power level. This effect can be used for the identification of the magnetic regions in the samples, characterized by different local anisotropies. The results obtained show that the inhomogeneities in the original amorphous alloy characterized by differences in the local compositional short range order play an important role in the formation of the nanocrystalline structure. The ^{57}Fe and ^{93}Nb NMR signals come mainly from two kinds of local order: one Si-enriched and the other B-enriched. The former is the precursor of the FeSi nanocrystals with bcc structure. In the partially crystallized samples, NMR spec-

tra made at different power levels distinguish between the signals from the nanocrystals and the amorphous remainder. The signals from this remainder show similarities with the resonances from the B-enriched sites of the as-cast alloys. ¹ Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Ingeniería, P.O. Box 31-139, Lima, Perú.

Metais e Materiais Magnéticos V (MMM) - 09/06/95

Characterization of the Oxidation Process of $(\text{NH}_4)(\text{Mn}_x\text{Fe}_{1-x})\text{PO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ by Mössbauer Spectroscopy.

L. F. MOREIRA, P. H. DOMINGUES, E. MATTIEVICH
Instituto de Física - UFRJ

Fifteen samples of the system $(\text{NH}_4)(\text{Mn}_x\text{Fe}_{1-x})\text{PO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ were submitted previously to a process of oxidation for times ranging from 0 to 50 hours in dry air. The non-oxidated sample with $x=0$ presented only one site for Fe^{2+} with $\text{EQ}=1.324$ mm/s. The process of oxidation for each compound indicated the presence of two sites for Fe^{3+} and one additional site for Fe^{2+} at the intermediate stages. It was also observed that the rate of oxidation of the samples decreases when the Mn concentration increases. At end of the process the ratio of Fe^{3+} sites are in the proportion 2/3. The oxidation was attributed to the interaction of O_2 molecules in the air with water molecules of the material with the consequent formation of $(\text{OH})^-$ and the oxidation of Fe^{2+} .

Strongly Disordered Heisenberg Spin-1 chains: Vanadium Warwickites

M. A. CONTINENTINO, J. C. FERNANDES, R. B.

GUIMARAES, B. BOECHAT

Inst. de Física - Univ. Federal Fluminense

H. A. BORGES

Depto. de Física, PUC-RJ

J. V. VALARELLI

Inst. de Geociencias, USP-SP

E. HAANAPPEL, ALEX LACERDA

National High Magnetic Field Laboratory, USA

P. R. J. SILVA

CBPF

The structure of the compound $MgVOBO_3$ is characterized by the presence of ribbons along the c-axis where the, spin-1, V+3 ions are randomly located. We present x-ray, susceptibility and high-field magnetization measurements (up to 45 Tesla) which give evidence that in this pseudo-one-dimensional system, the strong disorder on the magnetic chains destroys the Haldane gap expected for this kind of material. The magnetic behaviour we find is reminiscent of the disordered spin-1/2 antiferromagnetic chain although with weaker singularities. We present theoretical results for the strongly disordered spin-1 antiferromagnetic Heisenberg chain which are in the agreement and substantiate the experimental observations.

ENHANCED REMANENCE IN FLASH-ANNEALED $Nd_4 Fe_{78} B_{18}$

MARIA VIRGINIA PIRES ALTOÉ, MARCELO SHIROMA
LANCAROTTE, HERCÍLIO RODOLFO RECHENBERG,
FRANK PATRICK MISSELL
IFUSP

Nanocrystalline $Nd_4 Fe_{78} B_{18}$ was produced by affixing current leads directly to amorphous ribbons for flash-annealing. Ribbons were annealed in the range $T_a = 650-1000^\circ C$, for times 10-600 s. Flash-annealed ribbons show higher remanence ratios ($M_r/M_s = 0.83$) than those submitted to conventional furnace ($680^\circ C/10$ min) annealing ($M_r/M_s = 0.74$). In flash-annealed ribbons, Mossbauer spectroscopy and x-ray diffraction indicated the presence of the $Nd_2 Fe_{23} B_3$ phase, in addition to $Fe_3 B$, $Nd_2 Fe_{14} B$, and $\alpha-Fe$. Flash-annealing for short times at high temperatures may give H_c values up to 20% higher than furnace annealing. The isothermal remanent magnetization and the dc demagnetization remanence were found to be in reasonable agreement with the Wohlfarth relation.

COERCIVIDADE E VISCOSIDADE MAGNÉTICA DE ÍMÃS $NdDyFeB$ PREPARADOS VIA MECHANICAL ALLOYING

VALQUÍRIA VILLAS-BOAS
Instituto de Física da USP

JESUS M. GONZÁLEZ, FEDERICO CEBOLLADA
Instituto de Ciencias de Materiales de Madrid - CSIC
MICHEL F. ROSSIGNOL, DAVID W. TAYLOR,
DOMINIQUE GIVORD
Laboratoire de Magnétisme Louis Néel - CNRS

A dependência com a temperatura da coercividade e da viscosidade magnética em ímãs $NdDyFeB$ preparados via mechanical alloying foi estudada para temperaturas entre 25 e 500K. Os resultados foram discutidos em termos do modelo global de coercividade que fornece informações sobre as propriedades magnéticas no volume de ativação v_a , onde a inversão da magne-

tização se inicia. O aumento da anisotropia bem como a redução da magnetização associados com a substituição de Nd por Dy são fatores que levam ao aumento do campo coercivo. Contudo, a contribuição dos fatores microestruturais também deve ser considerada.

ANISOTROPIA MAGNETOCRISTALINA E REORIENTAÇÃO DE SPIN EM

$NdFe_{12-x}Mo_x$ E $NdFe_{12-x}Mo_xNy$ ($x=0.5, 1.0,$
 $2.0, 3.0, 4.0$ e $y=1$).

ELIS HELENA DE CAMPOS PINTO SINNECKER
LMBT - DFESCM - IFGW - Universidade Estadual de
Campinas - UNICAMP 13083-970 Campinas SP
XUAN CHAO KOU, ROLAND GRÖSSINGER
Institut für Experimentalphysik - TU Wien - Wiedner
Hauptstrasse 8-10 A-1040 Viena Áustria

$NdFe_{10}Mo_2$ cristaliza na estrutura $ThMn_{12}$ e apresenta uma reorientação de spin em aproximadamente 148 K. Nesse composto, os átomos de Mo são necessários para estabilizar a estrutura $ThMn_{12}$. Recentemente foi reportado que a estrutura $ThMn_{12}$ pode ser estabelecida em compostos $RFe_{12-x}Mo_x$ ($R = Y, Nd, Sm$) com a concentração de Mo variando de $x=0.5$ a 4.0. A magnetização de saturação do $YFe_{12-x}Mo_x$ aumenta com o decréscimo da concentração de Mo. Além disso, uma forte anisotropia magnetocristalina uniaxial foi reportada para $NdFe_{12-x}Mo_xNy$ em temperatura ambiente, e os valores do campo de anisotropia apresentam um aumento com a diminuição da concentração de Mo. Com a nitrogação, outras propriedades como temperatura de Curie e magnetização de saturação são também favorecidas. No presente trabalho, transições de reorientação de spin foram detectadas em $NdFe_{12-x}Mo_x$ medindo-se a dependência com a temperatura da susceptibilidade a.c. no intervalo de temperatura entre 4.2 K e 300 K. Nenhuma transição de reorientação de spin foi encontrada para $NdFe_{12-x}Mo_xNy$. A dependência com a temperatura do campo de anisotropia uniaxial foi medido em $NdFe_{12-x}Mo_x$ e $NdFe_{12-x}Mo_xNy$ no intervalo de temperatura entre 170 K e 550 K em um magnetômetro de campo pulsado, usando a técnica de "singular point detection" (SPD).

Caracterização e cálculo da Densidade de
Estados da Austenita envelhecida 27 anos.
ANTÔNIO VANDERLEI DOS SANTOS, MOACIR INDIO
DA COSTA JR
UFRGS

A análise Mössbauer do ferro fcc com átomos de carbono, localizados no sítio octaédrico (austenita), fornece o espectro Mössbauer de um material paramagnético. Porém realizando a análise Mössbauer em uma austenita forjada há 27 anos, notamos que existe o aparecimento no espectro Mössbauer de uma pequena

magnetização. Esta análise fornece subsídios para montarmos um modelo que podemos tratar teoricamente seu comportamento. Para realizarmos o estudo teórico vamos usar o método da combinação Linear de Orbitais Muffin-Tin (LMTO), de Andersen, com aproximação das esferas atômicas (ASA) e usando polarização de spin. neste modelo nós usaremos a parametrização de S. H. Vosko, para correlação e troca de um gás de elétrons. Da análise da transferência de carga e densidade de estados vamos entender melhor o que está acontecendo na estrutura magnética do material, e também obtermos uma melhor compressão teórica da sua estrutura.

Magnetic properties of some Heusler alloys

with Mn

CELMO MARQUES DA SILVA

UFSM

DELMAR BRANDÃO

UFRGS

AFFONSO GUIDÃO GOMES

CBPF/CNPq

Magnetic Heusler compounds have been extensively studied experimentally. The theoretical effort, besides electronic structure and hyperfine field calculations, was concentrated in establishing, for a given alloy composition, the type and stability of the magnetic order occurring at low temperatures.

The case of Mn compounds, which is very frequent, show peculiarities which help in constructing a simple model furnishing the origin and change by impurities of the interactions between Mn spins. Also, the description of the temperature dependence of the magnetization can be obtained by classical methods.

It has been shown from first principles calculations, by Kübler and collaborators [1], that for several Mn Heusler alloys, the spin up local Mn d -bands is completely filled, in contrast with the down spin one which is completely empty. This result suggest these authors to associate localized moments to Mn which in turn is coupled to the conduction electrons, via an effective exchange interaction.

Starting from this point of view, the problem is now reduced to the classical one, given an electronic structure, studying the linear response to an effective local magnetic field, generated by a Mn spin. The so induced polarization, interacts with the remaining Mn spins and the effective interaction between Mn spins can thus be derived.

The case of Heusler alloys can be described, within a two sub-lattice model with homothetic bands, in a similar way to that used for Laves intermetallics [2]. The typical experimental case considered here is X_2MnZ , where the sub-lattice $X(=Pd)$ contributes with a d -band, whereas to the Z sub-lattice is associate a p -band with larger band width. Inter sub-lattice hopping in this case is analogous to d - p hybridization. Using a

quite similar approach as in [2], the effects of disorder in the X sub-lattice can be included, and the concentration dependence of the indirect exchange coupling between Mn atoms can be calculated within CPA.

We illustrate numerically our model, firstly applying it to the case of pure compounds to fix some parameters and then consider, in the case of disordered compounds $(X_{1-x}X'_x)_2MnZ$, the changes in the Curie temperature, estimated by molecular field approach.

1. J. Kübler, A. R. Williams and C. B. Sommers, Phys. Rev. B28 (1983) 1745.

2. N. A. de Oliveira and A. A. Gomes, J. Mag. Magn. Mat. 114 (1992) 283.

DEPOLARIZAÇÃO DINÂMICA TRIDIMENSIONAL DE NEUTRONS APLICADA AO ESTUDO DE ESTRUTURA DE DOMÍNIOS EM FITAS FERROMAGNÉTICAS AMORFAS

JOÃO PAULO SINNECKER, REIKO SATO TURTELLI
LMBT - DFESCM - IFGW - Universidade Estadual de
Campinas - UNICAMP 13083-970 Campinas SP

GERARD BADUREK

Institut für Kernphysik - TU Wien - Wiedner Hauptstrasse

8-10 A-1040 Viena Áustria

ROLAND GRÖSSINGER

Institut für Experimentalphysik - TU Wien - Wiedner

Hauptstrasse 8-10 A-1040 Viena Áustria

A depolarização tridimensional (3d) de neutrons é uma poderosa técnica para o estudo estático e dinâmico de estruturas magnéticas. Em um experimento de depolarização 3d, o vetor polarização de um feixe de neutrons polarizado é analisado após ser transmitido através de um meio magnético. Durante a transmissão, a polarização é afetada pela magnetização local nos domínios magnéticos, sendo tal interação descrita por uma precessão de Larmor do vetor polarização em torno do vetor magnetização local. Como resultado deste tipo de medida, importantes informações a respeito da estrutura magnética no *bulk* do material podem ser extraídas, tais como o tamanho médio de domínios, direção média dos mesmos e magnetização média. Neste trabalho apresentaremos os princípios básicos desta técnica de medida e como ela pode ser utilizada no estudo estático e dinâmico da estrutura de domínios em fitas ferromagnéticas amorfas.

COMPORTAMENTO DA MAGNETIZAÇÃO EM "RECOIL CURVES" EM ÍMÃS DE

$SmCo_5$

DANIEL R. CORNEJO, FRANK P. MISSELL

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo,
Brasil

JESÚS M. GONZÁLEZ

Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid - CSIC,

Madrid, España

Recentemente, tem se observado que a magnetização em "recoil curves" em ligas nanocristalinas de Sm-Fe-Co de duas fases acopladas via interação de troca, é histerética, dependente do tempo e então, irreversível. Em materiais magnéticos convencionais de uma fase, observa-se que as variações da magnetização em "recoil curves" são independentes do tempo e atribuíveis a processos reversíveis. Fizemos medidas de magnetização em vários ímãs fabricados convencionalmente, com tamanho de grão médio de aproximadamente $8 \mu\text{m}$ e SmCo_5 como fase predominante. A caracterização magnética foi efetuada utilizando-se um magnetômetro de amostra vibrante acoplado a uma bobina supercondutora de campo máximo 90kOe . As curvas de histerese dos ímãs estudados mostram a presença de duas e três fases magnéticas. A 250K a desmagnetização das fases secundárias acontece na faixa de 5kOe a 20kOe (H_{cs}), e a correspondente a fase principal SmCo_5 ocorre perto dos 40kOe (H_{cp}). As "recoil curves" medidas perto de H_{cp} mostram um comportamento convencional reversível, porém, as medidas próximas a H_{cs} mostram grande incremento da magnetização e histerese e além disso, mudando a velocidade de variação do campo aplicado, é alterada a área encerrada pela "recoil curve" o que evidência um comportamento irreversível. O estudo deste comportamento foi estendido na faixa de temperaturas de 4.2K até 300K . Os resultados são comparados com os processos de desmagnetização em ligas nanocristalinas de Sm-Fe-Co. Trabalho parcialmente financiado por FAPESP, FINEP e CNPq.

Simulação de sistemas magnéticos em uma dimensão pelo método de Monte Carlo

MARÍLIA EMURA, FRANK P. MISSELL

Instituto de Física - USP

JESUS M. GONZÁLEZ

Instituto de Ciencia de Materiales - CSIC - Madrid

Em sistemas magnéticos, a microestrutura do material influencia fortemente as suas propriedades magnéticas. Assim, em ímãs permanentes, a interação entre os grãos das diferentes fases magnéticas determina seu campo coercivo, a magnetização remanente e o produto energético. Neste trabalho utilizamos o método de Monte Carlo - Metrópolis para simular o comportamento de sistemas magnéticos compostos por dois grãos magneticamente duros interfaceados por uma fase mole. É aplicado o formalismo micromagnético em um sistema constituído de uma cadeia linear de 120 momentos magnéticos, onde cada momento representa um plano infinito de momentos paralelos. São considerados quatro termos na energia interna do sistema: energia de anisotropia, energia Zeemann, energia de troca e energia magnetostática. Considerou-se que a interação de troca ocorre somente entre os primeiros vizinhos, e que os grãos possuíam anisotropia uniaxial. Simulações

preliminares utilizando o método de Monte Carlo, onde foram testadas as expressões para a energia do sistema mostraram resultados consistentes com o esperado. Trabalho parcialmente financiado por: FAPESP, FINEP E CNPq.

TÉCNICA DE "SINGULAR POINT DETECTION" APLICADA À DETERMINAÇÃO DA ANISOTROPIA MAGNETOCRISTALINA DE COMPOSTOS TR-Fe EM UM MAGNETÔMETRO DE CAMPO PULSADO.

ELIS HELENA DE CAMPOS PINTO SINNECKER

LMBT - DFESCM - IFGW - Universidade Estadual de

Campinas - UNICAMP 13083-970 Campinas SP

XUAN CHAO KOU, ROLAND GRÖSSINGER

Institut für Experimentalphysik - TU Wien - Wiedner

Hauptstrasse 8-10 A-1040 Viena Áustria

A técnica de "singular point detection" (SPD) prevê que uma singularidade correspondente ao campo de anisotropia magnetocristalina H_A pode ser detectada observando-se as sucessivas derivadas da magnetização M com respeito ao campo aplicado H , $d^n M/dH^n$. O formato da singularidade e a ordem da diferenciação na qual ela se torna aparente depende da simetria do eixo de difícil magnetização e da razão entre as constantes de anisotropia. Para compostos com anisotropia uniaxial essa singularidade pode ser encontrada em $n = 2$. A anisotropia magnetocristalina de compostos TR-Fe uniaxiais pode ser determinada usando-se a técnica de SPD mesmo em amostras policristalinas. Entretanto, se a direção de fácil magnetização dos compostos TR-Fe for perpendicular ao eixo- c (anisotropia planar), a determinação de H_A a partir de medidas de magnetização em amostras policristalinas se torna uma tarefa difícil. Neste trabalho, um método rotativo foi utilizado para alinhar magneticamente amostras finamente pulverizadas de TR-Fe com anisotropia planar. Esse processo permite alinhar os planos basais paralelamente uns aos outros. O valor de H_A nas amostras assim alinhadas pôde ser determinado por uma singularidade na curva de $d^2 M/dt^2$ vs. H com um campo pulsado aplicado perpendicular ao plano basal. A dependência de H_A com a temperatura para alguns compostos com anisotropia uniaxial (ex. $\text{TRFe}_{10}\text{Mo}_2$) e também com anisotropia basal (ex. Y_2Fe_{17} , $\text{Er}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$) será apresentada.

PROPRIEDADES MAGNÉTICAS E HIPERFINAS DE IMPUREZAS SUBSTITUCIONAIS DE Fe EM METAIS DE TRANSIÇÃO DE ESTRUTURA hcp .

ANGELA BURLAMAQUI KLAUTAU, SONIA

FROTA-PESSÔA

IFUSP-Instituto de Física da USP

Neste trabalho determinamos a estrutura eletrônica em torno de uma impureza substitucional de Fe em metais de transição de estrutura hcp. Para realizar estes cálculos utilizamos o método RS-LMTO-ASA (real space - linear muffin-tin orbital - atomic sphere approximation) que é de primeiros princípios dentro da aproximação de densidade local. Os resultados encontrados para a estrutura eletrônica e momento magnético são comparados com os resultados teóricos recentes da literatura, quando existentes. Calculamos também o comportamento do deslocamento isomérico e do campo hiperfino no sítio de Fe em hospedeiros hcp. Os valores determinados apresentam, em geral, excelente concordância com os resultados experimentais obtidos para esses sistemas.

Processos de Magnetização e Magnetorresistência no (110)[001]Fe-Si 3%.

MARCOS CARARA
DF/CCNE/UFMS

CLAUDIA MARIA HAETINGER, ALEXANDRE DA CAS
VIEGAS
IF-UFRGS

Neste trabalho é estudado a magnetorresistência de amostras de (110)[001]Fe-Si 3% como função da magnetização e do campo aplicado para vários ângulos entre o campo aplicado e o eixo cristalográfico [001]. As amostras apresentam magnetorresistência (MR) negativa, interpretada dentro do modelo de percolação da corrente em materiais cúbicos. São calculados também os coeficientes da magnetorresistência anisotrópica a partir das medidas de MR nas várias direções cristalográficas. As curvas de MR são colocadas em função da magnetização e comparadas às curvas de ruído Barkhausen das mesmas amostras, traçando um paralelo entre o processo de magnetização e a evolução da resistividade do material.

COMPORTAMENTO DA LARGURA DE LINHA COM A ESPESSURA EFETIVA DE UM ABSORVEDOR MÖSSBAUER

CELSON ARNILDO TIMM, JOSÉ FLÁVIO MARCELINO
BORGES, MOACIR INDIO DA COSTA JR
IF-UFRGS

Apresentamos neste trabalho um estudo do comportamento da largura de linha experimental Γ_{exp} com a espessura efetiva t_a de um absorvedor Mössbauer, no intervalo $0 < t_a \leq 10$. Pedacos de tamanho igual recortados de uma fita magnética de computador, constituída basicamente pelo spinel ferrimagnético $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ dopado com cobalto, foram usados como absorvedores. A variação da espessura foi obtida empilhando-se esses recortes em número crescente. O objetivo do trabalho foi o de testar a aplicação das fórmulas descritivas do alargamento da linha experi-

mental em função de t_a , e observar o seu comportamento no intervalo de descontinuidade $4 \lesssim t_a \gtrsim 5$, citado na literatura (1,2).

(1) P. Gütlich, R. Link and A. Trautwein, in: Mössbauer Spectroscopy and Transition Metal Chemistry, Springer-Verlag, Berlin, 1978.

(2) N.N. Greenwood and T.C. Gibb, in: Mössbauer Spectroscopy, Chapman and Hall Ltd., London, 1971. Trabalho parcialmente financiado por FINEP, CNPq, PROPEP, FAPERGS.

MAGNETÔMETRO A EFEITO KERR EM BAIXAS TEMPERATURAS

ADRIANA PEDROSA BISCAIA TUFALÉ, ANTONIO
DOMINGUES DOS SANTOS
USP, Instituto de Física

Em materiais ferromagnéticos a variação da magnetização com o campo magnético aplicado influenciam grandezas ópticas, produzindo variação na refletividade e na direção da polarização da luz refletida (Efeitos Kerr). Pois, os fenômenos magnéticos (devido aos spins eletrônicos) interferem, através do acoplamento spin-órbita, nas propriedades ópticas (devidas basicamente aos orbitais eletrônicos). Esses efeitos levam a sinais magneto-ópticos proporcionais à magnetização da amostra. As técnicas de magnetometria a efeito Kerr têm se mostrado bastante úteis na compreensão do processo de magnetização de filmes finos e multicamadas. Isto se deve a rapidez da medida e a não interferência do substrato sobre o resultado, que são problemas típicos em medidas com técnicas tradicionais. Outra característica relevante dos magnetômetros a efeito Kerr é sua dependência espectral, no nosso caso, que trabalhamos com luz vermelha ($\lambda = 670nm$), a informação obtida provém basicamente do processo de magnetização da sub-rede do metal de transição, quando se estuda filmes de Terra rara-Metal de transição. Apresentamos o desenvolvimento de um magnetômetro a efeito Kerr que opera em baixas temperaturas (4,2 a 300K) e campos magnéticos de até 2T. A amostra de filme fica em vácuo dentro de um criostato com janelas ópticas; o criostato permite a variação e controle da temperatura e opera com fluxo de hélio líquido. A parte do criostato que contém a amostra está na região entreferros de um eletroímã no qual podemos controlar o campo magnético aplicado no filme. 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 passa pelo polarizador, é focalizado na amostra, é refletido, passa pelo polarizador analisador e é detectado pelo fotodiodo. Trabalho parcialmente financiado por CNPq, FAPESP e FINEP.

MAGNETIC PROPERTIES OF THE

ALLENDE (CV3) METEORITE

TEREZA VERONICA VIEIRA COSTA, VICENTE
WALMICK ALMEIDA VIEIRA, MIGUEL ANTONIO
BORGES DE ARAUJO
Univ. Federal do Ceará

Mössbauer Spectroscopy was used to investigate the magnetic fraction of a sample of the Allende(CV3) meteorite. This meteorite contains primitive material which can provide information about physical processes in the early solar system, such as the presence of magnetic fields. The CV3 meteorites are very heterogeneous, both in texture and in composition and, due to this fact there are divergences about their magnetic mineral content. A room temperature Mössbauer spectrum of the magnetic fraction of Allende reveals the presence of at least three mineral phases: magnetite $H_2Fe_3O_4$, taenite (γ -FeNi) and kamacite (α -FeNi). Magnetic transitions in Allende samples were observed, by other techniques, at 50°C - 70°C, 150°C, 320° and 590°C - 610°C. Here we report the results of investigation of these transitions by means of Mössbauer Spectroscopy [1,2].

References

[1] N. Sugiura, M. Lanoix and D.W. Strangway, *Phys. Earth Planet. Inter.*, 20, 342(1979)

[2] P. Wasilewski, *Phys. Earth Planet. Inter.*, 26, 134(1981).

†Work partially financed by Brazilian Agencies CNPq and FINEP.

SUSCEPTIBILIDADE MAGNÉTICA AC DA LIGA $Y_{0.33}Fe_{0.67}$ PRODUZIDA ATRAVÉS DE MOAGEM.

E. NUNES, M. T. D'AZEREDO, C. LARICA, K. M. B. ALVES, C. M. B. CARVALHO
UFES - CCE - DEPT. DE FÍSICA

A moagem severa do composto intermetálico YFe_2 , produzido inicialmente através da fusão de seus componentes estequiométricos em forno a arco, leva ao aparecimento da liga amorfa $Y_{0.33}Fe_{0.67}$. Essa ocorrência foi observada em trabalhos anteriores utilizando as técnicas de difração de raio-X, espectroscopia Mössbauer e Ressonância Magnética Nuclear pulsada. No presente trabalho, as medidas de susceptibilidade AC em função da temperatura mostram uma redução na temperatura de ordenamento magnético (540 K), com o aumento do tempo de moagem. Percebe-se a existência de uma cinética de formação de uma nova fase magnética, quando se observa a dependência da susceptibilidade magnética AC com o tempo de moagem. Para a amostra moída durante 50 horas a dependência com a temperatura da susceptibilidade AC revela um pico alargado independente da frequência a 80 Kelvin. Medidas da susceptibilidade magnética AC na presença de um campo magnético DC em várias temperaturas revelam uma dependência não linear e decrescente de χ_{ac}

com o campo H.

EFEITO DA PULVERIZAÇÃO ULTRAFINA NAS PROPRIEDADES ESTRUTURAIS, MAGNÉTICAS E HIPERFINAS DE ALGUMAS LIGAS METÁLICAS.

A. BIONDO, C. LARICA, K. M. B. ALVES
UFES - CCE - DEPT. DE FÍSICA

E. BAGGIO-SAITOVITCH, A. P. GUIMARÃES, C. V. B. TRIBUZY
CBPF

A técnica de moagem para pulverização de materiais vem sendo utilizada nos últimos anos para a produção de ligas metaestáveis amorfas e nanocristalinas. Essas ligas podem ser obtidas a partir da moagem de compostos cristalinos ou por reação de estado sólido da mistura em pó dos elementos puros, na proporção desejada. Nesse trabalho estudamos os efeitos da moagem severa nas propriedades estruturais, magnéticas e hiperfinas dos compostos intermetálicos $GdFe_2$, $GdCo_2$ e YCo_2 . Estes compostos foram produzidos em forno de fusão a arco voltaico e submetidos a tratamento térmico; essas amostras iniciais foram caracterizadas por difratometria de raios x, espectroscopia Mössbauer e ressonância magnética nuclear pulsada. Posteriormente cada composto foi selado no interior de um recipiente de moagem, sob uma atmosfera de argônio, junto com um cilindro de aço especial de alta dureza. Esse recipiente foi então fixado ao sistema de travamento de uma mesa vibratória de uma máquina comercial marca Renard. As amostras pulverizadas foram retiradas do recipiente a tempos de moagem predeterminados, sempre sob atmosfera de gás argônio. Os materiais recolhidos nesses tempos foram armazenados em nitrogênio líquido para reduzir os efeitos de difusão atômica e de relaxação estrutural. Cada amostra, correspondente a um tempo de moagem, foi analisada pelas técnicas físicas indicadas acima. Os resultados obtidos a temperatura ambiente mostram a redução no tamanho de grão, mudanças na estrutura cristalina e redução no campo magnético hiperfino medido nos núcleos de Fe.

ESTUDO DO COMPORTAMENTO MAGNETO-ÓPTICO DE UMA REDE DE DIFRAÇÃO MAGNÉTICA

CARLOS EDUARDO SANTI, ANTONIO DOMINGUES DOS SANTOS

Instituto de Física, Universidade de São Paulo
JOSÉ AUGUSTO A. M. PEREIRA
Laboratório de Microeletrônica, EPUSP

Redes de difração magnéticas uni- e bidimensionais, em escala micrométrica, foram produzidas por meio de fotolitografia e deposição por "electron-beam". Várias redes foram produzidas com diversos tipos de ma-

teriais, dentre os quais estão o cobalto, o "permalloy" (Fe-Si) e uma liga de ítrio cobalto conseguida por meio da deposição simultânea destes elementos. O período da rede tem o dobro da dimensão da partícula ou tira e a espessura do filme é de pelo menos 1000Å para evitar o aparecimento do sinal refletido no substrato. Um feixe de laser, ao incidir sobre estas redes, sofre múltiplas reflexões de Bragg. Para uma geometria semelhante à do efeito magneto-óptico Kerr transversal, as intensidades dos feixes difratados sofrem variações que dependem da intensidade do campo magnético aplicado. Os "loops" de histerese fornecidos por estes feixes possibilitam a análise das estruturas de domínios das partículas individuais. Com o auxílio de um microscópio óptico polarizador, no qual foi acoplado um sistema de processamento de imagens, também é possível obter informações sobre a estrutura de domínios das amostras. Serão discutidas as dificuldades referentes à produção destas redes e algumas imagens de estruturas de domínios obtidas por microscopia óptica serão apresentadas. Trabalho parcialmente financiado por FAPESP, FINEP e CNPq.

CONTRIBUTION OF THE *d* ELECTRONS TO THE TRANSFERRED HYPERFINE FIELD IN YFe_2

R. SARTHOUR, A. P. GUIMARÃES
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

The transferred hyperfine fields have been measured in the pseudo-binary intermetallic compounds $R_xY_{1-x}Fe_2$ ($R=Gd, Tb, Ho, Dy, Er$ and Tm) at the Y site, through the NMR of ^{89}Y , at 4.2K. The ^{89}Y nuclei have no electric quadrupole moment and the yttrium ion is not magnetic. The magnetic hyperfine field at the Y site is purely transferred. The results were analyzed in terms of the contributions from R ion: a) due to the polarization of the conduction electrons and b) through the polarization of common Fe neighbors. The term of the transferred hyperfine field due to the polarization of the Fe neighbors is found to correlate with the computed atomic exchange integrals J_{4f-5d} . The possibility of distinguishing *d* and *s* contributions to the transferred hyperfine fields through this type of experiment is discussed.

NMR STUDY OF THE AS-CAST AND HEAT TREATED ALLOY $Co_{74.26}Fe_{4.74}Si_{2.1}B_{18.9}$

DOMINGO ALIAGA-GUERRA¹, L. IANNARELLA

CBPF

C. KIM, R. C. O'HANDLEY

*Massachusetts Institute of Technology, Cambridge 02139,
USA*

A. P. GUIMARÃES

CBPF

Results of a pulsed NMR study of the soft ferromagnetic

amorphous alloy $Co_{74.26}Fe_{4.74}Si_{2.1}B_{18.9}$ in the as-cast and the heat treated (410°C - 12 minutes) states are reported. Very intense resonances, consistent with an alloy composition close to zero magnetostriction are observed in the frequency region 10-110 MHz (range of the present study). The dependence of the signal intensity on the rf power level suggests the existence of at least two magnetic regions with different local anisotropies. We identify NMR lines in two frequency ranges: a) 10-50 MHz, which probably come from ^{57}Fe and ^{29}Si nuclei in Fe-enriched regions, and b) for $f > 50$ MHz, lines from ^{59}Co (and probably ^{11}B) in Co-rich crystalline-like environments with short range order as in Co_2B (50-70 MHz), Co_3B (70-85 MHz) and $Co(B)$ solid solutions. With the heat treatment, the lines from the Co_3B -like environments become narrower. ¹Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Ingeniería, P.O. Box 31-139, Lima, Perú.

A ^{57}Fe NMR STUDY OF THE NITROGENATION OF Ce_2Fe_{17} .

DOMINGO ALIAGA-GUERRA¹

CBPF

S. GAMA

UNICAMP

A. P. GUIMARÃES

CBPF

The ^{57}Fe NMR of $Ce_2Fe_{17}N_x$ ($x = 0, 0.5, 1.0, 1.5$) was measured in the ordered magnetic state at 4.2 K. For $x = 0$, resonances coming from all Fe sites in the rhombohedral structure and corresponding to an in-plane magnetic anisotropy have been consistently identified in the 30 - 45 MHz range. Nitrogenation introduces severe modifications in the ^{57}Fe NMR spectra: new lines appear in the ranges 37-46 MHz and 47-54 MHz. For every nitrogenated sample, even for the less concentrated one, three sets of ^{57}Fe NMR lines have been observed. It is proposed: a) that these groups of resonances come from regions in the samples where Ce atoms have 0, 2, and 3 nitrogen atoms as near neighbors, and b) that nitrogenation is a very inhomogeneous process. The dependence of the signal intensity on the rf power evidenced a transition to a state with different magnetic anisotropy. ¹ On leave from Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Ingeniería, P.O.Box 1301, Lima, Perú

THERMOPOWER AND ELECTRICAL RESISTIVITY MEASUREMENTS ON FERROMAGNETIC METALLIC GLASSES

ARLEI BORBA ANTUNES, MARIO NORBERTO

BAIBICH

Instituto de Física - UFRGS

We have studied the electronic transport properties of the series of ferromagnetic amorphous alloys of a type

$Co_{75-x}Fe_xSi_{15}B_{10}$ ($25 \leq x \leq 75$) through measurements of the electrical resistivity and thermopower as a function of temperature, from 4.2K to 300K. The resistivity was measured using a four contact, low frequency lock-in technique, and the thermopower through an integral method, also using a Lock-in Amplifier, in a feedback driven circuit built by us for these experiments. The absolute value of the resistivity is high ($134\mu\Omega cm \leq \rho \leq 155\mu\Omega cm$) and it changes by not more than 3% of the room temperature value for all samples. The electrical resistivity shows a minimum at low temperatures (28K-48K) with a dominant logarithmic behaviour below this, and a quadratic temperature dependence above the minimum. The thermopower is always negative, and shows a linear behaviour at low temperatures, deviating from this closer to room temperatures. These results suggest that, besides the electronic scattering from structural disorder an important magnetic contribution has to be considered. Neither of the above interactions is capable to explain, alone, the observed data. This magnetic contribution is most probably due to coherent electron-magnon scattering, since no evidence of incoherent electron-magnon scattering was observed.

e-mail: antunes@ifl.if.ufrgs.br

Magnetoimpedância Gigante em Ligas

Ferromagnéticas $Co_{75-x}Fe_xSi_{15}B_{10}$

CEZAR SOARES MARTINS, FERNANDO LUIS ARAUJO MACHADO, SERGIO MACHADO REZENDE

Departamento de Física - UFPE

MARIA VIRGINIA P. ALTOÉ, ANTONIO DOMINGUES SANTOS, FRANCK PATRICK MISSELL

Instituto de Física - USP

No presente trabalho apresentamos medidas de magnetoimpedância gigante (GMI) a temperatura ambiente, em ligas amorfas ferromagnéticas $Fe_{75-x}Co_xSi_{15}B_{10}$ para $x = 2.5, 4.6$ e 6.5 . O campo magnético dc foi variado de 0 a $\pm 400e$ e a amplitude e frequência da corrente ac utilizada nessas medidas foram variadas de 1 a 25mA e entre 1kHz e 25MHz, respectivamente. Valores máximos de GMI da ordem de 131% foram obtidos para campos magnéticos menores que 100e. Estes valores fazem com que esta liga tenha um grande potencial para aplicações em sensores magnéticos. Medidas da susceptibilidade magnética ac nessas ligas não mostram variações significativas para frequências abaixo de 100kHz. Estudamos também a estrutura de domínios, a dependência da GMI em função do tratamento térmico e a sua relaxação temporal. Modelos teóricos serão apresentados. Apoio FINEP, PADCT, CNPQ E FACEPE

ON VERWEY TRANSITION IN NIOBIUM MAGNETITE BY MÖSSBAUER SPECTROSCOPY

EUSÉBIO C. TORRES-TAPIA, P. H. DOMINGUES, AND J. M. NETO
UFRJ

The ordering of bivalent, trivalent iron ions in magnetite(Fe_3O_4) below the Verwey temperature $T \approx 120$ K has been the subject of research for many years, since the phenomenon interconnects problems of the charge transfer, magnetism and lattice symmetry in oxides. As a result of numerous investigations, it has been established that this type of the ordering is accompanied by monoclinic distortions of the original cubic crystal, by corrected atomic displacements. The presence of impurities atoms or vacancy in magnetite causes a considerable lowering of the ordering temperature (T_v). A careful Mössbauer investigation of the influence of Nb^{5+} substitution on the Verwey transition of the spinel system $Nb_xFe_{3-2x}O_4$, with $0 < x < 0.15$, has been carried out showing a decreasing transition temperature with increasing composition x. By Mössbauer Spectroscopy(MS) at temperature T between their respective $95 < T_v(K) < 98$, all spectra were decomposed in to tetrahedral (A site) and octahedral (B site) components, the obtained result are consistent with fact that at low temperatures above the T_v the spin lie along a domain's [100] axis.

Reference

1. V. P. Romanov, V. D., Checherskii and V. V. Eremenko, Phys. Stat. sol. 31, (1969) K153
2. Special issue : The Verwey transition, Philosophical Magazine B42 (1980)No 3.
3. G. Haley, J.M. Mullen, and J.M. Honing : Sol. State Comm. 69(1989)285-287
4. J. L. Dorman, C. Djega-Mariadassou, and V. B. Braber: Proc. ICAME'81 Ed. Acad. of Sc. of India (1982). pag 196-198.

MODIFICAÇÕES NAS PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E MAGNÉTICAS DE LIGAS R_2Fe_{17} DEVIDO A ADIÇÕES DE FLÚOR OU CLORO

FERNANDO AUGUSTO BATISTA, LUIZ ORLANDO LADEIRA, JOSÉ DOMINGOS ARDISSON, LUIZ FERNANDO ETRUSCO MOREIRA, ABA ISRAEL COHEN PERSIANO

Universidade Federal de Minas Gerais

A comunidade científica envolvida com materiais magnéticos tem demonstrado crescente interesse

na pesquisa sobre as alterações nas propriedades magnéticas de ligas R_2M_{17} (R=Terra rara, M=metal 3d) devido a adições intersticiais de átomos C, H e/ou N. Estendendo nossos estudos sobre a nitrogenação de compostos 2:17, abrimos recentemente uma linha de pesquisa sobre a influência de novas adições intersticiais àqueles compostos. Divulgamos aqui resultados inéditos obtidos pela adição de halogênios a este tipo de material. Os dados obtidos até o momento, através de espectroscopia Mössbauer e difratometria de raios-X, mostram que a incorporação de flúor a ligas R_2Fe_{17} (R=Pr, Nd ou Sm) não muda a estrutura romboédrica desses compostos mas aumenta anisotropicamente os parâmetros de rede com $(\Delta a/a) > (\Delta c/c)$. Tal alteração induz o aumento das respectivas temperaturas de Curie e conseqüentemente dos campos hiperfinos medidos à temperatura ambiente. Comparamos os efeitos causados pela adição do cloro com aqueles provocados pela incorporação de flúor e discutimos os efeitos da interação química entre os elementos intersticiais e a matriz.

ACOMPANHAMENTO DO PROCESSO DE NITROGENAÇÃO DE LÂMINAS DE Pr_2Fe_{17} POR ESPECTROSCOPIA MÖSSBAUER DE RETROESPALHAMENTO

AGOSTINHO AURÉLIO GARCIA CAMPOS, WESLEY SILVA XAVIER, JOSÉ DOMINGOS ARDISSON, HANS-DIETER PFANNES, ABA ISRAEL COHEN PERSIANO

Universidade Federal de Minas Gerais

O modo como átomos nitrogênio são incorporados a ligas R_2M_{17} (R=terra-rara; M=metal-3d) não é totalmente claro, tendo sido discutido na literatura especializada com base em dois modelos de difusão: a propagação de uma frente de difusão com estequiometria definida ($R_2M_{17}N_3$) ou a difusão de átomos N em solução sólida simples. No presente trabalho nitretamos lâminas de Pr_2Fe_{17} e medimos a evolução do processo por intermédio de espectroscopia Mössbauer de retroespalhamento de elétrons (CEMS) e de raios-X com análise em diferentes profundidades. Os resultados são discutidos em termos da formação de uma fase estequiométrica, de uma distribuição de campos hiperfinos associada a deformações da rede original e da fase 2:17 não nitretada e não deformada.

MÖSSBAUER STUDIES ON THE INTERMETALLIC PSEUDO-TERNARY $Ce(Ru_{1-x}Fe_x)_2Ge_2$ SERIES OF COMPOUNDS.

MAGDA BITTENCOURT FONTES, EDSON CAETANO PASSAMANI, MOHAMED EL-MASSALAMI, ELISA MARIA BAGGIO-SAITOVITCH

CBPF

^{57}Fe Mössbauer measurements on the $Ce(Ru_{1-x}Fe_x)_2Ge_2$ series of compounds ($0 < x < 1$) were performed at 300 K and 4.2 K. $CeRu_2Ge_2$ is a ferromagnet at $T_c = 7.5$ K with localized $Ce-f$ magnetic moments. $CeFe_2Ge_2$ is a Pauli paramagnet in the whole range of temperatures from 2 to 300 K. Mössbauer spectra of the samples presents a quadrupolar interaction with an asymmetry that was due to texture effects. Moreover, at 4.2 K, and for $x < 0.8$, the observed spectra could be well fitted with a small transferred hyperfine field (< 1 T) that decreased with Fe concentration. This agrees with our ac susceptibility observation that the transition temperature and the effective moment (Curie-Weiss) goes down systematically, showing that the localized character of the Ce moments was decreasing with Fe concentration. For $x > 0.7$, no transferred hyperfine field was observed, consistent with the absence of localized Ce moments supported by the occurrence of Pauli paramagnetism in a wide range of temperatures.

Structural and Magnetical Study of $Fe_{64.5}Co_{18}SiB_{16}C_{0.5}$ by Mössbauer Spectroscopy

CARMEM SILVIA DE MOYA PARTITI, HERCÍLIO RODOLFO RECHENBERG
Instituto de Física da USP, São Paulo
JESUS MARIA GONZALEZ, ANIT K. GIRI
CSIC, Madrid

The alloy with composition (nominal) $Fe_{64.5}Co_{18}SiB_{16}C_{0.5}$ (VITROVAC) was prepared by melt spinning. The as-quenched samples are amorphous. The crystallization is accomplished through two exothermic processes taking place at 725 K and at 815 K. Anneals were carried out at temperatures slightly above that of the first and second crystallization process and other kind of treatment (ball milling) with the sample milled for two hours, four hours and eight hours. Milled samples seem to be specially interesting due to their very small grain size. Mössbauer measurement have been performed in VITROVAC: I) as-milled amorphous, II) annealed at 725 K and III) annealed at 815 K. The spectra of samples I and II have common features of many ferromagnetic alloys, showing a strong line broadening due to hyperfine fields and isomer shift distributions. The spectra were fitted with gaussian distributions of hyperfine fields. On other hand the Mössbauer spectra of sample III is typical example of crystalline spectra and was fitted with three different hyperfine fields related to one FeCo site and two Fe_2B sites. We also used Mössbauer Spectroscopy to determine the relative proportion of amorphous and

crystalline phases in the treated samples (high energy mechanical treatments - ball milling).

Absorção de oxigênio pela fase $Fe_{17}Sm_2$.

S. GAMA, C. C. COLUCCI, C. A. RIBEIRO, N. L.

SANJURJO, C. CAMPOS, E. DE MORAIS

UNICAMP - IFGW - DFESCM - Laboratório de Materiais e Baixas Temperaturas.

F. A. O. CABRAL

UFRN, Depto. de Física Teórica e Experimental.

Desde a descoberta de Coey de que as fases $17:2$ absorvem 3 átomos de nitrogênio por fórmula unitária, tem sido objeto de estudo a absorção de outros átomos que se localizam intersticialmente na rede cristalina, como o hidrogênio e o carbono. No caso do nitrogênio ocorre a expansão da rede sem alterar a estrutura cristalográfica, porém há a modificação da precipitação direta da fase saturada, sem a formação de solução sólida. É de se esperar que para as mesmas condições experimentais de absorção o oxigênio se comporte de modo similar. Entretanto estudos anteriores em sistemas de ligas Fe-Pr e Fe-Nd com absorção a temperaturas a partir de $600^\circ C$, mostraram que ocorria a decomposição das fases em óxidos ou óxidos mistos. Foram efetuados experimentos de absorção de Oxigênio para a fase $Fe_{17}Sm_2$ entre as temperaturas de $200^\circ C$ a $500^\circ C$. Foi observado que o limite de saturação depende da temperatura, sendo de 3 at/fu a $200^\circ C$, 12.8 at/fu a $300^\circ C$, 20.3 at/fu a $400^\circ C$ e 28.5 at/fu a $500^\circ C$. Isto mostra que acima de $200^\circ C$ a fase é profundamente alterada pela absorção de oxigênio. Amostras com absorção a $200^\circ C$ foram tratadas termicamente a $500^\circ C$ por 40h. Os resultados mostram que as amostras tratadas consistem de $Fe_{17}Sm_2$, Fe e Sm_2O_3 . Estudos por metalografia e os dados de susceptibilidade indicam a hipótese de uma mistura de $Fe_{17}Sm_2$ e $Fe_{17}Sm_2O_3$.

Medida do Campo Hiperfino Magnético na

^{111}Ag no sítio do Pd na liga de Heusler

Pd_2MnSn .

ARTUR WILSON CARBONARI

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, IPEN, São Paulo, SP.

HEINZ HAAS

Hahn-Meitner Institut, Berlin, Alemanha.

A ocorrência de ordem magnética em compostos que contém elementos não magnéticos têm atraído um grande interesse, e dentro desta classificação situam-se as ligas de Heusler que têm sido sistematicamente usadas como sistemas para o estudo do magnetismo localizado. As ligas de Heusler do tipo Pd_2MnZ possuem a estrutura ordenada $L2_1$ e, dependendo do elemento Z

exibem tanto o ferromagnetismo como o antiferromagnetismo. A liga Pd_2MnIn possui um interesse particular pelo fato de ter ordem antiferromagnética abaixo de 142 K com um momento magnético de $4,3 \mu_B$ localizado no átomo de Mn. A substituição de In pelo Sn conduz ao ferromagnetismo o que leva a supor que as propriedades magnéticas destas ligas variam de acordo com a concentração de elétrons. Recentemente foram sintetizadas ligas do tipo Pd_2TiZ , onde $Z = Al, In$ e Sn que formam a estrutura de Heusler $L2_1$ nas quais nenhum de seus componentes possuem usualmente momento magnético localizado. A liga Pd_2MnIn tem estrutura magnética com planos paralelos nos quais os íons de Mn têm direções de spin alternados. Deste modo o campo magnético efetivo nos sítios do Mn e do In são nulos, mas deve ser diferente de zero no sítio do Pd. Portanto, para a medida do campo hiperfino magnético pela técnica de correlação angular perturbada, é necessário um núcleo de prova que substitua o Pd. Para tanto, utiliza-se o núcleo de ^{111}Ag que é produto do decaimento β^- do ^{111}Pd que, por sua vez é produzido pela irradiação do ^{110}Pd com neutrons num reator nuclear. A meia-vida do nuclideo é de 7,4 dias e a cascata γ usada para a correlação angular é aquela cujas energias são 96-247 keV, com nível intermediário de 84 ns de vida média o qual é o mesmo usado na bem conhecida cascata do decaimento do ^{111}In - ^{111}Cd . Nas medidas realizadas no Instituto Hahn-Meitner em Berlim, os núcleos de ^{111}Ag foram obtidos pela irradiação de ^{110}Pd enriquecido com neutrons no reator nuclear BR3 e pela posterior separação química dos núcleos da Ag do restante dos núcleos de Pd. Após a obtenção da ^{111}Ag livre de carregador uma gota da suspensão destes núcleos em água era colocada sobre a superfície de uma lâmina muito fina (0,5 mm) previamente cortada e polida. Em seguida a amostra foi selada em atmosfera de Ar e colocada em um forno de resistência para difusão a $800^\circ C$. Foi medida a liga Pd_2MnSn a temperatura do nitrogênio líquido, a temperatura ambiente e as temperaturas de 25 K, 140 K e 160 K com campo externo polarizador. O campo hiperfino magnético obtido a 25 K foi de 290 ± 3 kG.

Estudo do Campo Hiperfino Magnético nas ligas de Heusler $Co_2Y_xY_{1-x}Z$ ($Y=Ti, Nb, V, Cr$; $Z=Al, Sn$)

WILLI PENDEL JR, ARTUR WILSON CARBONARI,

RAJENDRA NARAIN SAXENA

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, IPEN

As ligas de Heusler são compostos intermetálicos ternários com composição química X_2YZ , onde $X=Co, Ni, Cu, Pd, Au$; $Y=Mn, Sc, Ti, Zr, Hf, Nb, V, Ta, Cr$; $Z=Al, Ga, Ge, In, Sn, Si, Sb$. Estas ligas são

geralmente ordenados cubicamente com estrutura tipo $L2_1$, sendo a grande maioria ferromagnética. As medidas de Campos Hiperfinos Magnéticos (CHM), atuando nos sítios magnéticos e especialmente em sítios não magnéticos fornecem importantes informações sobre a polarização dos elétrons de condução induzido pelos átomos magnéticos nos sítios atômicos vizinhos. Essas informações contribuem para a compreensão dos mecanismos que resultam na ordem magnética das ligas de Heusler. Um aspecto interessante, é que as ligas de Heusler podem ser sintetizadas a partir de 4 elementos, formando ligas quaternárias de modo que a estequiometria e a estrutura da liga não seja alterada. Isto permite estudar o efeito da concentração eletrônica sobre campos hiperfinos gerados de uma forma mais sensível. As ligas $Co_2Y_x^1Y_{1-x}^2Z$ com $0.2 \leq x \leq 0.8$, a partir de componentes metálicos com pureza de 99.9% em proporções estequiométricas. A determinação do CHM foi feita pela técnica de correlação angular γ - γ perturbada (TDPAC) através da cascata gama no ^{181}Ta . Para esta finalidade foram substituídos $\sim 0.1\%$ de átomos Y por átomos de ^{181}Hf radioativo. As medidas de TDPAC foram realizadas a 77 K (fase ferromagnética) e 623 K (fase paramagnética). Os resultados, permitem concluir que os mecanismos responsáveis pelos CHM neste tipo de ligas de Heusler são similares aos de outros ambientes magnéticos como Fe, Co e Ni, com impurezas diluídas.

Filmes Finos da Fase $Fe_{17}Sm_2$ Obtidos por Flash Evaporation

ALEXANDRE URBANO, SÉRGIO GAMA
UNICAMP

JAIR SCARMINIO

Universidade Estadual de Londrina

Muitos materiais são candidatos a aplicação como ímãs permanentes. Hoje em dia a investigação está voltada para as fases $Fe_{17}TR_2$ (TR= terras-raras). Compostos $FeTR$, ricos em ferro, não apresentam grande potencial como ímã permanente, mas dentre os compostos estáveis, os que possuem maior magnetização de saturação são as ligas $Fe_{17}TR_2$. Isto propiciou uma análise mais aprofundada destes compostos. A estrutura cristalina das fases 2-17 é romboedral (Th_2Zn_{17}), para as chamadas terras-raras leves (Nd, Sm), e hexagonal (Th_2Ni_{17}), para as chamadas terras-raras pesadas (Dy, Ho). Em 1990, D. Coey estudou os efeitos de uma nova impureza intersticial nas fases 2-17, nitrogênio. Desde então a investigação nestas fases é intensa. Além de a T_C aumentar significativamente ($\sim 400K$) e aumentar a magnetização de saturação, quando a terra-rara é samário a anisotropia passa de basal para axial, com campo de anisotropia de $14T$. O aumento em volume da célula unitária é de aproximadamente 7%, e estas fases incorporam até três átomos de por fórmula unitária. O aumento na T_C e no campo

de anisotropia do composto $Fe_{17}Sm_2N_x$ ($2 < x < 3$) torna-o um material promissor como ímã permanente, já que as outras terras-raras mesmo depois de nitretadas continuam a ter anisotropia magnetocristalina planar. Devido à sua alta anisotropia, este composto tem também sido investigado na forma de filmes. Filmes deste composto com coercividades maiores do que $20kOe$ têm sido obtidos com anisotropia perpendicular. Antes de serem nitretados exibem uma coercividade de $0.75kOe$, anisotropia planar e magnetização de saturação de aproximadamente $110emu/g$. Nossos experimentos têm sido feitos no intuito de se obter as fases $Fe_{17}Sm_2$ na forma de filmes finos utilizando a deposição "flash evaporation". A amostra é cristalizada in-situ, mas a absorção de gás é feita em câmara do tipo Sieverts, que permite controle da quantidade de gás a ser absorvida, quando se deseja as fases $Fe_{17}Sm_2N_x$ ($0 < x < 3$).

ESTUDO DO SISTEMA BINÁRIO $Fe-Pr$ NA REGIÃO RICA EM Pr

FRANCISCO JAVIER DE HOYOS, SÉRGIO GAMA,
CARLOS ALBERTO RIBEIRO, FRANCISCO DE ASSIS
OLÍMPIO CABRAL, ADELINO DE AGUIAR COELHO
UNICAMP

O presente trabalho visa a apresentação e discussão dos resultados recentemente obtidos no estudo do sistema binário $Fe-Pr$ na região rica em Pr. A Análise Térmica Diferencial do sistema $Fe-Pr$ apresenta dois eventos térmicos sequenciais em torno da temperatura da reação eutética, separados por aproximadamente $10^\circ C$, para ligas cuja composição varia desde próximo à composição de $Fe_{17}Pr_2$ até próximo do Pr puro. Além disto, o sistema $Fe-Pr$ apresenta fases metaestáveis magneticamente ordenadas para estas mesmas ligas quando solidificadas rapidamente. A região rica em Pr do sistema $Fe-Pr$ foi estudada pelo método de Análise Térmica de Smith (ATS), técnica normalmente mais sensível que os métodos de termoanálise usuais. Os resultados obtidos nas ATS's, somados àqueles obtidos em análise termomagnética, análise por metalografia óptica e microanálise eletrônica permitem concluir que: 1) as fases metaestáveis magneticamente ordenadas, presentes nas ligas solidificadas rapidamente, se decompõem a partir de aproximadamente $540^\circ C$; 2) existe um campo intermediário, de duas fases, entre a linha de reação eutética e o campo $L + Fe_{17}Pr_2$; 3) existe uma fase estável de estequiometria aproximada Fe_2Pr_9 , situada nas vizinhanças da temperatura de reação eutética e num intervalo de temperatura provavelmente estreito. Recentemente foram feitas análises térmicas de ligas de $Fe-Pr$ ricas em Pr utilizando um Calorímetro Calvet comercial. Os resultados destas análises estão de acordo com as conclusões acima, porém não foi obtida a fase Fe_2Pr_9 . Em contrapartida, foi encontrada uma segunda fase

estável com composição $Fe_{70}Pr_{30}$. Esta segunda fase também foi obtida em experimentos de crescimento lento de monocristais de $Fe-Pr$, reforçando o fato de que realmente tratar-se de uma fase estável. (Apoio FAPESP/CNPq).

CRESCIMENTO DE MONOCRISTAIS DAS FASES $Fe_{17}R_2$, $R=TERRAS RARAS$, PELO MÉTODO BRIDGMAN

A. A. COELHO, S. GAMA, C. A. RIBEIRO, N. L. SANJURJO, C. CAMPOS, A. D. M. CAVAGIS
Instituto de Física Gleb Wataghin, Unicamp.

Apresentamos neste trabalho os resultados parciais de um programa de pesquisa destinado a produzir monocristais das fases $Fe_{17}R_2$, $R =$ terras raras. Os trabalhos iniciaram-se pela obtenção de cadinhos de CaO , R_2O_3 , $R = Nd$ e Sm , e CaF_2 . Observou-se que as terras raras reagem com o CaO decompondo-o, formando R_2O_3 e evaporando Ca , nas temperaturas de trabalho. Utilizando cadinhos de CaF_2 fizemos tentativas de crescer monocristais das fases contendo terras raras leves, $Fe_{17}Ce_2$, $Fe_{17}Pr_2$, $Fe_{17}Nd_2$, $Fe_{17}Sm_2$, sem sucesso, devido a impurezas e ao grande coeficiente de dilatação do CaF_2 . Utilizando cadinhos de Nd_2O_3 e Sm_2O_3 observou-se que as terras raras leves (Ce , Pr , Nd , Sm e Gd) corroem o cadinho, resultando em amostras policristalinas com grande quantidade de óxido em seu interior. As terras raras pesadas (Er , Dy e Ho) têm comportamento diferente, não dissolvendo esses cadinhos. No caso destas últimas terras raras conseguiu-se monocristais de boa qualidade. Os monocristais foram caracterizados por metalografia retro-reflexão de Laue (radiação Fe).

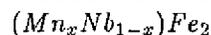
Propriedades Eletrônicas de Warvickitas de $MgTiOBO_3$

DANILO CATO MARCUCCI MARQUES, ENRIQUE V. ANDA, ANDRÉA LATGÉ
Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense, Niterói-RJ

Propomos neste trabalho um estudo teórico das propriedades eletrônicas do composto $MgTiOBO_3$ cuja forma cristalográfica é conhecida como Warvickitas. Esta estrutura é caracterizada por fitas que crescem ao longo da direção do eixo c onde os íons metálicos (Mg e Ti) se localizam de forma aleatória no centro de

octaedros formados por átomos de Oxigênio. Recentemente, estes compostos foram identificados como pertencentes a uma nova família de sistemas inorgânicos que apresentam magnetismo desordenado unidimensional. O sistema é descrito por um Hamiltoniano do tipo Tight Binding com interações não nulas apenas entre átomos primeiros vizinhos e a interação coulombiana nos átomos de Ti e Mg é tratada na aproximação de Hubbard usando-se o formalismo da função de Green. A densidade de estados eletrônicos local é obtida em diferentes sítios cristalográficos e uma análise da estabilidade do sistema em função da concentração de Ti é apresentada.

ESTUDO POR EFEITO MÖSSBAUER E SUSCEPTIBILIDADE DC DO COMPOSTO INTERMETÁLICO FASE DE LAVES



JOÃO ALBERTO VALCANOVER, CLEDERSON PADUANI, JOÃO CARDOSO DE LIMA
UFSC

IRENO DENICOLÓ
UFPR

JOÃO M. M. BATISTA
UFRGS

EUSÉBIO C. T. TAPIA
UFRJ

PAULO PUREUR, JACOB SCHAF
UFRGS

Investigamos as propriedades magnéticas do sistema pseudobinário $n_x (Mn_xNb_{1-x})Fe_2$ utilizando a espectroscopia Mössbauer, a difração de raios-x, a calorimetria diferencial de varredura (DSC) e susceptibilidade dc. Verificamos que este composto apresenta fase única hexagonal de agrupamento compacto (hcp) até $x=0.40$, sendo que a partir daí coexistem as fases fcc e hcp. A introdução de átomos de manganês neste composto pseudobinário causa uma contração da rede, e um aumento do desdobramento quadrupolar. Os espectros Mössbauer foram ajustados com distribuição quadrupolar haja visto que os resultados das medidas DSC não mostraram nenhuma transição de fase entre $-200^\circ C$ e $700^\circ C$. Observamos ainda um aumento da temperatura de Néel com a introdução de manganês.

ÓTICA

Guias de Ondas e Fibras Ópticas (OTI) –
07/06/95

Fabricação e Aplicações de Redes de Bragg em Fibras Ópticas

W. MARGULIS

PUC-Rio

Há um século sabe-se que centros de cor são criados com a irradiação de vidro causando uma pequena alteração no índice de refração do material. Recentemente demonstrou-se ser possível gravar-se uma estrutura periódica de centros de cor em fibras ópticas convencionais, com a projeção de um padrão de interferência de radiação ultravioleta pelo lado da fibra. Apesar de cada período dar origem a uma pequena reflexão ($<10^{-3}$), a soma coerente dos efeitos resulta em refletividade de 100% para um comprimento de onda determinado. As redes de Bragg assim formadas tem aplicações diversas em telecomunicações, em física de lasers, e em espectroscopia. Dispositivos podem ser usados como filtros, espelhos, e permitir geração de pulsos de luz de alta intensidade, ou realizar-se fontes de luz simples de largura de linha 10 KHz. A fabricação e algumas aplicações de redes de Bragg em fibras serão descritas neste trabalho.

Novo Modulador Eletro-Óptico Baseado na Assimetria do Campo Produzido em Guias de Onda de $LiNbO_3$

R. P. DE MELO JR, D. V. PETROV, E. F. DA SILVA JR, CID B. DE ARAÚJO
Departamento de Física-UFPE

Descreveremos neste trabalho a construção e caracterização de um modulador espacial baseado no efeito eletro-óptico em guias de onda fabricados com substratos de Niobato de Lítio [1]. Foi utilizado um guia canal (largura de $5\mu m$) obtido por fotolitografia e troca protônica em um substrato "Z-cut". Com este dispositivo pode-se obter desvios da trajetória do feixe acoplado no guia da ordem de 2 miliradianos, mediante a aplicação de diferenças de potencial da ordem de 30 volts. A modulação espacial do feixe é convertida em modulação de amplitude por meio de uma iris que seleciona a direção da luz na saída do guia sendo possível obter profundidades de modulação de 50% para frequências da ordem de kHz . A caracterização espacial e temporal do feixe modulado foi feita em detalhes e os resultados foram analisados utilizando o método introduzido na Ref.[2] que permite calcular a distribuição espacial do campo elétrico gerado pelos eletrodos. A simulação numérica do dispositivo mostrou uma boa concordância com os resultados experimentais obtidos.

[1] R. P. de Melo-Jr., Guias de Ondas Ópticos em Substratos de $LiNbO_3$, Tese de Mestrado, UFPE (1994).
[2] C. M. Kim e R. V. Ramaswamy, IEEE J. Lightwave Tech. 7, 1063 (1989).

POLARIZATION MODE DISPERSION MEASUREMENTS IN SINGLE MODE FIBERS USING LOW COHERENCE INTERFEROMETRY.

ROGÉRIO PASSY, JEAN PIERRE VON DER WEID
Pontifícia Universidade Católica - RJ/CETUC

The interest on polarization mode dispersion (PMD) in single mode optical communication fibers is increasing, both because of the practical limitations due to severe constraints for CATV systems and because of long distance high bit rate transmission cables. The PMD is produced by imperfections in the fiber cylindrical symmetry combined with random polarization mode coupling. During the last four years, different methods have been proposed for PMD diagnosis, distinguished mainly by the coherence length of the source. The wavelength scanning and polarimetric methods are based on the analysis of the state of polarization at the fiber output. These two methods require high coherence light sources in order to avoid the depolarization by the PMD of the fiber under test. The interferometric method is based on the interferometric analysis of the fiber output light using a low coherence source. This method gives directly the polarization mode dispersion by measuring the spread of the interference peak. In this work we present measurements of polarization mode dispersion in different fibers and cables. The authors are grateful to Telebras for financial support.

**DUAL WAVELENGTH INTEGRATED
ALL-OPTICAL MACH-ZEHNDER
INTERFEROMETER IN SEMICONDUCTOR
DOPED GLASS.**

D. V. PETROV, E. L. FALCÃO-FILHO, E. F. DA
SILVA-JR, CID B. DE ARAÚJO
Departamento de Física, UFPE

We describe the operational characteristics of a new type of all-optical modulator in an integrated Mach-Zehnder interferometer built in a semiconductor doped glass substrate, whereby a CW probe beam is controlled by a pulsed beam of different wavelengths. The modulator is polarization insensitive and has the capability to operate at repetition rates up to 10 kHz with relatively low driving powers. The modulation mechanism is based on the thermal nonlinearity of the semiconductor doped glass. The waveguide structure allows to change independently both the phase and the amplitude of the probe beam in each arm of the interferometer in order to tune the initial state of the modulator.

**MEDIDAS DE TEMPO DE VIDA EM
FIBRAS DOPADAS COM ÉRPIO**

M. C. DE O. AGUIAR, C. MAZZALI, A. M. DE
PAULA, H. L. FRAGNITO, L. C. BARBOSA, C. L.
CESAR
Unicamp

Uma das inovações tecnológicas que já está revolucionando o campo das comunicações ópticas é o amplificador óptico baseado em fibras dopadas com Érbio (FDE). O amplificador óptico funciona transferindo energia de um feixe de bombeio para o sinal óptico, enquanto este se propaga pela fibra dopada com Érbio. Esta transferência é feita através da emissão estimulada nos íons de Er^{3+} . A separação entre os níveis do primeiro estado excitado para o estado fundamental ${}^4I_{13/2}$ - ${}^4I_{15/2}$ é da ordem de 0,81eV (1,5 μm), que coincide com a janela de menor atenuação das fibras ópticas. Se a população do nível ${}^4I_{13/2}$ for maior do que a do estado fundamental ocorrerá a amplificação para fótons com $\approx 1,5 \mu\text{m}$. A amplificação obtida aumenta com a inversão de população entre os níveis ${}^4I_{13/2}$ e ${}^4I_{15/2}$, a qual depende da taxa de bombeio e da taxa de emissão espontânea. Vê-se então que um dos parâmetros cruciais para o bom funcionamento de um amplificador é o tempo de vida do primeiro estado excitado, que desejamos que seja o maior possível. Apresentamos medidas do tempo de vida do primeiro estado excitado ${}^4I_{13/2}$ do Er^{3+} em fibras de sílica fabricadas pela Telebrás usando um laser de bombeio operando em 1,48 μm . Obtemos tempos da ordem de 8 ms, para uma fibra de comprimento 3.14 m. Nas melhores FDE tem-se obtido τ da ordem de 10 ms. A separação entre os níveis do segundo estado excitado e do estado fundamental ${}^4I_{11/2}$ - ${}^4I_{15/2}$ do Er^{3+} é de 988 nm. O tempo de decaimento do segundo para o primeiro estado excitado é da ordem de

10 μs e, se bombeamos em 980 nm, também podemos medir o tempo de vida do primeiro estado excitado do Er^{3+} em fibras. Utilizamos esse método para medir o tempo de vida em fibras fabricadas em nosso grupo. Obtemos um tempo da ordem de 3 ms para uma fibra de comprimento ≈ 0.5 m. Este resultado é bastante promissor, uma vez que na primeira tentativa já obtemos uma fibra com tempo de vida razoável.

**Compressão e Amplificação de Pulsos de Baixa
Intensidade através do Espalhamento Raman
Estimulado e Modulação de Fase Cruzada em
Fibras Ópticas**

R. F. DE SOUZA
ETFAL

E. J. S. FONSECA, J. MIGUEL HICKMANN, A. S.
GOUVEIA-NETO
UFAL

Recentemente foi proposto teoricamente o uso do efeito combinado do espalhamento Raman estimulado e modulação de fase cruzada com a finalidade de amplificar e comprimir simultaneamente um pulso de luz de intensidade extremamente baixa copropagando na região de dispersão anômala com um pulso de bombeamento na região de dispersão normal de velocidade de grupo de uma fibra óptica. Neste trabalho mostramos pela primeira vez resultados experimentais dessa técnica, fundamentados teoricamente por simulações numéricas.

Lasers (OTI) - 07/06/95

**Lasers Moleculares no TeraHertz: Medidas
Diretas de Frequências**

EDJAR MARTINS TELLES, ARTEMIO SCALABRIN,
DANIEL PEREIRA
Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP

Neste trabalho apresentamos medidas de frequências de linhas lasers na região do infravermelho longinquo (IVL $\approx 1-10$ THz) obtidas através da técnica heteródina. Nesta técnica, linhas lasers de frequências próximas são misturadas em um diodo de contato de ponta do tipo metal-isolante-metal (MIM). Este diodo gera um sinal de batimento possível de se medir em um analisador de espectro de microondas. Com isso, conhecendo-se previamente uma das frequências misturadas, adotada como referência, obtém-se o valor da frequência pretendida. As medidas realizadas estão na faixa de 600 GHz a 1800 GHz e apresentam reprodutibilidade da ordem de partes em 10^7 . As linhas laser no IVL foram geradas pelo bombeamento óptico de moléculas do tipo metanol (CH_3OH). Utilizamos lasers de CO_2 como

fonte de bombeamento e ressonadores do tipo Fabry-Perot e em guia de onda como lasers IVL. O conhecimento preciso da frequência de linhas laser IVL é fundamental para a espectroscopia do próprio meio ativo e para a utilização dessas linhas como padrões secundários na região IVL em experimentos de síntese de frequência óptica. Suporte Financeiro: Fundação Banco do Brasil, FAPESP, CNPq, FAEP- UNICAMP

LASER EFICIENTE NO INFRAVERMELHO LONGÍNQUO: HIDRAZINA - NOVAS LINHAS E MEDIDAS DE FREQUÊNCIAS

ELZA DA COSTA CRUZ VASCONCELLOS, SANDRA CRISTINA ZERBETTO

Instituto de Física "Gleb Wataghin", DEQ, UNICAMP
LYNDON R. ZINK

Cooperative Institute for Research in Environmental Sciences, University of Colorado & NOAA

KENNETH M. EVENSON

National Institute of Standards and Technology, Time and Frequency Division

Até recentemente, a molécula de hidrazina (N_2H_4) havia contribuído com um total de 75 linhas de laser no infravermelho longínquo quando opticamente bombeada por laser de CO_2 , e com 6 linhas adicionais quando bombeada com um laser de N_2O [1]. Neste trabalho mais do que dobramos o número de linhas obtido na hidrazina, descobrindo 99 linhas novas de laser a partir do bombeamento óptico da molécula por linhas regulares, sequenciais e de banda quente de um laser de CO_2 . As novas linhas estão distribuídas na faixa de comprimento de onda de 49.2 a 708.3 μ , e dentre estas estão as linhas de menores comprimentos de onda já observadas na hidrazina. Medimos também a frequência, o offset do laser de bombeio, a polarização relativa e a intensidade relativa da maior parte destas linhas. Constatamos neste trabalho, que a molécula de hidrazina é altamente promissora como geradora de linhas de laser no infravermelho longínquo, com comprimentos de onda abaixo de 200 μ m. Isto torna a hidrazina uma importante fonte de radiação coerente para aplicação em estudos de espectroscopia atômica e molecular.

[1] E.C.C. Vasconcellos, L.R. Zink, G.P. Galvão, K.M. Evenson, "New N_2H_4 far-infrared laser lines and frequencies," IEEE J. Quantum Electron., vol. QE30, pp. 2401-2406 (1994)

Seleção de Modos Longitudinais em Lasers de Diodo através de Realimentação Óptica

L. VIANA, J. W. R. TABOSA, S. S. VIANNA

Departamento de Física - UFPE

M. ORIÁ

Departamento de Física - UFPB

Neste trabalho apresentamos um método simples para permitir a operação de um laser de diodo em um de-

terminado modo longitudinal. A seleção de modos é conseguida através da realimentação óptica (4%) para o interior da cavidade do laser por uma placa de vidro, formando uma cavidade externa. Através do controle do comprimento da cavidade externa vários modos longitudinais, que normalmente não operam para o laser livre são colocados em oscilação. Também, através da modulação sincronizada da corrente no laser e da posição da placa, podemos varrer continuamente a frequência do laser em um intervalo superior a 4GHz. A aplicação deste sistema para a espectroscopia atômica e esfriamento de átomos será discutida.

Suporte: PADCT, CNPq, FACEPE

Análise Teórica e Fabricação de Camadas Antirefletoras em Lasers de InGaAsP/InP

EDMILSON J. T. MANGANOTE, JOSÉ R. FILHO
CPqD-TELEBRAS S/A

A refletividade da face de um laser com camada antirefletora é analisada utilizando-se o modelo de um guia de onda planar. Calculamos numericamente a refletividade para uma camada antirefletora única em lasers de InGaAsP/InP em 1.3 μ , os parâmetros ótimos do filme, como a espessura e o índice de refração são obtidos em função da espessura da camada ativa. Também levamos em conta a variação do índice de refração com a espessura da camada depositada. Foram obtidas refletividades residuais tão baixas quanto 0.1%, utilizando-se camadas de monóxido de silício (SiOx) não estequiométrico, depositadas por evaporação térmica com monitoração in situ da refletividade, através das perdas induzidas nas faces pela tensão de polarização. Foram utilizados e, posteriormente comparados, três métodos distintos para a medida de refletividade.

EFFECTS OF FREQUENCY MISMATCH AND WAVE DISPERSION ON AN ARBITRARY AMPLITUDE TE_{1m} MODE CYCLOTRON RESONANCE LASER ACCELERATOR

RENATO PAKTER, FELIPE BARBEDO RIZZATO
Univ. Fed. do Rio Grande do Sul

A promising configuration for laser acceleration is the so called cyclotron-resonance laser accelerator (CRLA), where a coherent electromagnetic wave may transfer a large amount of energy to a beam of electrons gyrating in a guide magnetic field. This large amount of transferred energy takes place because of the autoresonance mechanism where, under some ideal conditions, an initial wave-particle synchronism is self-sustained throughout the accelerating period. In the present work we perform an improved analysis of the mentioned self-consistent interaction, taking into account a possible frequency mismatch between wave and particles. We study how the frequency mismatch can compensate the

dispersive effects due to the confining wave guide in a TE_{1m} mode.

Laser de Diodo visível como instrumento didático de baixo custo

L. M. ZERI, J. SATORI, L. O. NUNES, T. CATUNDA
Instituto de Física de São Carlos - USP

O objetivo deste trabalho é o desenvolvimento de um sistema de laser de semicondutor visível barato e compacto para utilização em laboratórios de ensino. Estamos usando lasers de GaInP, fabricados pela Toshiba, emitindo em λ 670nm com potência de aproximadamente 3mW. Estes lasers operam com correntes da ordem de 55-85mA, aproximadamente 5mA acima da corrente de limiar de oscilação ("threshold"). Desenvolvemos um circuito que produz corrente constante sendo alimentado por tensão de 9V, proveniente de uma bateria ou eliminador de pilha (uma fonte DC muito simples). Também desenvolvemos um circuito que mantém a potência luminosa emitida pelo laser constante. Isto é feito usando o fotodiodo para realimentar a corrente do laser. Apesar da simplicidade da eletrônica utilizada em ambos os circuitos, o comportamento do laser é bastante estável, com flutuaç ao em potência menor que 0.1%. O custo do sistema completo, incluindo o laser de semicondutor, lente colimadora de plástico, fonte de alimentaç ao e suporte ótico é estimado em 55.

Lasers e Óptica Quântica (OTI) - 07/06/95

PERIODIC LOCKING OF TWO CHAOTIC LASERS

YUDONG LIU, L. C. BARBOSA
UNICAMP

Two Lorenz systems describing two chaotic lasers can be stabilized simultaneously in different orbits by a weak coupling through certain system parameters. Chaos present in each system is thus suppressed. This kind of locking can be realized for a wide range of parameters.

PERIODIC LOCKING IN HETERO CHAOTIC SYSTEMS

YUDONG LIU, L. C. BARBOSA
UNICAMP

Certain two different chaotic systems with the form of Lyapunov exponents as $(+, 0, -)$ can be coupled in a way so that the expanding in phase space of each system will be canceled by the other and the coupled system will fall into a stable limit cycle with the form of Lyapunov exponents as $(0, -, -, -, -)$. After coupling,

the two different initially chaotic oscillated systems will be locked on two different periodic orbits, respectively. Chaos presents in each system is thus suppressed. We show numerically the existence of this periodic locking in the coupling of Lorenz and Rössler systems.

DINÂMICA DO MICROMASER PELO MÉTODO DAS TRAJETÓRIAS QUÂNTICAS.

TARSO BENIGNO LEDUR KIST
PUC-Rio

ANTÔNIO ZELAQUETT KHOURY
UFPE

LUIZ DAVIDOVICH
UFRJ

Um modelo realista do micromaser é resolvido pelo método das trajetórias quânticas. Esse método aplica-se ao estudo da dinâmica de um sistema quântico pequeno quando este está acoplado a um reservatório com um grande número de graus de liberdade. A dissipação e as flutuações aparecem naturalmente nesse tratamento através de saltos quânticos que ocorrem aleatoriamente durante o tempo de evolução do sistema. Este método é aplicável a uma gama extensa de *super operadores relaxação* no regime Markoviano, e pode-se mostrar a sua equivalência com a equação mestra. A flexibilidade do método permitiu-nos solucionar um modelo bem realista do micromaser. Calculamos a evolução temporal da distribuição de fótons de um modo do campo eletromagnético da cavidade quando exposta a um fluxo de átomos, sendo que num dado instante nenhum, um ou dois átomos podem estar interagindo com o campo. Dessa forma, efeitos cooperativos podem também ser considerados. Os átomos entram na cavidade no estado excitado e a estatística do bombeio pode ser qualquer. A temperatura do banho térmico pode ser diferente de zero. Os acoplamentos átomos-campo podem ser constantes ou variar independentemente ao longo da cavidade, podendo ainda ser incluída uma dessintonia entre a frequência da transição atômica e o modo do campo. A taxa de decaimento atômica pode ser não nula. Os valores da taxa de decaimento do campo, do tempo médio de interação átomo-campo e do intervalo médio entre duas injeções sucessivas cobrem amplamente a faixa de interesse teórico e experimental. Nas condições em que a teoria microscópica é aplicável, comparamos nossos resultados com outros que envolvem várias aproximações. Observamos também que os estados armadilha do campo são destruídos pelos eventos de dois átomos, ainda que esses ocorram com uma probabilidade muito reduzida.

Largura de Linha Homogênea e Parâmetro de Saturação em Transições Lasers no Infravermelho

EDJAR MARTINS TELLES, ARTEMIO SCALABRIN,
DANIEL PEREIRA

Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP

Neste trabalho analisaremos transições de absorção, no infravermelho, de moléculas lasers ativas do tipo metanol (CH_3OH) na presença de campo elétrico uniforme. O comportamento apresentado pela maioria das absorções, um aumento inicial seguido de uma queda, é descrito pelo efeito Hanle Não-Linear e permite informações espectroscópicas importantes acerca das transições. Para isso, construímos uma cela equipada com eletrodos e microfone, para detecção do espectro de absorção fotoacústico, e de utilizamos um laser de CO_2 como fonte de excitação óptica. A partir do aumento relativo da absorção é possível determinar o parâmetro de saturação da transição. Além disso, o ajuste da curva experimental conseguido através de particular função possibilita avaliar as larguras homogênea e inhomogênea da transição. Os resultados conseguidos exemplificam o uso do efeito Hanle Não-Linear como uma técnica espectroscópica SubDoppler.

Caracterização de Lasers a Diodo para Espectroscopia Atômica

FERNANDO CATALANI, ARTEMIO SCALABRIN,
DANIEL PEREIRA

Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP

Neste trabalho apresentamos a caracterização parcial de um sistema a laser semiconductor, concebido para aplicações em espectroscopia atômica a alta resolução. Este sistema faz uso de uma cavidade, que permite a operação do laser numa faixa de temperatura entre 240 e 300 K a uma estabilidade da ordem de mK. Esta, corresponde a uma estabilidade em frequências da ordem de MHz. Para isso construímos uma fonte de corrente estabilizada e usamos elementos que desfrutam o efeito Peltier. Esta operação permite varreduras de frequências de dezenas de nm para lasers emitindo no infravermelho próximo. Suporte Financeiro: FAPESP

Novas Linhas Laser do Ácido Fórmico

GEORGINA MARIA RODRIGUES DE SALES LUÍS,
EDJAR MARTINS TELLES, ARTEMIO SCALABRIN,
DANIEL PEREIRA

Unicamp

Neste trabalho, utilizamos dados de espectroscopia roto-vibracional de isótopos do ácido fórmico, para a descoberta de novas linhas laser no IVL. Os espectros foram obtidos com um espectrômetro a Transformada de Fourier, e permitiram uma identificação de transições do ácido fórmico em coincidências com

linhas de laser de CO_2 . Pelo bombeamento óptico dessas transições novas linhas laser no IVL puderam ser observadas na região entre 232 μm e 746 μm . Sua caracterização é feita em termos de comprimento de onda, polarização relativa e dessintonia de absorção em relação ao centro de emissão da linha de laser CO_2 (offset). Suporte financeiro: Fundação Banco do Brasil, FAPESP, CNPq, FAEP-UNICAMP

Termo-oxidação induzida a laser em superfícies metálicas

J. L. JIMÉNEZ PÉREZ, M. B. S. LIMA, C. A. S. LIMA

Grupo de Estudos e Processamento de Materiais com Lasers - UNICAMP

Estudamos, com base num modelo por nos desenvolvido a geometria espacial e a taxa de crescimento de um filme fino de óxido metálico, produzido por reação de termo-oxidação induzida pela exposição de uma superfície metálica que se desloca, com velocidade constante, sob um feixe intenso de laser no IV. O algoritmo computacional, para a realização dos cálculos envolvidos 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. Medidas microtopográficas das trilhas de óxido formadas durante a exposição de uma lâmina de Ti a um feixe laser intenso de Nd:YAG, mostram uma excelente concordância entre nossas estimativas teóricas da espessura e os valores medidos experimentalmente. Os resultados de vários ensaios teóricos com o modelo são, também, apresentados, inclusive aqueles referentes às taxas de crescimento do filme.

EXPERIMENTAL INVESTIGATION OF CHROMIUM DOPED GLASSES AS SATURABLE ABSORBERS

EGBERTO MUNIN, ANTONIO GUILLERMO JOSÉ
BALBIN VILLAVARDE, MICHAEL BASS, KATHLEEN
CERQUA-RICHARDSON
UNICAMP

Chromium doped aluminate and silicate glasses have been prepared in both inert and oxidizing atmospheres. It was measured the absorption spectra in the 300 nm - 1500 nm spectral range and the near infra red emission. Such spectroscopic measurements indicate that some of the glasses incorporated the chromium ion in the +4 valence. These Cr^{4+} doped glasses exhibit a broad spectral emission covering the communication window and the eye safe region around 1.5 μm . Ten glass sam-

ples and two crystalline samples were used to study the phenomenon of saturable absorption in the Cr^{4+} ion. It was found that the processing conditions strongly affect the capability of the glasses to become transparent when excited with high intensity radiation. A figure of merit was defined to compare the performance of different materials as saturable absorbers. The use of inert atmosphere during the melting process leads to glasses with better figures of merit. The saturable absorption measurements were performed at 800 nm by using a Cr:LiSAF laser.

PRODUÇÃO E DETECÇÃO DE ESTADOS COMPRIMIDOS EM CAVIDADES

LUIZ GUILHERME C. P. LUTTERBACH

Departamento de Física, PUC-Rio, RJ, Brasil

LUIZ DAVIDOVICH

Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

Apresentamos um método, baseado na interação dispersiva de um átomo com o campo de uma cavidade supercondutora de alto fator de qualidade, para construir um estado comprimido na quadratura mediante a geração de correlações adequadas entre os estados atômicos e do campo e a posterior medida daqueles. Cada átomo é preparado numa superposição coerente de dois estados tais que a frequência de transição entre o estado superior e um terceiro estado atômico é vizinha de um modo da cavidade. Essa preparação é feita em uma cavidade de baixo fator de qualidade, ressonante com os dois níveis atômicos, situada imediatamente antes da cavidade supercondutora. Após atravessar a cavidade de alto fator de qualidade, os átomos passam através de outra cavidade igual à primeira, e em seguida são detectados por meio de câmaras de ionização, projetando o campo numa superposição de estados coerentes que apresenta compressão de ruído quântico em uma quadratura. Em situações ideais a compressão chega perto de 100% com uma probabilidade razoável. São levados em conta efeitos dissipativos e limitações das técnicas existentes para estimar que seria possível obter-se compressão de 90% com probabilidade de 20%. É mostrado também um método para medir a compressão desses estados através dos átomos, uma vez que o campo dentro da cavidade não é diretamente acessível, visto que uma medida direta prejudicaria o fator de qualidade da cavidade.

SUPERPOSIÇÕES DE ESTADOS BINOMIAIS E OS GATOS DE SCHRÖDINGER.

ANTONIO VIDIELLA BARRANCO, JOSÉ ANTONIO ROVERSI
UNICAMP

Dois exemplos típicos de estados não clássicos da luz são as superposições de estados coerentes macroscopicamente distinguíveis (gatos de Schrödinger) e os estados binomiais. Nós introduzimos uma nova classe de estados da luz, ou superposições quânticas de estados binomiais, que interpolam continuamente entre os gatos de Schrödinger e os estados de número. Encontramos que o resultado da interpolação é extremamente sensível, de uma maneira não trivial, à fase relativa na superposição. Este comportamento pode ser acompanhado se examinarmos as propriedades estatísticas da superposição, como o parâmetro Q de Mandel, por exemplo. Gatos de Schrödinger "legítimos" são obtidos no limite apropriado. No entanto, para certos valores dos parâmetros envolvidos, pode-se ter superposições de estados macroscopicamente distinguíveis sem termos os estados constituintes "quasi-clássicos". Esse processo de "sintonia fina" também nos leva a estados híbridos que compartilham características de ambos, os gatos de Schrödinger e os estados de número. Ilustramos a transição utilizando distribuições de quasi-probabilidade no espaço de fase, e discutimos mecanismos de geração dos estados de superposição.

DOIS ÁTOMOS RAMAN-ACOPLADOS EM INTERAÇÃO COM DOIS MODOS DO CAMPO QUANTIZADO.

JOSÉ ANTONIO ROVERSI, ANTONIO VIDIELLA
BARRANCO
UNICAMP

Estudamos a dinâmica de dois átomos Raman-acoplados, ou seja, átomos de três níveis na configuração Λ , e tendo o estado excitado fora da ressonância com quaisquer modos da cavidade. Nosso enfoque é principalmente baseado na preparação do estado inicial do campo. Aqui exploramos as possibilidades de interpolação oferecidas pela preparação dos dois modos do campo em estados binomiais, em contraposição aos estudos utilizando estados coerentes. O modelo utilizando dois átomos pode ser resolvido exatamente para o vetor de estado do sistema átomo-campo. Isso nos permite calcular facilmente valores esperados tais como inversão de população, flutuações no número de fótons, etc. Apresentamos resultados sobre a alteração da dinâmica de um ou de ambos os modos do campo na cavidade quando interpolamos independentemente os mesmos (para $t = 0$) entre os estados coerentes (Poissonianos) e os estados de número (sub-Poissonianos).

ESTADOS INTERMEDIÁRIOS NÚMERO FASE DO CAMPO DE RADIAÇÃO QUANTIZADO

BASÍLIO BASEIA, AÉRCIO FERREIRA DE LIMA, GIL DA COSTA MARQUES

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

Stoler e colaboradores¹ introduziram os estados binomiais, $|\eta, M\rangle$, que são estados intermediários entre o estado de número $|n\rangle$ e o estado coerente $|\alpha\rangle$, que exibem efeitos não clássicos no campo luminoso, como antiagrupamento ("antibunching"), estatísticas sub-Poissoniana e compressão ("squeezing"). Neste trabalho introduzimos estados intermediários entre os estados (verdadeiramente complementares) de número $|n\rangle$, e de fase $|\theta\rangle$ - no sentido de Pegg-Barnett², investigamos os efeitos não clássicos associados a esses estados, conforme a estratégia de Stoler et al. Por exemplo, mostra-se, que a inversão de população: $W(t) = \langle \sigma_z(t) \rangle = \sum P_n W_n(t)$, onde $W_n(t) = \langle n | \sigma_z(t) | n \rangle$ e $P_n = |\langle n | \xi, M \rangle|^2$ exibe o efeito não clássico "revival".

TRATAMENTO GENERALIZADO DO MODELO JC PARA O CAMPO NO ESTADO COMPRIMIDO PAR

AÉRCIO FERREIRA DE LIMA, BASÍLIO BASEIA
Instituto de Física, Universidade de São Paulo

Uma grande quantidade de trabalhos publicados dedica-se à investigação do campo luminoso com a matéria. O modelo de Jaynes-Cummings (JC) tem sido largamente utilizado como laboratório para essas investigações. No presente trabalho investigamos o caso de Hamiltoniana generalizada para o modelo, incluindo a dessintonização: $\Delta = \omega - \omega_0$, entre o campo e o átomo, e o caso da interação tipo multifóton:

$$\gamma(\sigma^+ a^p + \sigma^- a^{+p})$$

que representa a parte de interação e, onde "p" é o número de fótons trocados. O átomo foi assumido num estado inicial genérico:

$$|\Psi(0)\rangle = C_g |g\rangle + C_e |e\rangle$$

e investigamos a inversão de população $W(t)$ para o campo inicial num estado comprimido par (ECCP), levando em conta o efeito dos diversos parâmetros (Δ, p , etc.) na obtenção de efeitos não clássicos.

INTERFERÔMETRO DE DOIS FÓTONS

S. PÁDUA, P. H. SOUTO RIBEIRO, G. A. BARBOSA
Universidade Federal de Minas Gerais

Feixes de fótons degenerados e simultâneos são gerados através da luminescência paramétrica de conversão descendente. Quando combinados em um divisor de feixes 50/50, com os seus caminhos óticos igualados, observamos a queda da taxa de coincidência entre eles para zero. Isto indica a geração de estados de dois fótons devido a uma interferência destrutiva entre os feixes iniciais. Portanto, dois fótons são transmitidos ou refletidos pelo divisor de feixes (teoricamente não existe

a possibilidade de um dos fótons ser transmitido e o outro fóton ser refletido). Estamos estudando as propriedades de coerência espacial e temporal destes estados através da montagem de um experimento de fendas duplas de Young e um interferômetro de Michelson para analisa-los. Usaremos também a montagem como um interferômetro de dois fótons para medida de tempo de trânsito em materiais. A interferência destrutiva não ocorre quando a amostra é colocada no caminho de um dos feixes, devido a desigualdade gerada entre os caminhos óticos dos mesmos. Igualando os caminhos óticos novamente, medimos o tempo de trânsito pela amostra.

Transferência Mútua do Efeito de Compressão em Lasers de 2-Fótons Acoplados

BASÍLIO BASEIA, GIL DA COSTA MARQUES
Universidade de São Paulo

ADALTO RODRIGUES GOMES DOS SANTOS FILHO
Universidade Federal da Paraíba

Grande esforço teórico foi desenvolvido nos últimos anos na investigação de efeitos não clássicos no campo luminoso. Dentre esses efeitos, tem se destacado sobremaneira na literatura o efeito de compressão ("squeezing"), seja no campo luminoso, seja em sistemas atômicos de 2-níveis, e até mesmo em spins. No presente trabalho investigamos a geração e transferência desse efeito entre dois lasers de 2-fótons, à maneira de Yuen encarar a geração de "squeezing", pela Hamiltoniana quadrática nos operadores de criação e aniquilação, descrevendo um laser de 2-fótons. Por meio de uma transformação conveniente o Hamiltoniano é diagonalizado, o que leva, ao resolver as equações de movimento de Heisenberg, a soluções analíticas para as variâncias de parâmetros tipo quadratura do sistema. Do resultado analítico construímos gráficos mostrando a evolução temporal em função dos parâmetros do sistema. Verificamos que dependendo da relação entre coeficientes convenientemente escolhidos para os dois lasers, o sistema reproduz comportamentos já observados para o acoplamento entre dois osciladores lineares, ou para o acoplamento entre um oscilador linear e um quadrático. Para certo intervalo de variação de parâmetros, o sistema exibe um comportamento novo.

MODELAMENTO DA SINTONIA ESPECTRAL DE UM LASER À FIBRA DOPADA COM ÉRBIO⁺³ NA CONFIGURAÇÃO EM ANEL

MARIA THEREZA MIRANDA ROCCO GIRALDI
DMO - FEE - UNICAMP
SERGIO CELASCHI
CPqD/TELEBRÁS

Neste trabalho apresenta - se o modelamento da sintonia espectral de um laser sintonizável à fibra dopada com Érbio⁺³ na configuração em anel comparando -

a a sintonia em comprimento de onda obtida experimentalmente. A sintonia espectral teórica é obtida partindo - se das equações de taxa para um sistema de dois níveis. Chega - se então, à potência de sinal na entrada da fibra dopada e finalmente, à potência óptica de saída do laser à fibra dopada em anel, acima do limiar, através da união das extremidades da fibra dopada empregando - se um acoplador óptico, de modo a formar o anel. A potência óptica de saída é função da eficiência e da potência de limiar do laser à fibra dopada em anel. Colocando - se a dependência com o comprimento de onda de todos os parâmetros envolvidos no modelamento, obtem - se, então, a sintonia espectral do laser à fibra dopada com Érbio⁺³ na configuração em anel.

Passive Q-switching of Er:glass laser at 1.53 μm

MARLY BUENO DE CAMARGO
IPEN/CNEN/SP

ROBERT DALE STULTZ
Hughes Aircraft Co.

MILTON BIRNBAUM
CLS - University of Southern California

The Er:glass lasers are interesting and useful for a large number of applications because they emit in the eye-safe spectral region around 1.54 μm and coincide with the maximum transmission of the silica fibers, which is very important for communications. Other applications for this wavelength region include optical atmospheric measurements, traffic enforcement, helicopter avoidance, air defense, where human contact with the laser radiation is possible. The majority of the applications require short pulses with high peak power, which can be obtained by Q-switching the Er:glass laser.

We have demonstrated passive Q-switching for the Er:glass laser at 1.53 μm with $\text{Er}^{3+} : \text{CaF}_2$, $\text{Er}^{3+} : \text{Yb}^{3+} : \text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3$ (or $\text{Er} : \text{FAP}$), $\text{U}^{2+} : \text{BaF}_2$, $\text{U}^{2+} : \text{SrF}_2$, $\text{U}^{2+} : \text{BaF}_2$, $\text{Co}^{2+} : \text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ (or $\text{Co} : \text{YAG}$), and $\text{Co}^{2+} : \text{Y}_3\text{Sc}_2\text{Ga}_3\text{O}_{12}$ (or $\text{Co} : \text{YSGG}$). The best results were obtained with the $U : \text{CaF}_2$ and

$\text{Co} : \text{YSGG}$ Q-switches. Pulses as short as 20 ns FWHM (full width at half maximum) and 2.8 mJ ($U : \text{CaF}_2$) and 4 mJ ($\text{Co} : \text{YSGG}$) were obtained. (Financial support: CNPq/RHAE)

Towards Optical Heat Engines

BERNHARD LESCHE
Instituto de Física UFRJ

It is pointed out that certain types of lasers and masers are heat engines. In the limit of high photon numbers the emission of laser radiation can be interpreted as work in the thermodynamic sense. Lasers that are optically pumped by some source of thermal radiation can thus be interpreted as heat engines. It is suggested to optimize these lasers and masers to obtain realistic alternatives to conventional mechanical heat engines.

Theoretical study of passive mode locking in Nd lasers using slow saturable absorbers

EDISON PUIG MALDONADO, NILSON DIAS VIEIRA JUNIOR

IPEN/CNEN-SP - MMO - C.P.11049, CEP 05422-970 - São Paulo-SP

Using the classic slow-saturable-absorber analytical model for passive mode locking, we demonstrate the possibility of obtaining this regime in Nd:YLF lasers ($\sigma_E \sim 3.10^{-19} \text{cm}^2$), by using $\text{LiF} : \text{F}_2^-$ saturable absorbers, even for short-length cavities (1.5 m). It is also demonstrated why this regime has been normally obtained only for long resonators (30 m).

Óptica não Linear na Matéria Condensada
(OTI) - 08/06/95

Coerência em Luminescência Paramétrica Estimulada

PAULO HENRIQUE SOUTO RIBEIRO, SEBASTIÃO DE PÁDUA, GERALDO ALEXANDRE BARBOSA
UFMG

Na conversão paramétrica descendente estimulada, a emissão se dá na presença de um campo externo. Na prática, um cristal não-linear é bombeado por um feixe de laser que excita o meio. Este meio, ao invés de decair espontaneamente como na conversão paramétrica espontânea, decai na presença de um segundo laser alinhado com a direção de emissão do modo convertido de mesma frequência. Desta forma, também o modo convertido conjugado àquele alinhado com o laser auxiliar será estimulado, uma vez que a emissão somente ocorre em pares. Isto nos proporciona uma fonte de luz com características que variam entre os casos limites em que se comporta como uma fonte térmica, quando o laser auxiliar está desligado, e o caso em se comporta como um laser, quando o laser auxiliar é suficientemente intenso. Em um trabalho recente, estudamos as propriedades de coerência espacial desta fonte de luz, e mostramos que estas podem ser controladas através da intensidade do laser auxiliar (Phys. Rev. A - Publicado em Fevereiro de 1995). No trabalho atual as propriedades de coerência temporal são estudadas exper-

imentalmente. Nossos resultados mostram que analogamente ao caso da coerência espacial, a coerência temporal pode ser controlada através da intensidade do laser auxiliar. A experiência mostra também que a lei que governa a transição entre coerente e incoerente é igual à observada para o caso espacial.

On the Sign of the Nonlinear Refractive Index of Semiconductor Doped Glasses

ALEXANDRE SILVA DUARTE, HUGO LUIS FRAGNITO

Unicamp-IFGW

ELIA PALANGE

Univerità degli Studi Roma - Roma - Italy

Z-scan measurements of the nonlinear refractive index, n_2 , of semiconductor doped glasses (SDG) near the two photon absorption (TPA) resonance give substantially different results when picosecond or nanosecond duration laser pulses are used. Under these different conditions both the sign and magnitude of n_2 are different. We also measured n_2 as a function of exposure with nanosecond pulses and observed that in different SDG samples n_2 can increase, decrease, or change sign, depending on the energy gap of the material. We explain our results in terms of trap population induced by two photon absorption.

Photorefractive response time measurement by phase modulation and moving grating in two-wave mixing

SHAOPING BIAN

Harbin Institute of Technology, Harbin

JAIME FREJLICH

UNICAMP

We present a two-wave mixing (2WM) technique with phase modulation and moving interference pattern for photorefractive response time measurement. Frequency response for two-wave mixing with phase modulation to detuning frequency is studied from the dynamic equation governing the time evolution of the space charge field and the two-wave coupling equation. For a sinusoidal phase modulation with a frequency Ω much larger than the detuning frequency ω , and much larger than the inverse response time τ_{sc} of the photorefractive crystal, the first and second harmonic terms in Ω measured in the intensity behind the crystal are:

$$I^\Omega(\omega) \simeq 4S_o R_o \sqrt{\eta_o} J_o(\psi) J_1(\psi) \frac{\omega \tau_{sc}}{1 + (\omega \tau_{sc})^2} \quad (1)$$

$$I^{2\Omega}(\omega) \simeq 4S_o R_o \sqrt{\eta_o} J_o(\psi) J_2(\psi) \frac{1}{1 + (\omega \tau_{sc})^2} \quad (2)$$

Here S_o and R_o are the complex amplitudes of the two incident beams respectively, η is the diffraction efficiency, ψ is the phase modulation amplitude, $J_o(\psi)$, $J_1(\psi)$ and $J_2(\psi)$ are Bessel functions of the first

kind. From the ω -dependence of $I^\Omega(\omega)$ or $I^{2\Omega}(\omega)$, τ_{sc} can be computed.

The advantage of this method is that the frequency response of the hologram to the detuning frequency ω is measured at one fixed frequency (Ω or 2Ω), it is not necessary to know the frequency response of all the detecting system in a large range of frequency (this is generally required for frequency dependent measurements) because all the detecting electronics (detector, lock-in amplifier and electronics etc.) function at fixed frequency Ω or 2Ω . Experiments for photorefractive response time measurement are carried out by this method using a undoped $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ (BSO) crystal.

Conversão Ascendente de Frequências Ópticas em Vidros Fluoroindatos Dopados com Neodímio

L. S. MENEZES, CID B. DE ARAÚJO

Departamento de Física-UFPE

Y. MESSADDEQ, A. FLOREZ, M. A. AEGERTER

Instituto de Física de São Carlos-USP

O estudo da conversão ascendente de frequências (CAF) em vidros dopados com íons de Terras Raras tem sido objeto de grande interesse nos últimos anos devido à possibilidade de construção de lasers bombeados opticamente e que emitam luz na região azul-verde. Em particular, a exploração de mecanismos baseados na interação entre pares de íons permitiu, por exemplo, a construção de lasers de alta eficiência [1]. Dentre os novos materiais de interesse nesta área, os vidros fluoroindatos apresentam-se como muito atraentes devido à baixa energia dos seus fônons e a sua alta estabilidade. O efeito CAF já foi estudado anteriormente nestes vidros dopados com Er^{3+} [2] e Pr^{3+} [3]. Nesta comunicação apresentaremos resultados espectroscópicos para amostras dopadas com 2% de Nd^{3+} . Nossos resultados foram obtidos usando lasers de 10ns, 5Hz, sintonizados em torno da transição ${}^4I_{9/2} \rightarrow {}^2G_{7/2}$ (577nm). Foram observadas linhas de CAF correspondentes às transições: ${}^4D_{3/2} \rightarrow {}^4I_{9/2}$ (358nm); ${}^4D_{3/2} \rightarrow {}^4I_{11/2}$ e ${}^2P_{3/2} \rightarrow {}^4I_{9/2}$ (382nm); ${}^4D_{3/2} \rightarrow {}^4I_{13/2}$ e ${}^2P_{3/2} \rightarrow {}^4I_{11/2}$ (414nm); ${}^4D_{3/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ e ${}^2P_{3/2} \rightarrow {}^4I_{13/2}$ (449nm). A dependência quadrática da emissão CAF com a potência de bombeamento e sua evolução temporal permitiram caracterizar a contribuição de pares $\text{Nd}^{3+} - \text{Nd}^{3+}$ para a geração de luz na região azul.

- [1] P. Xie et al., *Opt. Lett.* **17**, 1198 (1992); *Opt. Lett.* **15**, 848 (1990)
 [2] R. Reiche et al., *Solid State Commun.* **85**, 773 (1993).
 [3] L. E. E. de Araújo et al., *Phys. Rev. B* **50**, 16219 (1994).

INSTABILIDADES ESPAÇO-TEMPORAIS DE PULSOS ULTRA-CURTOS EM MEIOS DISPERSIVOS NÃO LINEARES

E. J. S. FONSECA, S. B. CAVALCANTI, J. MIGUEL HICKMANN
 UFAL

Em meios não lineares tipo Kerr, devido aos efeitos combinados da não linearidade, difração e dispersão da velocidade de grupo, ocorrem instabilidades modulacionais espaço-temporais ao propagar-se um feixe de luz. Estas instabilidades podem levar à filamentação espacial e à formação de trem de pulsos no tempo. Mostra-se que a instabilidade é modificada significativamente em relação aos resultados já obtidos da aproximação do envelope lento devido ao acoplamento entre as frequências modulacionais espacial e temporal.

Electromagnetic scattering by a small dielectric particle: a coupled multipoles formulation.

THIERRY JACQUES LEMAIRE
 IF.UFBA/CNPq

The Coupled Dipoles Method introduced in 1973 by Purcell and Pennypacker[1] to describe the electromagnetic scattering by dielectric particles, is a powerful and flexible low frequency method which generalizes the Rayleigh-Gans theory[2]. This method allows in practice, computations for scatterers of arbitrary shape, having a size parameter less than 10 and a complex refractive index of modulus smaller than about 4. The basic idea of this model is the representation of the particle by a set of induced spherical dipolar subunits located at the sites of a cubic lattice. The dipole moments are calculated, using the relation between the induced moment and the acting field at each site, involving the Clausius-Mossotti formula[2] for the polarizability. This leads to the resolution of a system of complex linear equations, a time consuming task. A generalization of this method is presented where each spherical subunits is described by a higher order approximation, i.e. by an electric dipole, a magnetic one and an electric quadrupole. The prescription for the electric polarizability is the same as the original model

(including the correction term) and those corresponding to the magnetic dipole and to the electric quadrupole moments are deduced from the Mie theory[2]. This method leads to a more accurate representation of the low frequency scattering by dielectric particles. On the other hand, this theory gives potentially the possibility of calculations for higher values of the refractive index than the previous model.

1. E.M. Purcell and C.R. Pennypacker, "Scattering and absorption of light by nonspherical dielectric grains", *Astrophys. J.*, 186, p. 705-714, (1973).
2. H.C. Van de Hulst, "Light scattering by small particles", (Wiley, New-York, 1957).

ESTUDOS DE BIRREFRINGÊNCIA EM CRISTAIS MISTOS $\text{LiK}_{(1-x)}\text{Rb}_x\text{SO}_4$

LUIZ CLÁUDIO MEIRA BELO, ULISSES AZEVEDO LEITÃO
 Universidade Federal de Minas Gerais

O sulfato de lítio e potássio (LiKSO_4), além de sua sensibilidade à aplicação de pressão, possui energias livres, muito próximas, associadas às fases de baixa temperatura. Este sistema é, portanto, susceptível a pequenas perturbações. No sistema misto, isto é, o sulfato de lítio e potássio dopado com rubídio, alguns íons potássio (K^+) da rede cristalina, são substituídos por íons rubídio (Rb^+), perturbando assim o sistema. Realizamos uma série de medidas de birrefringência em função da temperatura, na faixa de 80 a 300K, nos processos de resfriamento e aquecimento das amostras. Obtivemos os valores das temperaturas críticas entre as fases III-IV e IV-V, para cristais cujas concentrações variaram de $x=0$ até $x=0,5$. A partir destas temperaturas críticas, construímos um diagrama de fase mostrando a dependência das temperaturas de transição com a concentração x . Este diagrama evidenciou o aumento da temperatura crítica associada à transição entre as fases III-IV (transição trigonal) e a diminuição da temperatura crítica associada à transição IV-V (transição ferroelástica), em função da concentração. Para pequenas concentrações, $x \leq 0,15$, as temperaturas críticas apresentaram um comportamento linear. Contudo, para concentrações maiores, os valores da transição ferroelástica apresentaram um comportamento fortemente não linear, culminando na supressão da fase ferroelástica para concentrações da ordem de 0,25. Finalizando, a partir das medidas de birrefringência e do diagrama de fase, construímos um modelo fenomenológico para explicar a influência exercida pela presença do rubídio no sistema misto. Este modelo está fundamentado na idéia de que, devido ao seu maior raio iônico, o rubídio procura ocupar o maior espaço possível na rede cristalina.

Imagens e Holografia (OTI) - 08/06/95

Application of A Liquid Crystal Spatial Light Modulator on Optical Roughness Measurements by Speckle Correlation Method using Two Refractive Indices

T. EIJU, M. MURAMATSU*, T. SHIRAI, K. MATSUDA

*Mechanical Engineering Laboratory, AIST, MITI, Japan *Institute of Physics, University of São Paulo, Brazil*

In conventional optical surface roughness measurements by holographic interferometry using two refractive indices, a photographic plate is used as a recording medium. In the first step of this method, the surface to be measured, which is covered by liquid with a certain refractive index, is illuminated by laser light and scattered light is recorded holographically on the photographic plate. Then the surface is covered by another liquid with a slightly different refractive index. The scattered light from the surface is recorded on the same photographic plate, but is displaced laterally from the original position. The surface is reconstructed from the hologram after the photographic process and interference fringes of equal inclination are observed at infinity. The fringe visibility is found to decrease with an increase in the difference of the refractive index because the optical roughness over the surface varies depending on the refractive index.

However, the photographic process employed above is rather inconvenient and time-consuming. Therefore we have developed a system of roughness measurement using a CCD camera and a Liquid Crystal Spatial Light Modulator (LCSLM), instead of the photographic plate. The LCSLM used here is the same as an LC device used in an ordinary LC video projector. The scattered light patterns from the surface, which are covered by liquid with several different refractive indices, are acquired by the CCD camera and stored in a frame grabber in a computer. The superposition of two arbitrary patterns is calculated by the computer and displayed on the LCSLM. Then it is illuminated by coherent light to produce interference fringes of equal inclination at infinity. The surface roughness can be determined by the relationship between the fringe visibility and the difference of refractive indices. Performance of this system is estimated by experiments.

CORRELAÇÃO ÓPTICA DO PADRÃO DE "SPECKLE" DIGITALIZADO APLICADA À OXIDAÇÃO METÁLICA

MIKIYA MURAMATSU

Instituto de Física - USP

AKIYOSHI MIZUKAMI

Faculdade de Tecnologia de São Paulo - FATEC - SP

TOMOAKI EIJU, KIYOFUMI MATSUDA

AIST, MITI, Mechanical Engineering Laboratory - Japan

Ao iluminarmos a superfície de um objeto com feixe coerente (por ex. laser), resulta o espalhamento dessa luz formando um padrão aleatório de pontos claros e escuros denominados de "speckle", que é portador de informação do estado da superfície. Analisando-se a variação temporal desse padrão é possível inferir as mudanças que ocorrem na superfície, tais como deformações, deslocamentos, vibrações, etc. Neste trabalho, utilizando-se a correlação óptica do padrão de "speckle" em tempo real, analisamos o processo de oxidação em diferentes metais. Neste trabalho, apresentaremos apenas os dados relativos ao cobre. Em trabalhos anteriores, usamos o registro fotográfico do campo espalhado. Todavia, este processo é inconveniente, pois além de demorado e de difícil uso em aplicação industrial e em particular neste caso há uma perda de dados importantes no início do fenômeno, isto é, desde a preparação da superfície até o registro dos primeiros padrões. Utilizamos nesse caso a detecção

eletrônica: câmera CCD, placa digitalizadora (frame grabber), micro, etc.. Será apresentada a curva de correlação da intensidade espalhada em função do tempo mostrando a dependência dessa função com o estado da superfície, isto é, do grau de rugosidade, de limpeza, dos pontos de irregularidades, etc. Outros parâmetros que estão sendo analisados neste trabalho é a relação entre a rugosidade e o comprimento de correlação da superfície. Modelos teóricos apresentados em trabalhos anteriores mostram uma excelente concordância com os dados experimentais. Serão discutidos também outros parâmetros que podem inferir na análise do processo de oxidação metálica.

ARRANJO HOLOGRÁFICO A CRISTAIS DE $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ AUTO-ESTABILIZADO PARA PROCESSAMENTO DE IMAGENS.

AGNALDO FRESCHI, JAIME FREJLICH

Universidade Estadual de Campinas

EDUARDO BARBOSA

Faculdade de Tecnologia de São Paulo

JOSIEL CARVALHO, JOSÉ ANDREETA

Universidade de São Paulo - São Carlos

Descrevemos o funcionamento de um arranjo holográfico auto-estabilizado que usa como meio de registro um cristal fotorrefrativo de $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ (BTO). Para a obtenção do sinal de erro, o sistema

utiliza os feixes difratado e transmitido que emergem ortogonalmente polarizados de uma das direções do cristal BTO. Estes feixes passam por uma placa quarto-onda cujos eixos são orientados segundo as suas direções de polarização, e um prisma de Wollaston é ajustado de modo a distribuir igualmente as intensidade dos feixes para que sejam coletados por dois fotodetectores. Os sinais resultantes são eletronicamente subtraídos, dando origem a um termo proporcional a $\cos \phi$, sendo ϕ a diferença de fase entre os feixes transmitido e difratado à saída do BTO. Na ausência de perturbações externas, $\cos \phi = 0$, de modo que este termo se constitui num sinal de erro, que após amplificado, opera um modulador de fase que altera o caminho óptico de um dos feixes da montagem, compensando a perturbação. O sistema, por sua simplicidade, dispensa equipamentos caros e técnicas sofisticadas de detecção e modulação de fase.

ANÁLISE DAS CONDIÇÕES DE ESTABILIZAÇÃO DE HOLOGRAMAS POR REFLEXÃO

CARLOS R. A. LIMA, LUCILA CESCATO
Laboratório de Óptica, IFGW - UNICAMP

A mistura das ondas refletidas e reconstruídas por hologramas que estão sendo gravados em filmes de materiais fotossensíveis depositados sobre três tipos de substratos (metálicos, semicondutores e dielétricos) foi analisada visando-se encontrar as condições em que o sinal (proveniente da mistura de ondas) pode ser utilizado para operar um sistema de realimentação negativa para corrigir as perturbações de fase e simultaneamente monitorar a gravação do holograma. Os resultados teóricos, confirmados experimentalmente, mostraram que para substratos de alta refletividade o sistema de estabilização opera em condições similares ao sistema por transmissão, atingindo inclusive níveis de sinais mais altos o que facilita a operação, independentemente da espessura dos filmes fotossensíveis. Para substratos dielétricos de baixa refletividade, a operação do sistema por reflexão é praticamente impossível devido às rápidas oscilações de fase com a espessura óptica do filme fotossensível. Para substratos semicondutores de média refletividade o sistema opera razoavelmente para filmes de espessura menor que $1 \mu\text{m}$.

MICROLITOGRAFIA HOLOGRÁFICA PARA FABRICAÇÃO DE COMPONENTES ÓPTICOS

CARLOS R. A. LIMA, LUCILA CESCATO
Laboratório de Óptica, IFGW - UNICAMP
EDERVAL MISSIO
DOPT/CPqD - Telebrás
ILDEFONSO F. DE FARIA JR
DOPT/CPqD - Telebrás

Neste trabalho é descrito o uso de técnicas de microlitografia holográfica para a confecção de dois componentes ópticos: polarizadores de grade e redes com deslocamento de fase para confecção de lasers de realimentação distribuída monomodo ($\lambda/4$ DFB). Esta técnica consiste em gravar primeiramente um ou mais padrões de interferência (holográficos) sobre um filme de fotorresina utilizando um sistema de estabilização por reflexão. Este filme, após a revelação serve de máscara para ataques ao substrato, transferindo assim o padrão gravado na resina para o substrato. Estes ataques podem ser químicos (via úmida) ou secos (via plasma ou plasma reativo). Para confecção do polarizador de grade é necessário a gravação de um padrão de fitas metálicas sobre um substrato transparente, cujo espaçamento deve ter dimensões muito menores que o comprimento de onda a que se destinam. Esta gravação foi feita utilizando-se um filme de Alumínio depositado sob a resina que foi atacado via RIE. A confecção das redes com deslocamento de fase foi feita utilizando-se um processo de múltiplas etapas e os ataques ao substrato de InP foram feitos quimicamente.

Guias de Ondas Ópticos, Imagens e Holografia (OTI) - 08/06/95

GERAÇÃO DE SEGUNDO HARMÔNICO EM FIBRAS ÓPTICAS DE GERMANOSILICATO DOPADAS COM ÉRPIO

JANDIR M. HICKMANN, EVANDRO A. GOUVEIA,
ARTUR S. GOUVEIA NETO
UFAL
D. C. DINI, S. CELASCHI
CPqD - Telebrás

Descrevemos, neste trabalho, a geração de segundo harmônico em 660 nm , em fibras ópticas de sílica, dopadas com Germânio e o íon terra rara Érbio, bombeadas por um laser de Nd:YAG operado em $1,319 \mu\text{m}$. O eficiente processo de geração de segundo harmônico é atribuído à excitação óptica de defeitos, criados na banda do vidro hospedeiro, pelos íons de Érbio, através de um mecanismo de absorção ressonante de dois fótons. Fibras testes, sem a presença do íon terra rara em seu núcleo, não geraram luz de segundo harmônico em 660 nm mesmo após várias horas de preparação com semente.

MODULAÇÃO DO TREM DE PULSOS DE UM LASER DE Nd:YAG EM UM ARRANJO NOLM

DENISE CRISTIANO REIGADA, I. C. S. CARVALHO,
W. MARGULIS
PUC-Rio
BERNHARD LESCHE
UFRJ

Um arranjo NOLM (Nonlinear Optical Loop Mirror) consiste em um acoplador de fibra direcional no qual as duas saídas são emendadas, formando um interferômetro de Sagnac não-linear cuja reflexividade é dependente da intensidade. Um único feixe de entrada é subdividido em dois feixes contrapropagantes, que retornam coincidentes e se recombinam no acoplador. O comprimento do caminho ótico percorrido pelos dois feixes é exatamente igual, porém em sentidos contrários. Utilizou-se um acoplador de razão de acoplamento de 44:56 ($\lambda = 1.064\mu\text{m}$) e um controlador de polarização para desbalancear o anel e controlar a fase não-linear induzida por Automodulação de Fase (AMF). Desta forma é possível controlar a radiação transmitida devido à interferência dos dois feixes contrapropagantes. Utilizando-se um laser de Nd:YAG, Q.S. e mode-locked obtém-se um trem de pulsos com diferentes intensidades. Consequentemente, a propagação das ondas envolvidas neste arranjo NOLM causará uma modulação na envoltória destes pulsos devido à interferência (construtiva ou destrutiva). Neste trabalho, investiga-se a modulação do trem de pulsos e a consequente variação da fase das ondas envolvidas para diferentes potências de acoplamento e perdas. O arranjo em NOLM foi também utilizado para o estudo dos efeitos de AMF e Modulação de Fase Cruzada (MFC) sobre as ondas envolvidas.

DUPLA CORRELAÇÃO ÓPTICA HOLOGRÁFICA EM FOTORREFRATIVOS

$\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ EM $\lambda = 0,633\mu\text{m}$

GILDER NADER, A. A. TAGLIAFERRI, PAULO
ACIOLY M. DOS SANTOS

Instituto de Física - Universidade Federal Fluminense

A correlação óptica holográfica utiliza o método de Vander Lugt de confecção de filtros casados. É uma aplicação simples e imediata da utilização desses cristais em reconhecimento de imagens, pois dispensam a etapa química da revelação do filme e o reposicionamento original do holograma. Neste trabalho, mostramos que o BTO permite o registro simultâneo de dois filtros de Vander Lugt diferentes, um filtro dinâmico e outro semipermanente, em um sistema de mistura de duas ondas em $\lambda = 0,633\mu\text{m}$ e a amostra em difusão. Dessa forma, pode-se fazer uma dupla correlação, onde uma

correlação é feita com o filtro de absorção e outra com o filtro fotorrefrativo. O acesso a cada um dos hologramas é feito através do controle de polarização dos feixes de entrada. Basicamente, confecciona-se o holograma dinâmico, anisotrópico, através de um controle da polarização dos feixes, com um simples polarizador de entrada. Enquanto que o holograma de absorção, isotrópico, é gerado sem este controle, portanto, sem o polarizador de entrada. Concluindo, mostramos ser possível registrar um holograma semipermanente, ou seja, de absorção e outro dinâmico, fotorrefrativo, sem que um processamento interaja com o outro. Esta independência é demonstrada utilizando-se uma técnica de processamento de imagem conhecida, como a técnica de Vander Lugt, no desenvolvimento de um duplo correlador de imagens.

RESOLUÇÃO TEMPORAL DO ACOPLAMENTO ÓTICO NÃO LINEAR DISTRIBUÍDO EM FIBRAS D COM SEMICONDUTOR

RICARDO MARQUES RIBEIRO, WALTER MARGULIS
*Laboratório de Optoeletrônica, Departamento de Física,
PUC-RIO*

LINO MISOGUTI, VANDERLEI SALVADOR BAGNATO
*Departamento de Física e Ciência dos Materiais,
IFQSC-USP*

Mostramos neste trabalho o acoplamento ótico não linear distribuído ao se fazer propagação de luz através de fibras D com filme fino de semicondutor amorfo depositado em sua parte plana. O fenômeno se manifesta através da distorção e chaveamento intra-pulso incompleto dos envelopes Q-switched e mode-locked provenientes de um laser de Nd-YAG operando no modo fundamental após se propagarem. No passado recentes fenômenos foram verificados para acoplamento com prisma e rede de difração. Segundo o conhecimento dos autores, esta é a primeira vez que se reporta observações de acoplamento não linear distribuído em fibras D com semicondutor.

Efeito da resposta não linear atrasada na instabilidade modulacional de pulsos ultra-curtos em fibras de sílica

SOLANGE BESSA CAVALCANTI, MARCELO LEITE
LYRA

Departamento de Física, Universidade Federal de Alagoas

Uma equação não linear de Schrödinger modificada é proposta para a descrição da propagação de pulsos óticos ultra-curtos através de meios dispersivos com não linearidade lenta. A partir da equação proposta obtivemos o crescimento inicial das bandas laterais correspondentes à instabilidade modulacional, mistura de quatro ondas assim com a interação Raman, para

frequências modulacionais da ordem do espectro de ganho Raman.

SECOND HARMONIC GENERATION IN AN ANISOTROPIC OPTICAL WAVEGUIDE.

DIMITRI PETROV

*UFPE, The Institute of Semiconductor Physics,
Novosibirsk, Russia*

Second harmonic generation (SHG) in optical waveguides is classified into two types: one is the conversion from a fundamental guided mode into a second harmonic guided mode and the other is the conversion from a fundamental guided mode into a second harmonic radiation modes. Usually the efficiency of the second type of SHG is small because of a weak overlap of the modal fields of interacting waves. Using an off-axis propagation direction in an anisotropic waveguide the field's overlap can be considerably increased. A method for description of radiation modes of an anisotropic waveguide with an arbitrary profile distribution is proposed. Numerical simulation is done for the case of a waveguide in lithium niobate on the surface of X-cut. For a given propagation direction the phase matching exists between the guided fundamental quasi-TM mode and the continuous spectra of second harmonic radiation modes of quasi-TE polarization. It is shown that the field of a radiation mode strongly depends on the propagation direction. Near some propagation direction the field of the radiation modes is very familiar to the guided mode field and consists of a part of extraordinary polarization whose energy is concentrated in the waveguide and a radiative part of ordinary polarization that leaks into the substrate. Numerical study shows that the dependence of the overlap factor on the propagation direction is not so critical as for the case of guided-guided type of SHG. The proposed type of a SHG in the anisotropic waveguide can provide the same efficiency as for the guided-guided SHG being less critical to uniformity of the waveguide parameters.

DIRECTIONAL COUPLER USING A LEAKY WAVE OF AN ANISOTROPIC OPTICAL WAVEGUIDE.

DIMITRI PETROV

*UFPE, The Institute of Semiconductor Physics,
Novosibirsk, Russia*

Directional couplers (DCs) are important for many application in integrated optics. The coupling between waveguides of DC can be affected by evanescent fields

that are penetrated from one waveguide to the other or by radiation modes. The advantage of radiative-coupled DC over the evanescent field-coupled DC is the fact that the coupling length for the total transfer of power between waveguides does not increase exponentially with increasing waveguide separation. In an anisotropic waveguide a leaky wave can propagate in an off-axis direction. The field of a leaky wave consists of a guided-wave part whose power is concentrated in the waveguide and a radiative part that leaks into the substrate. In this work we suggest the use of the radiative part of a leaky wave in order to couple two identical waveguides on the opposite faces of an anisotropic slab. The geometrical optics model of the DC is proposed. Numerical simulation of a dispersion equation as function of the propagation direction and slab's thickness is done for the specific case of the lithium niobate slab with the Gaussian profile waveguides. It is shown that a slab thickness of $40\ \mu\text{m}$ along with a propagation direction of 40° associated with a coupling length of about $700\ \mu\text{m}$.

MODELAMENTO TEÓRICO DAS CARACTERÍSTICAS DE PROPAGAÇÃO DE FITAS COPLANARES ASSIMÉTRICAS COM APLICAÇÕES EM DISPOSITIVOS ELETROÓTICOS

PAULA BRANDÃO HARBOE, JOSÉ RODOLFO SOUZA
CETUC - PUCRio

Recentemente, a modulação da luz em frequências de microondas tem merecido bastante atenção. A razão principal deste interesse é a possibilidade de obter bandas extremamente largas quando a onda de luz é usada como portadora. A modulação direta de um laser semiconductor, embora bastante simples, está limitada à frequências de modulação em torno de 20 GHz. Consequentemente, o desenvolvimento de sistemas de alta capacidade e que operem em altas frequências requer a introdução de dispositivos externos para o processamento do sinal de luz. Os chamados dispositivos óticos de ondas guiadas, nos quais guias de onda óticos são formados em um substrato semiconductor, são potenciais candidatos para esta tarefa, pois são compactos, estáveis e apresentam possibilidade de integração e conexão com fibras. Um mecanismo de modulação largamente utilizado é baseado no efeito eletroótico, onde a modulação em fase utiliza um par de eletrodos em ambos os lados do guia ótico. As características de propagação destes eletrodos, que, na verdade, são linhas de transmissão de microondas, são investigadas com o conhecido Método das Linhas (MoL). A variação da constante dielétrica efetiva e da impedância característica com a frequência

e com as dimensões é investigada. Os resultados indicam que impedâncias características em torno de 50 ohms são obtidas com dimensões razoáveis dos eletrodos, permitindo a fabricação de dispositivos com baixas perdas de descasamento.

**PROPAGAÇÃO DE PULSOS
ULTRA-CURTOS, ELÉTRICOS E DE RF,
EM LINHAS DE TRANSMISSÃO
IMPRESSAS NÃO-UNIFORMES**

R. OLIVARES, J. R. SOUZA
CETUC - PUC/Rio

Os significativos avanços obtidos em opto-eletrônica ultra-rápida tornaram possível a geração e manipulação de pulsos elétricos com duração de femto-segundos. Estes avanços tem estimulado o projeto e fabricação de circuitos de microondas (MICs, MMICs e HMICs) usados em sistemas de alta velocidade. Nestas aplicações, as consideráveis larguras de faixas envolvidas exigem o rigor de técnicas de onda completa na caracterização das componentes dos circuitos, geralmente realizados em linhas de transmissão impressas, que não suportam propagação TEM. Em estudos anteriores, a análise destas estruturas não foi feita rigorosamente: foram usadas fórmulas empíricas para estimar a dispersão da constante dielétrica efetiva das linhas e/ou ignorada a variação da impedância característica com a frequência. Este último aspecto é crítico, especialmente quando é considerada a propagação de sinais de banda base (pulsos DC) de faixa larga, e no caso que estes modulem, em amplitude, uma portadora (pulsos RF). Neste trabalho se apresenta um rigoroso estudo das características de propagação de pulsos elétricos curtos, com envoltória Gaussiana e quadrada (com cantos suaves), em linhas de transmissão impressas não-uniformes, considerando a variação da impedância característica com a frequência. O Método de Domínio Espectral é usado para o cálculo da constante de propagação e da impedância característica ao longo das linhas. A Transformada Rápida de Fourier é empregada para obter a resposta temporal. Duas linhas microstrip afiladas são consideradas aqui, ambas com perfil de impedância exponencial. É observado que, ao ignorar a variação da impedância com a frequência, a distorção da envoltória é devida, fundamentalmente, à natureza dispersiva da linha; a variação gradual da impedância ao longo da estrutura não agrega uma distorção apreciável nas formas de ondas: somente as atenua ligeiramente e introduz um retardo temporal progressivo. Entretanto, ao considerar a característica dispersiva da impedância, o casamento se degrada com a frequência. Este comportamento é crítico para pulsos suficientemente curtos, cujas componentes espectrais poderiam ser afetadas pelo descasamento de impedância; e, sem dúvida, no caso

em que estes modulem uma portadora de RF. Os resultados obtidos na simulação são comparados com dados experimentais, sendo verificada muito boa concordância entre eles.

**EVALUATION OF THE ELECTRIC FIELD
DISTRIBUTION IN THE VOLUME OF
ELECTRO-OPTIC CRYSTALS FROM
LOCAL ELECTRO-OPTIC COEFFICIENT
MEASUREMENT**

IVAN RASNIK, JAIME FREJLICH
UNICAMP

J. F. CARVALHO, J. P. ANDREETA, N. J. H. GALLO
São Carlos-USP

We determine the local value of the electro-optic coefficient inside an electro-optic crystal, at different points along the direction of the externally applied electric field. From this information, the inhomogeneous distribution of the electric field in the crystal volume can be evaluated. The method we used to determine the electrooptic coefficient consists of measuring the ellipticity of the light vibration emerging from the crystal for an arbitrary orientation of the incident light vector and for an arbitrary, though known, field applied across the crystal. For linearly polarized light incoming to the crystal, the measurement of minimal and maximal intensity for two positions of the analyzer separated 45 degrees allows the determination of the electrooptic coefficient with no knowledge of the principal axes position. The method is valid for crystals exhibiting optical activity. This method is applied to $Bi_{12}TiO_{20}$ (BTO), photorefractive crystal grown at the Laboratório de Crescimento de Cristais-IFQSC-USP-São Carlos.

**CARACTERIZAÇÃO HOLOGRÁFICA DE
CRISTAIS FOTORREFRATIVOS DE**

$Bi_{12}TiO_{20}$

P. M. GARCIA, J. FREJLICH
IFGW - UNICAMP

J. F. CARVALHO, J. P. ANDREETA, N. J. H. GALLO
IFQSC - USP

Os cristais fotorrefrativos do tipo $Bi_{12}(Si,Ti)O_{20}$ apresentam características interessantes para a holografia dinâmica e processamento óptico de imagens devido à sua rápida resposta temporal às variações de intensidade do padrão de luz analisado, se comparado ao tempo de resposta de outros cristais fotorrefrativos, como o $BaTiO_3$ por exemplo. Além disso, apresentam propriedades de polarização que permitem controlar a

transferência de energia entre os feixes transmitido e difratado pela rede de difração no interior do cristal. Neste trabalho apresentamos algumas técnicas e os resultados de medidas da sensibilidade holográfica (S) e do coeficiente exponencial de ganho (Γ) em amostras de $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ crescidas no IFQSC-USP. Para tal utilizamos um laser de Ar^+ e $\lambda = 514 \text{ nm}$. Estas grandezas variam com a frequência espacial da rede holográfica gravada no cristal, e a partir dos seus valores máximos podemos determinar respectivamente o comprimento de difusão e o comprimento de blindagem de Debye (que por sua vez depende da densidade de "traps" da amostra) dos fotoportadores envolvidos no processo.

PROPAGAÇÃO DE UM FEIXE GAUSSIANO EM UM MEIO NÃO-LINEAR DISSIPATIVO

DAGOBERT S. FREITAS

Universidade Estadual de Feira de Santana

JAIRO R. DE OLIVEIRA, MARCO A. DE MOURA

Universidade Federal de Pernambuco

No tratamento teórico da propagação de pulsos ópticos muita atenção tem sido dada para a aproximação variacional, porém este tipo de tratamento é tradicionalmente utilizado em sistemas conservativos. No entanto é bem conhecido que os materiais reais não são puramente transparente, apresentando uma perda óptica. Para campos intensos os efeitos não-lineares são relevantes e desta forma os meios materiais apresentam fenômenos não-lineares e de absorção óptica. A descrição teórica da propagação de um pulso óptico em um meio material torna-se agora complicada: a teoria de raio paraxial, por um lado, não descreve corretamente a propagação do pulso em um meio não-linear e, por outro lado, o princípio variacional é tradicionalmente utilizado em sistemas conservativos. O problema de descrever sistemas dissipativos tem sido produto de uma longa discussão. Herrera et. al. propôs um princípio variacional, que representa uma modificação do princípio de Hamilton, descrevendo corretamente as propriedades físicas de um clássico oscilador harmônico amortecido. Neste trabalho, iremos analisar o balanceamento entre a não-linearidade e a difração espacial do pulso, cruzando um meio óptico com perda, usando uma aproximação variacional na forma desenvolvida por Herrera et. al.

ANÁLISE DO CAMPO DE EMISSÃO DE LASERS SEMICONDUTORES E SEU EFEITO NO ACOPLAMENTO

LASER-FIBRA

FELIPE RUDGE BARBOSA

CPqD - Telebras

Lasers semicondutores apresentam forte difração na saída do feixe, devido as dimensões da janela de emissão serem da mesma ordem do comprimento de onda emitido. Portanto, o perfil de distribuição de campo próximo na face do laser difere do campo afastado, e se relacionam por uma transformada de Fourier, podendo o perfil ser representado por uma função analítica. Neste trabalho estão apresentados os estudos experimentais e análise dos campos próximos (CP) e afastados (CA) de lasers em 0.98 e 1.3 μm , e seu efeito no acoplamento laser-fibra. São discutidos também os aspectos de simplicidade e aplicabilidade do método a diferentes lasers.

FADING NOISE REDUCTION IN COHERENT OFDR

ROGÉRIO PASSY, JEAN PIERRE VON DER WEID

Pontifícia Universidade Católica - RJ/CETUC

Among several techniques, coherent Optical Frequency Domain Reflectometry (OFDR) has been proposed for high resolution fiber optics component characterization. This technique consists in analyzing the beat signal produced by the optical interference between a fixed reference reflection called local oscillator reflection and different reflections coming from the component under test. A laser source has its optical frequency swept linearly and the beat frequency is proportional to the distance between the LO and the reflection point while the amplitude of the beat signal is related to the reflection intensity. The maximum range of the OFDR is limited by the coherence length of the laser and the spatial resolution is limited by total optical frequency deviation and the linearity of the frequency sweep. Sensitivities down to -100 dB can be easily obtained with 1mW laser power thanks to the CW operation system. With the development of high power (30 mW) multielectrode DFB and DBR lasers, narrow linewidth tunable sources became available for high sensitivity OFDR. The linewidth of these laser have reached the submegahertz values and the tunability are of the order of 2 nanometers free of mode hopping, which are fundamental for this application. The observation of the Rayleigh backscattering with centimeter resolution can be achieved with these high performance diode lasers, strongly improving the performance of the OFDR for optical component characterization. However, due to a fading noise, the Rayleigh backscattering level fluctuates with amplitudes up to 20 dB reducing the accuracy of the measurements. The fading noise is produced by the interference of different scatter points with random amplitudes and also by the change of the state of polarization of the backscatter light along the fiber. In this work we present the fading noise reduction in OFDR systems by using the frequency shift averaging tech-

nique. The authors are grateful to Telebras for financial support.

Óptica Quântica (OTI) – 09/06/95

DETECÇÃO DE UMA FRAÇÃO DE FÓTON POR INTERFEROMETRIA DE RAMSEY.

PAULO ALBERTO NUSSENZVEIG, MICHEL BRUNE, FERDINAND SCHMIDT-KALER, FRÉDÉRIK BERNARDOT, ABDELHAMID MAALI, JEAN-MICHEL RAIMOND, SERGE HAROCHE

Laboratoire Kastler Brossel de l'École Normale Supérieure URA 18 Associé au CNRS et à l'Université Pierre et Marie Curie

A Eletrodinâmica Quântica em Cavidades é um domínio da Ótica Quântica e da Física Atômica que conheceu um grande desenvolvimento nos últimos anos. Seu objetivo é o de estudar a interação entre átomos e Campo no nível mais fundamental: um único átomo de dois níveis interagindo com um único modo do Campo de radiação.

Nós estudamos aqui os efeitos dispersivos da interação não-ressonante entre átomos e um modo de uma cavidade. Devido à sua interação com o Campo, os níveis atômicos têm suas energias deslocadas enquanto estão dentro da cavidade (deslocamentos luminosos, ou "light shifts"). Nós medimos a variação linear desses deslocamentos com o número médio de fons dentro da cavidade mesmo para Campos com intensidade média inferior à de um único fóton. Na ausência de Campo injetado, medimos um deslocamento residual de um dos dois níveis da transição atômica: um deslocamento de Lamb devido a um único modo do Campo. Esses deslocamentos de energia são medidos de maneira sensível pelo método interferométrico das Franjas de Ramsey.

Experiências futuras, em uma situação de relaxação do campo extremamente fraca, são propostas. O caráter quântico do Campo será então predominante e será possível realizar uma medida *não-destrutiva* do número de fons: o caráter não-ressonante da interação assegura que os átomos não possam absorver ou emitir fons dentro da cavidade. As experiências realizadas demonstram a sensibilidade do aparelho de medida e abrem o caminho para essas medidas não-destrutivas assim como ao estudo de sistemas "mesoscópicos" (estados "gato de Schrödinger" do Campo), na "fronteira" entre os mundos clássico e quântico.

Indistinguibilidade forçada na coerência induzida sem emissão estimulada :

Implementação experimental.

PAULO HENRIQUE SOUTO RIBEIRO, SEBASTIÃO DE PÁDUA, GERALDO ALEXANDRE BARBOSA
UFMG

A coerência induzida sem emissão estimulada é um processo não clássico em que dois feixes de luz inicialmente incoerentes entre si, tornam-se mutuamente coerentes. Veja por exemplo Phys. Rev. Lett. 67, 318 (1991). Nestes processos entretanto, não se tem obtido experimentalmente, altos graus de coerência entre os feixes. Neste trabalho, mostramos os resultados experimentais da implementação de um método para aumentar o grau de coerência entre os feixes neste processo, proposto por Phys. Rev. A 50, 3379 (1994). Nesta proposta, dois cristais não-lineares são usados para produzir luminescência paramétrica de conversão descendente. Dois pares de feixes conjugados chamados *signal* e *idler* são escolhidos. Alinhando-se o feixe *idler* produzido no primeiro cristal com o feixe *idler* produzido no segundo cristal, podemos observar o efeito de indução de coerência entre os respectivos feixes *signal* conjugados, em sua forma usual. Para aumentar o grau de coerência induzida, introduzimos os feixes *idler* em uma cavidade de Fabry-Perot. Nossos resultados mostram que é

possível observar o fenômeno de coerência induzida sem emissão estimulada em nosso laboratório, entretanto não obtivemos resultados conclusivos sobre a viabilidade do aumento do grau de coerência através do uso da cavidade óptica, devido à necessidade de aquisição de alguns acessórios necessários à continuidade da experiência.

REFORÇO DA COMPRESSÃO DE RUÍDO QUÂNTICO ATRAVÉS DO ACOPLAMENTO DE LASERS

MÁRCIA T. FONTENELLE

Departamento de Física, PUC-Rio

LUIZ DAVIDOVICH

Instituto de Física, UFRJ

Consideramos um sistema de dois lasers acoplados, tal que a luz gerada pelo primeiro é injetada no segundo. Quando a luz gerada pelo primeiro laser é sub-poissoniana (como mostrado antes¹, isto pode ocorrer quando os efeitos da dinâmica atômica tornam-se importantes), a compressão pode ser reforçada pelo acoplamento. Uma teoria geral, não-linear é desenvolvida para o caso ressonante (sem dessintonias), sem quaisquer suposições acerca das magnitudes relativas das constantes de decaimento do campo ou atômicas, abrangendo assim uma grande classe de lasers

e permitindo um tratamento detalhado da dinâmica atômica. Diversos esquemas possíveis de bombeamento são enquadrados, indo desde o regular até o poissoniano.

1. M. Kolobov, L. Davidovich, E. Giacobino e C. Fabre, *Phys. Rev. A* **47**, 1431 (1993); Márcia T. Fontenelle e L. Davidovich, aceito para publicação em *Phys. Rev. A*.

REDUÇÃO DA LARGURA DE LINHA EM LASERS OPERANDO NO LIMITE DE CAVIDADE RUIM

ANTONIO ZELAQUETT KHOURY
Universidade Federal de Pernambuco

LUIZ DAVIDOVICH
Universidade Federal do Rio de Janeiro

MIKHAIL KOLOBOV
University of St. Petersburg

Recentemente lasers operando no limite de cavidade ruim vêm sendo objeto de investigação tanto teórica quanto experimental. Em tais sistemas a taxa de decaimento do campo no interior da cavidade é comparável à taxa de decaimento atômica, ao contrário dos lasers usuais nos quais esta última é muito maior. O interesse pelo limite de cavidade ruim decorre de que neste regime de operação há uma redução significativa da largura de linha do sinal produzido, o que já foi demonstrado teoricamente e observado experimentalmente em um laser de He-Ne operando em $3.39 \mu\text{m}$ [S.J.M. Kuppens et al, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 3815(1994)]. Esta redução na largura de linha está associada a efeitos de memória da polarização atômica. De fato, nos lasers que operam no regime de cavidade boa, o tempo de vida do campo na cavidade é muito maior que o da polarização que, portanto, evolui seguindo o campo adiabaticamente. No limite de cavidade ruim a polarização possui dinâmica própria e o ruído de emissão espontânea torna-se correlacionado, o que reduz a largura de linha. Contudo, os trabalhos teóricos que tratam deste problema ignoram efeitos de alargamento inhomogêneo ao passo que nos experimentos com lasers de He-Ne era significativa a contribuição do efeito Doppler. No presente trabalho calculamos a largura de linha de lasers operando no limite de cavidade ruim incluindo os efeitos de alargamento inhomogêneo na teoria. Isto nos permite a obtenção de uma fórmula geral para a largura de linha, mais próxima das condições experimentais de operação. Esta fórmula recai na expressão usual, obtida por Kolobov et al [*Phys. Rev. A* **47**, 1431(1993)], no limite de alargamento homogêneo. No limite Doppler os efeitos de memória atômica são apagados. O caso intermediário também é discutido.

TEORIA DAS PINÇAS ÓPTICAS

PAULO A. MAIA NETO, H. MOYSES NUSSENZVEIG

Instituto de Física, UFRJ

Apresentamos resultados preliminares para a força exercida por um feixe de luz (comprimento de onda λ) focalizado sobre uma esfera dielétrica de raio R . O objetivo é estabelecer uma referência teórica para as experiências com pinças ópticas. Já são conhecidos resultados no limite da óptica geométrica ($R \gg \lambda$) e de espalhamento Rayleigh ($R \ll \lambda$). Obtemos uma solução formal, sob a forma de uma série de ondas parciais, válida para um valor arbitrário de R/λ .

ESPALHAMENTO DE ÁTOMOS POR LUZ: INVESTIGANDO O ESTADO QUÂNTICO DO CAMPO

CÉLIA M. A. DANTAS
Univ. Federal de Goiás

B. BASEIA
IFUSP - São Paulo

REETA VYAS
Univ. of Arkansas

VANDERLEI S. BAGNATO
IFSC - USP - São Carlos

Propomos um método para determinar o estado quântico do campo, através da medida da distribuição de momento de átomos, resultante do espalhamento de um feixe atômico por um modo de campo eletromagnético quantizado. O modelo utilizado assume interação tipo 2-fotons [$V \sim (\sigma^+ a^2 + \sigma^- a^{\dagger 2})$] e consiste em fazer passar átomos através de uma cavidade. Devido a interação entre o átomo e o campo, o átomo é defletido durante a sua passagem através da cavidade. A distribuição de momento dos átomos defletidos exhibe assimetria, a qual fornece informação sobre o estado do campo.

Entrelaçamento multifractal de campos eletromagnéticos copropagantes.

MARCELO L. LYRA
UFAL

Neste trabalho são investigadas as propriedades de entrelaçamento de dois campos eletromagnéticos inicialmente coerentes, os quais se propagam através de um meio Kerr interagindo via um mecanismo de mistura de quatro ondas que conserva a intensidade de cada feixe. Foi observado que estados desentrelaçados ocorrem periodicamente. Estes estados podem ser preparados como superposições lineares de estados coerentes através de uma escolha apropriada do conjunto de parâmetros não-lineares. Entre dois desentrelaçamentos consecutivos os campos atingem desentrelaçamentos parciais nos quais o estado de cada campo é uma mistura estatística de um número finito de campos coerentes. A medida da pureza do estado quântico dos campos evolui para uma medida multifractal no limite de grandes intensidades dos campos.

Seguindo técnicas estatísticas usuais, o espectro de singularidades da medida da pureza é obtido com o objetivo de caracterizar suas propriedades universais de escala.

Espectroscopia e Confinamento de Átomos (OTI) - 09/06/95

MEDIDA DO TEMPO DE VIDA DO NÍVEL 7M_7 DO URÂNIO VIA ESPECTROSCOPIA OPTOGALVÂNICA DE DOIS FÓTONS

MARCELO G. DESTRO, CARLOS SCHWAB

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

ARMANDO MIRAGE

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares/CNEN - São Paulo - SP

LIN FUCHENG

Shanghai Institute of Optics & Fine Mechanics - Academia Sinica - China

A espectroscopia optogalvânica tem sido considerada como uma técnica muito atrativa, quando comparada com as outras técnicas convencionais de espectroscopia na região desde o ultravioleta até o infravermelho próximo. Em primeiro lugar, ela é uma técnica mais simples e econômica do que as outras. A observação direta da variação dos parâmetros da descarga simplificam em muito os dispositivos de detecção. Por outro lado, ela é também muito útil na análise de materiais refratários, pois estados gasosos destes elementos são obtidos eficientemente por pulverização catódica. Contudo, existem algumas objeções com relação ao seu uso, sendo a principal delas ligada ao problema de realizar espectroscopia de alta resolução em um meio que contenha uma descarga elétrica. A espectroscopia optogalvânica pode ser usada para fornecer informações diretas muito úteis na identificação de níveis de altas energias, medidas de deslocamento isotópico, estruturas finas e hiperfinas, etc., porém devem-se tomar cuidados especiais na utilização de seus resultados para se determinar a forma e a largura de linha das transições envolvidas. Neste trabalho utilizamos e descrevemos a técnica de espectroscopia optogalvânica de dois fótons para medir o tempo de vida do primeiro nível excitado do urânio. Para tal, são realizadas medidas do atraso entre os pulsos dos lasers utilizados em função da corrente de operação da lâmpada de cátodo de urânio. Além disso, apresentamos e discutimos os resultados preliminares obtidos para o nível excitado 7M_7 do urânio, usando esta técnica.

Mistura de Quatro Ondas com Absorção de Dois Fótons envolvendo Átomos de Rydberg

M. CHEVROLLIER

Departamento de Física - UFPB

L. S. PESSOA, W. C. MAGNO, J. W. R. TABOSA, S. S. VIANNA

Departamento de Física - UFPE

Neste trabalho estudamos o sinal de mistura de quatro ondas gerado em vapor de Rubídio, quando átomos altamente excitados - átomos de Rydberg - participam diretamente do processo não linear. No experimento, dois feixes de laser, intensos, com frequências diferentes, excitam o sistema atômico. Variando a frequência de um dos feixes, podemos estudar processos ressonantes envolvendo absorção de dois ou três fótons. O sinal de mistura de ondas é analisado em função da frequência e da intensidade dos feixes incidentes e da densidade atômica. Para altas densidades, colisões atômicas produzem um deslocamento em frequência e uma variação na intensidade do sinal gerado. Os resultados experimentais são comparados com os cálculos de matrix densidade, usados para obter a suscetibilidade de terceira ordem, $\chi^{(3)}(2\omega_1 - \omega_2)$, em termos da sintonia e da amplitude dos campos.

Apoio financeiro: FINEP, CNPq e FACEPE.

Loading Mechanism in a Two-Beam Magneto-Optical Trap

JOSÉ W. R. TABOSA, SANDRA S. VIANNA,

CLAYTON A. BENEVIDES

Departamento de Física - UFPE

We present experimental results for the loading of a magneto-optical trap which uses only two focused laser beams, operating with cesium atoms in a vapor cell [1]. We have observed that the performance of the two-beam trap can be strongly improved by just increasing its capture rate without any modification in the trapping potential well. Using this trapping scheme we estimated that about 3×10^7 atoms can be loaded into the trap in a time as short as 70ms. We hope that this two-beam trap configuration could be very useful in experiments where one needs to trap neutral atoms in a very small region in space, such as in quantum optics experiments performed inside resonators.

[1] C. Chesman, E.G. Lima, F.A.M. de Oliveira, S.S. Vianna and J.W.R. Tabosa, *Opt. Lett.* **15** (1994) 1237. Financial Support: FINEP, CNPq, PADCT e FACEPE.

BLINDAGEM ÓPTICA DE COLISÕES ATÔMICAS: DEPENDÊNCIA COM A INTENSIDADE

LUIS GUSTAVO MARCASSA, RICARDO HOROWICZ, JOHN WEINER, SÉRGIO CARLOS ZÍLIO, VANDERLEI SALVADOR BAGNATO

Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo - DFCM

O ambiente de uma armadilha magneto-óptica é conveniente para o estudo de processos colisionais. Contudo até o momento, apenas fotoionização associativa tem permitido de forma direta estudos sobre o produto da reação em função de vários parâmetros da armadilha e campos externos. Neste trabalho apresentaremos os resultados sobre o comportamento do efeito de blindagem em função da intensidade de um laser sintonizado convenientemente. Neste experimento o processo de fotoionização associativa normal é interrompido na absorção do primeiro fóton para o estado atrativo. Esta absorção é trocada pela absorção de um fóton para um estado repulsivo de longo alcance ($+C_3/R^3$). Isto evita que o par entre na região onde a transição para o estado duplamente excitado pode ocorrer e acarretar ionização. Comparamos nossos resultados com uma teoria baseada no modelo de transição de Landau-Zener. Há boa concordância entre eles. Acreditamos que a técnica de blindagem óptica pode ser aplicada de um modo geral em armadilhas e talvez venha a ser útil para evitar processos colisionais que no momento limitam a densidade e o número de átomos nestas. É provavelmente venha a ser importante na tentativa de obtenção da Condensação de Bose-Einstein em alcalinos. Agradecemos aos Profs. D. Pereira e A. Scalabrin (UNICAMP) pelo empréstimo de um laser de corante. Suporte Financeiro: FAPESP, CNPq e Finep

OBSERVAÇÃO DE ÁTOMOS APRISIONADOS EM FORMA DE DUPLO ANEL

MARIA TEREZA DE ARAUJO
UFAL

LUIS GUSTAVO MARCASSA, SÉRGIO CARLOS ZÍLIO,
VANDERLEI SALVADOR BAGNATO
IFSC-USP

Devido ao desalinhamento dos feixes laser de aprisionamento no plano xy, podemos observar estruturas espaciais diversas de átomos aprisionados em armadilhas magneto-ópticas. Neste trabalho observamos um tipo de estrutura espacial de átomos de sódio semelhante a um duplo anel. A possibilidade de observarmos esta estrutura, apareceu primeiro numa análise teórica do problema e depois foi comprovada experimentalmente. Essa estrutura consiste de dois anéis concêntricos cuja distribuição espacial ocorre devido a uma força de vórtice, dependente do desalinhamento e do perfil gaussiano dos feixes, somada a forças de aprisionamento e amortecimento já usadas para explicar outros tipos de estruturas. Neste trabalho mostramos que levando em conta apenas a força de vórtice, a distribuição espacial em forma de duplo anel é possível de ser observada e podemos fazer uma análise qualitativa desta distribuição

em termos de alguns parâmetros experimentais usados. Este tipo de estrutura foi observada numa armadilha magneto-óptica convencional para aprisionar os átomos de sódio na configuração do tipo II que utiliza a transição do estado fundamental $3S_{1/2}$, $F=1$ para o estado excitado $3P_{3/2}$, $F'=1$.

DEPENDÊNCIA DAS PERDAS EM ÁTOMOS DE SÓDIO APRISIONADOS EM FUNÇÃO DA FREQUÊNCIA: MÉTODO DA CATÁLISE ÓPTICA

LUIS GUSTAVO MARCASSA, SÉRGIO RICARDO
MUNIZ, JULIO FLEMMING NETO, RICARDO
HOROWICZ, SÉRGIO CARLOS ZÍLIO, VANDERLEI
SALVADOR BAGNATO

Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo - DFCM

Vários processos colisionais tem sido estudados nestes últimos anos; entre eles podemos citar aqueles que causam perdas de átomos aprisionados nas armadilhas. Neste conjunto há dois processos distintos: (i) Mudança de estrutura fina. O par atômico inicia a colisão no estado $S_{1/2}-P_{3/2}$ e finaliza em $S_{1/2}-P_{1/2}$. Sendo a energia restante convertida em energia cinética, suficiente para escapar da armadilha; (ii) Escape radiativo. O par emite um fóton para o vermelho da transição atômica, o restante da energia converte-se em energia cinética. O par escapará da armadilha dependendo de quanta energia cinética ganhou. Até o momento, apenas o comportamento com a intensidade foi estudado nestes processos, para o caso do sódio. Há estudos para o comportamento destes processos com a intensidade e frequência do laser para o Cs e Rb; os quais apresentam algumas características associadas à estrutura hiperfina destes átomos. Aqui apresentamos os resultados do comportamento das perdas com a frequência através do acréscimo de um laser extra, o laser de catálise. Comparamos os resultados com um modelo já existente, e apresentam uma boa concordância. Também apresentamos evidências experimentais que demonstram que o processo de escape radiativo é dominante no processo de perdas nas armadilhas.

Agradecemos aos Profs. D. Pereira e A. Scalabrin (UNICAMP) pelo empréstimo de um laser de corante. Suporte Financeiro: FAPESP, CNPq e Finep

*Óptica Não-Linear e Espectroscopia (OTI) -
09/06/95*

**OPTICAL PROPERTIES OF CdTe
QUANTUM DOTS WITH IMPROVED
DISPERSION**

YUDONG LIU, V. C. S. REYNOSO, L. C. BARBOSA,
R. F. C. ROJAS, C. H. BRITO CRUZ, H. L.
FRAGNITO, C. L. CESAR, O. L. ALVES
UNICAMP

The nonhomogeneity of quantum dots embedded in glasses is one of the serious problems which slowing down the practical application to nonlinear optical devices. In this report, we have developed a double annealing process to treat CdTe doped borosilicate glasses. The quantum dots obtained have small size, strong quantum confinement and small size dispersion. Comparing with our old samples with single annealing, we have improved the homogeneity and decreased size dispersion from 10.5% to 7.2% for the 2 nanometer average radius.

OPTICAL PROPERTIES OF DOUBLE LAYER $CdTe_xSi_{1-x}$ QUANTUM DOTS

YUDONG LIU, V. C. S. REYNOSO, L. C. BARBOSA,
R. F. C. ROJAS, C. H. BRITO CRUZ, H. L.
FRAGNITO, C. L. CESAR, O. L. ALVES
UNICAMP

We report the synthesis and optical characterization of a new double layer $CdTe_xSi_{1-x}$ quantum dots in borosilicate glass. The double layer quantum dots were synthesized by a double annealing process with two different temperatures. The photoluminescence and absorption results show that the new structural quantum dots have quantum confinements and no traps.

A local interaction approach to light diffraction by perfectly conducting surfaces

BERNARDO DE ASSUNÇÃO MELLO
UNICAMP / ICCMP

A new method is presented to solve the diffraction by a perfectly conducting surface. In this method the extinction theorem is interpreted as a "local boundary condition". We consider the *interaction* of the light with the superficial current, that must be corrected to locally cancel the light field just under the surface. The field produced by this current is superposed to incident field and the current is corrected again. The process is iterated until the wanted precision is reached. We use diffraction gratings problem to demonstrate the method.

CARACTERIZAÇÃO MAGNETO-ÓPTICA DE SISTEMAS VÍTREOS CONTENDO METAIS PESADOS

CARMEN BEATRIZ PEDROSO, EGBERTO MUNIN,
VICTOR CIRO SOLANO-REYNOSO, NORBERTO
ARANHA, ANTONIO GUILLERMO JOSÉ BALBIN
VILLAVARDE, LUIZ CARLOS BARBOSA
UNICAMP

Vidros de metais pesados apresentam rotação magneto-óptica de grande magnitude, sendo portanto promissores para aplicações em dispositivos magneto ópticos tais como chaves ópticas, moduladores, sensores e isoladores ópticos. Foram preparadas amostras de sistemas vítreos ternários (Bi_2O_3 , CdO e GeO_2) e quaternários (B_2O_3 , PbO, GeO_2 e Bi_2O_3). A constante de Verdet destes sistemas vítreos é determinada medindo-se o campo magnético que é necessário para produzir uma rotação do plano de polarização da luz de um certo ângulo pré-determinado. Estas medidas foram feitas utilizando-se um laser de He-Ne operando em 632.8 nm. A amostra é colocada no centro de um solenóide. Utilizou-se campo magnético pulsado na faixa de 50 KG a 70 KG, o qual é gerado através de descarga capacitiva. A partir dos resultados obtidos, analisou-se a contribuição da concentração dos óxidos dos metais pesados: Bi_2O_3 , CdO e PbO, presentes nos sistemas vítreos ternários e quaternários na obtenção de vidros com constantes de Verdet elevadas.

Medida do Índice de Refração Não-Linear do Cristal De $BaLiF:Ni$ em $1,064\mu m$ por meio da Técnica de Z-Scan para Absorvedores Lentos

RICARDO ELGUL SAMAD, NILSON DIAS VIEIRA
JUNIOR, SONIA LÍCIA BALDOCHI
IPEN/CNEN - São Paulo
SÉRGIO CARLOS ZILIO
Instituto de Física de São Carlos, USP

Na escolha de uma técnica para medida de não-linearidades em nossos laboratórios, optamos pela técnica do Z-Scan, que baseia-se no efeito de auto-focalização de um feixe laser no modo TEM_{00} . Com este método é possível obter as não-linearidades de ordem ímpar do material estudado. Dificuldades surgem no método devido a imperfeições na superfície da amostra estudada, assim como a flutuações na potência do laser, mascarando o sinal não-linear, capaz de medir fases não-lineares da ordem de $\lambda/100$. Para materiais com absorções com tempo de vida longo do nível superior, estes efeitos podem ser minimizados, utilizando uma técnica de resolução temporal, melhorando a sensibilidade do método. Utilizando esta técnica realizamos uma medida preliminar da não-linearidade do cristal de $BaLiF:Ni$ em $1,064\mu m$, obtendo um resultado próximo ao de outros íons de metal de transição em matrizes hospedeiras.

ENTANGLED COHERENCE AREAS IN PARAMETRIC DOWN-CONVERSION LUMINESCENCE

G. A. BARBOSA, S. PÁDUA, P. H. S. RIBEIRO
UFMG

We have recently demonstrated, experimentally, that a non-local entanglement exists between coherence areas of conjugated beams in down-conversion luminescence [Phys. Rev. A 49, 4176 (1994)]. This phenomenon, detected in the far-field radiation, is intimately connected to quantum correlations in the radiation source or, yet, to the non-local character of the wavefunction specifying this squeezed electromagnetic field. Therefore we suggested that an extended version of the first-order Van Cittert-Zernike theorem should be written to account for this second order effect.

This work presents that extended relationship based on a simplified single frequency, multi-mode wavevector analysis. The resulting second order visibility reveals, explicitly, the non-local entanglement of coherence areas between the conjugated beams of parametric down-conversion luminescence and its dependence on the experimental parameters.

MEDIDA DA ANISOTROPIA DAS CONSTANTES DE MOLA E AMORTECIMENTO DE ÁTOMOS DE SÓDIO APRISIONADOS EM UMA ARMADILHA MAGNETO- ÓPTICA

APARECIDA MARIKA TUBOY, DÉBORA MARCONDES
BASTOS PEREIRA MILORI, SÉRGIO CARLOS ZILIO,
VANDERLEI SALVADOR BAGNATO
IFSC-USP

As constantes de mola (K) e amortecimento (α) de um sistema de átomos aprisionados dependem do gradiente do campo magnético e da intensidade dos feixes lasers. Portanto é esperado uma anisotropia destas constantes nas várias direções da armadilha. Outra questão que pode levar à uma anisotropia é o fato dos átomos não estarem caminhando na mesma direção dos feixes lasers e portanto não estarem absorvendo luz com a polarização correta para o resfriamento e confinamento. Para estudar melhor esta anisotropia, uma técnica de medida destas constantes que utiliza um campo magnético oscilante externo de baixa amplitude é usado. A direção do campo oscilante é variado de modo a obter o valor das constantes nas possíveis direções. Após estas medidas uma outra técnica de medida, afim de obtermos uma comparação dos valores das constantes. A técnica utiliza um desbalanço de intensidade dos feixes para provocar uma força extra no sistema e assim podermos obter o valor de K .

MEDIDA DA CONSTANTE DE MOLA E CONSTANTE DE AMORTECIMENTO EM ARMADILHAS MAGNETO-ÓPTICAS DE SÓDIO

MARIA TEREZA DE ARAUJO
UFAL

DÉBORA MARCONDES BASTOS PEREIRA MILORI,
APARECIDA MARIKA TUBOY, RICARDO HOROWICZ,

SÉRGIO CARLOS ZILIO, VANDERLEI SALVADOR
BAGNATO
IFSC-USP

Devido ao grande progresso, recentemente alcançado, em obter-se amostras densas de átomos super frios, aprisionados por armadilhas magnet-ópticas, tornou-se de extrema necessidade a caracterização dessas amostras com respeito aos seus aspectos mais básicos. Com isso, a medida das constantes de mola K e de amortecimento α , presentes no movimento harmônico super amortecido que descreve o movimento dos átomos aprisionados, faz-se necessário para o completo entendimento do aprisionamento magneto- ótico. Diferentes técnicas foram desenvolvidas para medir essas constantes. A técnica utilizada neste trabalho foi introduzida por P. Kohns e colaboradores, que consiste na observação do movimento forçado da nuvem de átomos aprisionados quando uma força periódica externa é aplicada. Medindo a diferença de fase entre o sinal oscilante do campo magnético e o movimento dos átomos para algumas frequências de oscilação conseguimos encontrar o valor da constante de mola através das equações de movimento de um oscilador forçado e amortecido. Os valores experimentais são comparados com alguns modelos teóricos, onde o comportamento das curvas são ajustadas através de teoria Doppler, mas o valor absoluto não pode ser explicado.

NOVA TÉCNICA PARA A MEDIDA DA VELOCIDADE E TEMPERATURA DOS ÁTOMOS NO ANEL

MARIA TEREZA DE ARAUJO
UFAL

ROBIN KAISER

Inst. d'Optique Theorique et appliquee - Orsay

APARECIDA MARIKA TUBOY, DÉBORA MARCONDES
BASTOS PEREIRA MILORI, RICARDO HOROWICZ,
SÉRGIO CARLOS ZILIO, VANDERLEI SALVADOR
BAGNATO
IFSC-USP

A medida de temperatura dos átomos aprisionados são resultados importantes para o entendimento dos vários mecanismos que envolvem o resfriamento e confinamento desses átomos em alguns tipos de estruturas. Neste trabalho foi medido a velocidade e a temperatura de átomos de sódio aprisionados em forma de anel através de uma técnica simples desenvolvida neste grupo. Ela consiste em obter o menor tempo de descarga do anel quando um feixe laser adicional intercepta-o. Este tempo é medido através da redução do sinal de fluorescência na fotomultiplicadora que é proporcional ao escape dos átomos no anel. O sinal é adquirido por um osciloscópio e um micro computador. Um modelo teórico da distribuição de velocidade no anel é proposto e um ajuste da curva experimental do decaimento do número de átomos com o tempo é

realizado, onde o único parâmetro ajustável é a temperatura. O valor encontrado para a temperatura é $230\mu\text{K}$, que concorda com a temperatura obtida no limite de resfriamento Doppler para nuvens de átomos de sódio aprisionados ($T_D=240\mu\text{K}$).

ARMADILHA MAGNETO-ÓPTICA DE Na UTILIZANDO A LINHA D_1

JULIO FLEMMING NETO, APARECIDA MARIKA TUBOY, DÉBORA MARCONDES PEREIRA MILORI, LUIS GUSTAVO MARCASSA, VANDERLEI SALVADOR BAGNATO
IFSC-USP

Mostramos neste trabalho a obtenção de Na aprisionado utilizando lasers sintonizados na linha D_1 . Há quatro configurações possíveis quando se combina os níveis hiperfinos $F=1, 2$ de $S_{1/2}$ com $F'=1, 2$ de $P_{1/2}$. Um requisito fundamental, em duas destas configurações, é a troca de polarização do chamado laser de "rebombeio". Isto ocorre porque os níveis hiperfinos inferiores têm desvio Zeeman negativo, sendo que a mesma peculiaridade é observada nos demais alcalinos. Foi utilizando dois lasers colineares. Nos quatro configurações não há formação da armadilha se a polarização de qualquer um destes não for a correta, indicando que ambos exercem força. Ao contrário das armadilhas tradicionais, o aprisionamento envolve muitos subníveis Zeeman, sendo que algumas transições chegam a causar repulsão. A força total, no entanto, é obviamente de atração, o que concorda com um cálculo onde se pondera as forças de oscilador de todas as transições envolvidas. Da mesma forma se calcula o número de átomos, resultando $\sim 10^6$ átomos em 3 configurações. Em uma delas $N \sim 10^4$ átomos. Uma possível explicação para esta queda é um bombeamento óptico para um subnível Zeeman "cego". Os valores das dessintonias são altos, entre 20 e 60 MHz, e isto deve estar associado aos curtos tempos de vida dos estados excitados.

ESPECTROSCOPIA DE VIDROS A BASE DE InF_3 DOPADOS COM ÉRBJO.

ANTÔNIO CARLOS DE CASTRO, CRISTINA TEREZA MONTEIRO RIBEIRO, LUIZ ANTÔNIO DE OLIVEIRA NUNES, YUNES MESSADDEQ, MICHEL A. AEGERTER
IFSC-USP

Os vidros de fluoreto de índio apresentam transparência e resistência à umidade que permitem a construção de dispositivos que podem ser facilmente inseridos em sistemas de telecomunicações por fibra ótica para trabalhar em comprimentos de onda de até $5\mu\text{m}$. Quando dopados com o íon Er^{+3} estes vidros podem ser usados como eficientes meios para a amplificação de sinais de $1,5\mu\text{m}$, podendo substituir vidros de outros fluoretos que são sensíveis à umidade. Estudamos as emissões de vidros com composição $60\text{InF}_3:(40-x)\text{BaF}_2:x\text{ErF}_3$

onde $x=1,2$ ou 3 , com excitação em 488, 514 e 810nm, na temperatura ambiente e do nitrogênio líquido. A transição ${}^2H_{11/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ é suprimida em baixas temperaturas, indicando que o nível ${}^2H_{11/2}$ é ocupado a partir de excitação térmica do estado ${}^4S_{3/2}$. A conversão ascendente para o azul, o verde e o vermelho pode ser observada e os tempos de vida determinados, bem como a dependência da intensidade em função da potência aplicada e da concentração.

PROPRIEDADES ÓPTICAS LINEARES E NÃO-LINEARES DA L-ALANINA

LINO MISOGUTI, CLEBER RENATO MENDONÇA, ANTONIO NORIO NAKAGAITO, SÉRGIO CARLOS ZILIO, VANDERLEI SALVADOR BAGNATO
IFSC, USP - São Carlos

ANTÔNIO THEMOTEO VARELA, JOSÉ JOATHAN RODRIGUES JR, FREDERICO DIAS NUNES

Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará - Fortaleza

Neste trabalho fazemos a caracterização óptica da L-Alanina. A L-Alanina pertence ao grupo de cristais orgânicos que são materiais relativamente novos, com grande potencial para aplicação em óptica não linear, principalmente como conversores de frequência. Determinamos com grande precisão os índices de refração nos três eixos dielétricos principais com relação ao comprimento de onda e com relação a temperatura, ou seja, os elipsóides de índices. Os cristais orgânicos apresentam como principais características, altos coeficientes não-lineares e índices de refração próximos ao da sílica, facilitando o acoplamento com fibras ópticas. Determinamos também os *loci* de casamento de fase (*phase matching*) para geração de segundo harmônico (SHG) e propomos outras técnicas alternativas de medida dos coeficientes não-lineares.

NOVA ESTRUTURA ESPACIAL DE ÁTOMOS APRISIONADOS

DÉBORA MARCONDES BASTOS PEREIRA MILORI, APARECIDA MARIKA TUBOY, LUIZ GUSTAVO MARCASSA, SÉRGIO MUNIZ, JÚLIO FLEMMING NETO, SÉRGIO CARLOS ZILIO, VANDERLEI SALVADOR BAGNATO
IFSC-USP

Uma das mais eficientes armadilhas de átomos neutros construídas até agora são as Armadilhas Magneto-Ópticas (A.M.O.). A história da construção dessas armadilhas tem início em 1987 com Raab et al [1]. Ele produziu átomos lentos através da desaceleração ótica de um feixe de átomos de sódio e posteriormente utilizou os efeitos Doppler e Zeeman para exercer sobre estes átomos uma pressão de radiação dependente da posição e velocidade. Com este aparato é possível se produzir densas amostras de átomos frios (temperaturas

de ordem de μK) confinadas em pequenas regiões do espaço (volume de $\sim 1 \text{ mm}^3$). O interesse nestas amostras de átomos frios se deve ao fato de possibilitarem experimentos de colisões de baixa energia, medidas espectrocópicas livres de efeito Doppler e, principalmente, desenvolver a habilidade de manipulação de espécies atômicas. Em A.M.O. já foram observadas diversas estruturas espaciais de aprisionamento interessantes originadas através de desalinhamento dos feixes de aprisionamento: anel, duplo anel, dupla nuvem, estrias, etc. Este trabalho apresenta uma nova e intrigante estrutura espacial, observada com feixes alinhados, cujo efeito ainda não foi totalmente entendido.

RESONANCES OF A COATED SPHERE

TÚLIO MARCELO BAMBINO, LUÍS GALLISA
GUIMARÃES

Universidade Federal do Rio de Janeiro

When a plane wave is scattered by a metallic sphere covered by a dielectric layer, the ratio between the outer and the inner radius makes a sensitive role on the shape resonances and the total cross section profile. We developed a method for calculation the resonances position and width. A physical interpretation for these resonant modes are given based on the analogy between optics and quantum mechanics. These size effects are also analyzed in the framework of the total cross section for different ratios.

LUMINESCÊNCIA DO $\text{LiGaO}_2:\text{Fe}^{3+}$

PAULO SOUZA DA SILVA, LILIAN PANTOJA SOSMAN,
TEÓCRITO ABRITTA
UFRJ

O LiGaO_2 apresenta uma rede ortorrômbica com quatro molécula por célula unitária, sendo cada átomo tetraedricamente coordenado por oxigênios. Esta rede forma um arranjo tridimensional infinito de tetraedros que possuem somente um vértice em comum. A luminescência de materiais dopados com Fe^{3+} normalmente é devida a transição ${}^4T_1 \rightarrow {}^6A_1$ entre os níveis mais baixos em energia de uma configuração d^5 . Como estes níveis pertencem à diferentes configurações de campo forte, estas transições são associadas a bandas espectrais largas no visível e no infravermelho próximo. A luminescência do Fe^{3+} tem sido estudada em diversos materiais do tipo óxidos. Entretanto nos óxidos dopados com ferro esta impureza ocupa em geral diferentes sítios dificultando as interpretações dos espectros de excitação, emissão e tempo de decaimento neste trabalho amostras do $\text{LiGa}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_2$ dopados com diferentes concentrações de Fe^{3+} , $x=0,001$, $x=0,005$, $x=0,01$ e $x=0,05$. Sendo a amostra de maior concentração apresentando uma emissão mais intensa a 77K.

Geração da Soma de Frequências por Pares de Átomos Idênticos

J. T. M. PACOBAHYBA, CID B. DE ARAÚJO
Departamento de Física-UFPE

Neste trabalho apresentaremos uma análise teórica do processo de geração da soma de frequências (GSF) por pares de átomos em sólidos. O modelo analisado considera a presença de impurezas atômicas introduzidas em um isolante de grande *gap* de energia. A interação entre os átomos é descrita por um potencial de dipolo-quadrupolo e o acoplamento de dipolo elétrico permite a interação do par de átomos com o laser incidente. Foi utilizada a técnica da matriz densidade numa aproximação não perturbativa que permite considerar efeitos de campos elétricos muito intensos [1,2]. Os resultados mostram vários efeitos na forma de linha do sinal de GSF que dependem da potência dos lasers e da amplitude do potencial de interação entre os átomos. A dependência do sinal gerado com as frequências dos lasers incidentes foi também analisada e dentre os resultados obtidos foi identificado um novo efeito de interferência entre rotas coerentes que contribuem destrutivamente para a GSF.

[1] F. A. M. de Oliveira, J.R. Rios Leite e Cid B. de Araújo, *Phys. Rev. A* **38**, 5688 (1988).

[2] J. C. B. Freitas, F.A.M. de Oliveira, S. S. Vianna e Cid B. de Araújo, *Phys. Rev. B* **50**, 6620 (1994).

Mistura de Quatro Ondas em Sistemas de Átomos Interagentes

JACIRA C. B. FREITAS
IF - *Universidade Federal da Bahia-UFBA*
CID B. DE ARAÚJO
Departamento de Física-UFPE

Neste trabalho utilizamos a espectroscopia óptica não linear de mistura de quatro ondas (MQO) para estudo de dois sistemas de átomos interagentes. No primeiro sistema, formado por um par de átomos de dois níveis interagindo através de um potencial de interação do tipo dipolo-quadrupolo, foi estudado teoricamente o comportamento do processo de MQO com ressonância de dois fótons em cascata. Como segundo sistema, consideramos um par de átomos interagentes formado por um átomo de dois níveis e outro de três níveis. Neste caso, foi calculada a resposta óptica que pode ser obtida numa experiência CARS, utilizando três feixes de diferentes frequências. Os cálculos foram feitos utilizando o formalismo da matriz densidade no limite perturbativo (válido para baixas intensidades dos campos aplicados). Foram determinadas as formas de linha espectrais e o comportamento das partes real e imaginária da susceptibilidade de terceira ordem para ambos os sistemas investigados. Os resultados mostram a possibilidade de se inferir diferentes elementos de matriz do potencial de interação.

MEDIDA DE TEMPO DE VIDA VIA ABSORÇÃO DE 2 FÓTONS EM LÂMPADAS DE CATODO OCO: ANÁLISE NUMÉRICA.

NICOLAU ANDRÉ SILVEIRA RODRIGUES, MARCELO GERALDO DESTRO, JOSÉ WILSON NERI
Instituto de Estudos Avançados - CTA
 ARMANDO MIRAGE
IPEN/CNEN

A técnica de medida de tempos de vida via espectroscopia optogalvânica é estudada, utilizando-se de um modelo numérico, baseado em equações de taxa, visando avaliar a influência da duração dos pulsos de laser nos resultados obtidos. É observado que mesmo quando a duração dos pulsos de laser é comparável com o tempo de vida da transição a ser estudada, pode-se inferir os resultados com razoável precisão.

GERAÇÃO DE SEGUNDA HARMÔNICA EM BBO UTILIZANDO LASER DE VAPOR DE COBRE

RUDIMAR RIVA, ROBERTO MASATO ANAZAWA, JAYR DE AMORIM, BENEDITO CHRIST, NICOLAU ANDRÉ SILVEIRA RODRIGUES
Instituto de Estudos Avançados - CTA

Neste trabalho mostramos a geração de segunda harmônica em um cristal de BBO utilizando um laser de vapor de cobre. O emprego de uma cavidade instável auto-filtrante, para o laser de vapor de cobre, permitiu a obtenção de um feixe de radiação em 510.6 nm com uma divergência de apenas 3.4 vezes o limite de difração e uma potência média de 2.0 W, com um grau de polarização linear superior a 99%. Com a focalização deste feixe no cristal de BBO, obtivemos 140 mW de potência média em 255.3 nm, com uma eficiência de conversão de 7%.

Actively stabilized technique for characterizing photorefractive crystals with high diffraction efficiency

SHAOPING BIAN
Harbin Institute of Technology, Harbin
 JAIME FREJLICH
UNICAMP

We report the use of actively stabilized holographic recording technique on comparatively high diffraction efficiency crystals that exhibit rather strong energy coupling and possibly transient self-enhancement effects. We use this technique to characterize the photorefractive properties of a Ti-doped KNSBN crystal. Some photorefractive parameters: effective photorefractive charge density (or the Debye screening length), product of effective electro-optic coefficient and electron-hole competition factor, exponential gain coefficient, photorefractive sensitivity, diffusion length and

the mobility-lifetime product for the dominant carriers are computed from the measurement of the holographic recording at different spatial frequencies. We compare our results with available data for pure and doped KNSBN and for other photorefractive crystals. Our experimental results confirm that diffusion is the dominant charge transport mechanism in this KNSBN:Ti sample.

Mistura de Ondas em Vapor de Rb com Lasers de Diodo

HERON N. FREITAS, ORLANDO DI LORENZO FILHO
Departamento de Física - UFPB
 SANDRA S. VIANNA, JOSÉ W. R. TABOSA
Departamento de Física - UFPE

Experimentos de mistura de ondas, na configuração de conjugação de fase para a frente, realizados em gases moleculares mostraram que para valores elevados da intensidade de um dos feixes incidentes o espectro apresentava uma estrutura com três picos. Os dois picos laterais estão relacionados ao efeito Stark dinâmico e o pico central, cuja largura independe da intensidade da radiação incidente, esta relacionado ao fenômeno PIER-4. O objetivo deste trabalho é realizar um estudo desta estrutura em vapores atômicos. Realizamos experimentos preliminares utilizando radiação de lasers de diodo em vapor de rubídio. Nesses experimentos o pico central não aparece porque ele não deve estar presente em sistemas onde o mecanismo de relaxação é o decaimento espontâneo do nível superior. A próxima etapa deste trabalho será a realização da mistura de ondas no vapor de rubídio na presença de um gás tampão (por exemplo He), de modo que o processo de relaxação possa ser modificado. Desta maneira esperamos observar a estrutura central no sinal de mistura de ondas para frente e realizar um estudo sistemático da sua dependência em relação a intensidade dos feixes, pressão do gás tampão e densidade do rubídio. suporte: CNPq

MODELO DE 4 NÍVEIS PARA A EXPANSÃO SUPERRADIANTE DE PLASMA EM SEMICONDUTORES

JÚNIO M. R. CRUZ, ADAMO F. G. DO MONTE
UnB

O problema da expansão superradiante de plasmas em semicondutores de gap direto foi abordado anteriormente [1] considerando o semiconductor como um sistema de dois níveis. Nesse problema a corrente de fótons que surge na região altamente excitada do semiconductor devido à emissão espontânea amplificada (ASE) produz uma redistribuição espacial dos portadores. As conclusões obtidas anteriormente com um sistema de dois níveis não são adequadas para excitações com fótons de energia muito alta. Esta situação passa

a ser melhor descrita com um sistema de quatro níveis no qual se pode incluir no modelo um tempo de relaxação de energia. Os resultados obtidos com esse modelo diferem do modelo de dois níveis mais acentuadamente com relação à evolução do plasma no centro exato da região excitada. [1] Adamo F.G.do Monte e J.M.R.Cruz, Anais de Óptica do XVII-ENFMC, 277,(1994).

Conversão Ascendente de Energia em Vidros Fluoretos Dopados com $\text{Er}^{(+3)}$

L. A. O. NUNES, T. CATUNDA, A. FLOREZ, M. A.

AGUERTER

Instituto de Física de São Carlos - USP

Y. MESSADDEQ

Instituto de Química de Araraquara - UNESP

Vidros fluoretos são materiais atrativos para conversão ascendente de energia devido a baixa frequência de seus fonons e conseqüente baixas taxas de emissão radiativa. Neste trabalho estudamos a conversão ascendente de energia em uma nova classe de vidros fluoretos dopados com Er^{+3} : $40\text{InF}_3-20\text{ZnE}_2-16\text{BaF}_2-(20-x)\text{SrF}_2-2\text{GaF}_3-2\text{GaF}_3-2\text{NaF}-x\text{ErF}_3$ com $x=1, 2, 3$ e 4 mol%. Nós excitamos o nível $^4\text{F}_{9/2}$ do Er^{+3} com um laser de corante

(650nm) ou o nível $^4\text{I}_{9/2}$ com um laser de safira dopada com Ti (800nm). A temperatura ambiente observamos uma luminescência verde muito forte correspondendo a emissão dos níveis acoplados termicamente $^2\text{H}_{11/2}$ e $^4\text{S}_{3/2}$. Também é observado uma luminescência mais fraca no azul (407nm) devido a emissão do nível $^2\text{H}_{9/2}$ e no vermelho devido a emissão do nível $^4\text{F}_{9/2}$. A intensidade da fluorescência depende da potência de bombeamento como P^n com n 2 para o verde, n 3 para o azul e n 1.7 para o vermelho. As taxas de decaimento e a intensidade relativa da luminescência foram estudadas em função da concentração do ion Er. Também estudamos o comportamento transiente da luminescência (subida e descida).

O processo de conversão ascendente é explicado por transferência de energia envolvendo dois ions excitados de Er e absorção do estado excitado. Modelando o comportamento transiente da luminescência através de equações de taxa concluímos que o processo de transferência de energia é o fator dominante na emissão verde para os vidros com alta concentração ($x > 2$ mol%) de dopante.

POLÍMEROS

Caracterização Polimérica (POL) - 07/06/95

UM NOVO ARRANJO PARA DETERMINAR O COEFICIENTE DE EMISSÃO DE RETROESPALHAMENTO (η) PARA METAIS E POLÍMEROS.

CARLOS ALBERTO FONZAR PINTÃO

Depto. de Física- Fac. de Ciências- Unesp- Campus de Bauru

BERNHARD GROSS

Instituto de física e química de São Carlos- USP- São Carlos, SP

ROBERTO HESSEL

Instituto de Geociências e Ciências Exatas- Unesp- Rio Claro, SP.

Utilizando um canhão de elétrons que trabalha com um feixe de elétrons monoenergético, na faixa de 0,2 a 10keV, ao irradiar amostras de metal e polímero, através de pulsos de corrente, determinamos: Os coeficientes de emissão total (σ), de retroespalhamento (η) e dos secundários (δ) em função da energia. O novo arranjo, inicialmente desenvolvido por Gross e Hessel, na determinação de σ , para os polímeros, sofreu algumas modificações, o que possibilitou determinar η diretamente e δ indiretamente, através da relação $\delta = \sigma - \eta$. Os parâmetros envolvidos nas medidas foram a diferença de potencial entre a tela de aço plana sobre a amostra (V_1) e o eletrodo de base (V_2), a corrente no eletrodo inferior (I_m) e a corrente dos elétrons incidentes (I_p). As equações para cálculo são: $\sigma = 1 - I_m(V_1 - V_2 = 0, t = 0) / I_p$ e $\eta = 1 - I_m(V_1 - V_2 = -50V, t = 0) / I_p$.

UM NOVO SISTEMA DE MEDIDAS NA DETERMINAÇÃO DO ESPECTRO DE ENERGIA DOS ELÉTRONS SECUNDÁRIOS EMITIDOS POR UM SÓLIDO.

CARLOS ALBERTO FONZAR PINTÃO

Depto. de Física- Fac. de Ciências- Unesp- Campus de Bauru

BERNHARD GROSS

Instituto de física e química de São Carlos- USP- São Carlos, SP.

ROBERTO HESSEL

Instituto de Geociências e Ciências Exatas- Unesp- Rio Claro, SP.

Com um feixe eletrônico, monoenergético, incidindo sobre um sólido, é possível arrancar elétrons da amostra, que em sua totalidade possuem energia abaixo de 50eV. Fazendo uma escolha adequada da energia dos elétrons incidentes e aplicando contrapolarizações (V_1) em uma tela de aço sobre o alvo, pode-se medir a corrente no

eletrodo trazeiro, através de um eletrômetro, para o material irradiado. Como esta corrente representa a diferença entre a corrente emitida e a incidente que é mantida constante, foi possível através destas polarizações (V_1), inibir aqueles elétrons emitidos com energia abaixo de eV₁ de atingirem a tela de aço, portanto altero os valores da corrente medida. Através de curvas de corrente em função de V_1 e as suas derivadas pudemos obter o espectro de energia dos secundários. Este estudo foi realizado para a Platina e Teflon-FEP.

DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS TÉRMICOS DE FILMES DE POLIANILINA POR ESPECTROSCOPIA FOTOPIROELÉTRICA.

JOSÉ EDUARDO DE ALBUQUERQUE

DPF/UFV/Viçosa-MG

WASHINGTON LUIS DE BARROS MELO

DEE/UNESP/Ilha Solteira-SP

ROBERTO MENDONÇA FARIA

DFCM/IFSC/USP/São Carlos-SP

A Espectroscopia Fototérmica (Fotoacústica e Fotopiroelétrica) tem sido muito usada na investigação das propriedades térmicas e óticas de materiais sólidos em geral. Nos anos mais recentes, têm surgido muitas aplicações em materiais poliméricos. Dentre os polímeros condutores, as polianilinas se destacam devido à sua alta condutividade, quando dopadas em meios ácidos, e devido à sua grande estabilidade no meio ambiente. Neste estudo, determinamos a difusividade e a condutividade térmicas, e o calor específico, da polianilina (PANI), não-dopada e dopada com ácido clorídrico em diversos pH's, por meio da técnica de espectroscopia fotopiroelétrica. Dados preliminares mostram que a difusividade e a condutividade térmicas, e o calor específico, aumentam com a taxa de dopagem. A condutividade térmica da PANI varia entre o valor $1,63 \times 10^{-4}$ cal/cm s K, quando não-dopada, até o valor $1,05 \times 10^{-3}$ cal/cm s K, na dopagem com HCl 1 M. O calor específico varia entre 0,25 a 0,48 cal/g K, nas mesmas condições.

Estudo por RMN de ¹³C da Polianilina dopada com HCl

MARCUS VINICIUS GIOTTO, TITO JOSÉ

BONAGAMBA, HORÁCIO PANEPUCCI, LUIZ

HENRIQUE CAPPARELLI MATTOSO, ROBERTO

MENDONÇA FARIA

Instituto de Física de São Carlos - USP

JOSÉ DE SOUZA NOGUEIRA

Departamento de Física - UFMT

Neste trabalho estudamos o processo de protonação ácida da polianilina (Pani). Estamos trabalhando com a polianilina no estado emeraldina. A síntese foi realizada a partir da polimerização oxidativa da anilina utilizando o peroxidissulfato de amônia em meio aquoso ácido (HCl 1.0 M). O polímero com diferentes graus de dopagem é obtido partindo do estado emeraldina base (polímero isolante $pH=10$), por imersão da amostra em solução de HCl com pH controlado, o que promove um aumento da condutividade em até 10 ordens de grandeza, podendo chegar a 5 S/cm. Utilizamos a técnica de espectroscopia de alta resolução em sólidos por RMN, fazendo polarização cruzada, desacoplamento em alta potência e rotação da amostra em torno do ângulo mágico. O estudo das alterações nos espectros de ^{13}C , produzidas pelo processo de dopagem da polianilina com HCl , é realizado observando separadamente os espectros dos carbonos protonados daqueles não protonados. Neste procedimento, introduzimos um tempo de espera da ordem de us entre a excitação e a aquisição do sinal; além disso, fazemos a variação do tempo de contato para a transferência de polarização na sequência de pulsos da polarização cruzada. Agradecimentos: FAPESP, FINEP, CNPq, CAPES

Modelos Teóricos de Polímeros (POL) - 07/06/95

Tratamento Alternativo para o Cálculo das Polarizabilidades de Cadeias Poliméricas Heterocíclicas

TERTIUS L. FONSECA, CELSO P. DE MELO
Departamento de Física - UFPE

BERNARD KIRTMAN

Department of Chemistry - University of California Santa Barbara

Recentemente um tratamento alternativo para o cálculo da polarizabilidades lineares e não-lineares de cadeias poliméricas longas foi aplicado para o poliacetileno. Esse tratamento se baseia na observação de que a distribuição de carga induzida em uma cadeia submetida à ação de um campo elétrico externo obedece a um perfil característico em que a carga líquida por sítio rapidamente atinge um valor de saturação no interior da cadeia. Assim, um tratamento tipo matrizes transferência pode ser então utilizado para a determinação da estrutura eletrônica da cadeia polarizada. Os resultados obtidos segundo a técnica de campo finito para a polarizabilidade linear e a segunda hiperpolarizabilidade de cadeias longas de poliacetileno estão em excelente concordância com os valores extrapolados de cálculos tipo primeiros vizinhos realizados para oligômeros de tamanho crescente. No presente trabalho

é mostrado que esse tratamento pode ser estendido para o caso de cadeias poliméricas heterocíclicas como as do polipirrol e do politiofeno. Para isso, uma renormalização prévia das interações deve ser realizada, de modo a reduzir formalmente a estrutura mais complexa dessas cadeias ao caso de uma cadeia diatômica. Os resultados para as polarizabilidades são apresentados e em cada caso são analisados os critérios para o aparecimento de estados localizados devido à ação do campo. (Apoio FACEPE, CNPq e FINEP).

ESTUDO DE CADEIAS DE POLI(4-FENILANILINA) E POLIANILINA E

TARCIS CORDEIRO BASTOS

Rhodia S.A. e IFUSP

JOSÉ REZENDE PEREIRA NETO

EFEI

MARÍLIA JUNQUEIRA CALDAS

IFUSP

Estudamos neste trabalho o processo de polimerização e o efeito da oxidação sobre a estrutura de cadeias dos polímeros poli(4-fenililina) e polianilina. A otimização de geometria, com cadeias de até oito anéis aromáticos, foi obtida com o método semi-empírico MNDO-PM3. Os resultados mostraram uma semelhança entre os polímeros estudados, com relação à ocorrência de polimerização a partir de fragmentos, e também para a produção de sítios para bipólarons. Foi ainda verificado que a estrutura da cadeia é afetada pela oxidação, dando origem a anéis quinóides e consequente diminuição dos ângulos de torção entre os anéis, ou seja, também a planaridade é afetada pelo grau de oxidação. Para a polianilina, a cadeia com grau de oxidação intermediário (esmeraldina) foi a que se mostrou mais planar. O polímero poli(4-fenililina) também apresentou uma dependência da planaridade com o grau de oxidação. A cadeia totalmente oxidada apresentou planaridade maior que a não oxidada, com ângulos de torção entre anéis bastante próximos dos valores encontrados para a forma esmeraldina da polianilina. As características dos sítios de Nitrogênio na cadeia do poli(4-fenililina), tanto geométricas quanto de concentração de carga, são muito próximas às encontradas na polianilina. Concluímos que o poli(4-fenililina) mostra-se promissor como polímero condutor, uma vez que o processo de condução por protonação (mecanismo ativo nas polianilinas) depende tanto da planaridade da cadeia (delocalização π) quanto das características dos sítios de bipólarons.

CONDUTIVIDADE AC EM POLIANILINA E POLI(O-METOXIANILINA)

ROBERTO MENDONÇA FARIA, JOSÉ DE SOUZA NOGUEIRA
 IFSC-USP
 CARLOS MAURICIO LEPIENSKI
 DF-UFPR

Medidas de condutividade ac em polianilina (PANI) e poli(o-metoxianilina) (POMA) para diferentes graus de dopagem e diferentes temperaturas, mostraram um comportamento padrão semelhante aos observados em condução iônica de materiais vítreos. Abaixo de uma determinada frequência crítica ω_c , a condutividade é independente da frequência, tendo um comportamento $\sigma(\omega)$ proporcional a ω^n ($n \leq 1$) para $\omega > \omega_c$. Assumimos que a dopagem do material não é homogênea em volume, mas formam-se microdomínios condutores. Dependendo da frequência o processo de condução pode ser via inter-domínios ou localizados no interior dos domínios. Construímos um modelo envolvendo dois processos de relaxação e a partir dos ajustes teórico-experimentais obtivemos determinados parâmetros de condução desses polímeros.

Aplicações Tecnológicas (POL) - 07/06/95

Thermal stability and diffusion in the Au and Bi implanted AZ1350 photoresist

MARIA FRANCA FERIOLO, RENATO B. GUIMARAES
 Universidade Federal Fluminense

The thermal stability of Au and Bi implanted AZ1350 photoresist films has been investigated via Rutherford backscattering spectrometry. It is observed that the unimplanted photoresist starts to decompose at 473 K. A shallow implantation of Bi and Au produces a marked improvement in the thermal stability. This indicate that, besides radiation damage, chemical effects also play a role in the improvement of the photoresist's thermal stability. The thermal behaviour of Au and Bi implanted in the photoresist has also been studied. The energy and doses used in this work were properly combined in order to distinguish the radiation damage from the chemical effects.

EFEITOS ELETROQUÍMICOS EM ESTRUTURAS METAL-P(VDF/TrFE)-METAL E SUA RELAÇÃO COM TRANSIÇÃO DE FASE

JOÃO MARIZ G. NETO
 Dep. de Física - Universidade Federal do Piauí - Teresina Pi
 ROBERTO MENDONÇA FARIA

FCM/IFSC/USP

Correntes elétricas e voltagens em medidas com estruturas M_1 -P(VDF/TrFE)- M_2 curto-circuitadas, mostraram forte dependência com os materiais dos eletrodos (Au, Al, Ni e Cu), e variaram com a temperatura, principalmente na região de transição estrutural de fase do polímero. Esse efeito, muito provavelmente, originado por dissociações moleculares nas interfaces metal-polímero, gerando potenciais de contato de origem eletroquímica. Quando os materiais M_1 e M_2 são iguais, a tendência que esses potenciais se anulem; e o efeito se torna mais evidente quando são de materiais distintos. A variação de corrente na região de transição pode estar ligada mudança de resistividade do material.

EFEITOS DA RADIAÇÃO-X EM COPOLÍMEROS P(VDF/TrFE)

HELDER N. DA CUNHA
 Depto. de Física - Universidade Federal do Piauí - Teresina Pi
 LUIS HENRIQUE C. MATTOSO
 EMBRAPA - São Carlos SP
 ROBERTO MENDONÇA FARIA
 FCM/IFSC/USP

Os copolímeros fluorados P(VDF/TrFE) são materiais de interesse tecnológico devido as suas propriedades piezo e piroelétricas. Sob radiação ionizante observa-se que esses materiais apresentam um aumento considerável em sua condutividade. A variação da condutividade induzida com a dose de radiação absorvida depende exclusivamente da interação da radiação com a estrutura do material. Nesse trabalho investigamos a correlação entre esses efeitos em P(VDF/TrFE) de composições molares 60:40 e 70:30, usando além das medidas de condutividade induzida, medidas de conteúdo gel, EPR, difração de raios-x, DSC, GPC e espectroscopia infravermelho. Geração de elétrons, buracos e íons pela radiação contribuem para o aumento da condutividade, enquanto que aprisionamento de portadores em armadilhas, provavelmente devido a radicais livres, agem no sentido de diminuí-la.

FILMES LANGMUIR-BLODGETT (LB) DE LIGNINAS

CARLOS J. L. CONSTANTINO, OSVALDO N. OLIVEIRA JR
 Instituto de Física de São Carlos, USP
 LAURA P. JULIANI, VAGNER R. BOTARO, DÉBORA T. BALOGH, ANTONIO A. S. CURVELO
 Instituto de Química de São Carlos, USP

A fabricação de filmes Langmuir-Blodgett (LB) de ligninas é relatada pela primeira vez. São utilizadas ligninas de bagaço de cana-de-açúcar e da *Pinus caribaea hondurensis*, a qual pode encontrar-se na forma acetilada

(mais hidrofóbica) ou não. De um modo geral, as ligninas de bagaço de cana depositam-se mais facilmente, principalmente porque estes materiais foram extraídos de maneira a se tornarem relativamente monodispersos. Dentre as ligninas de Pinus, que são mais polidispersas, as acetiladas oferecem melhores resultados de deposição porque apresentam grande estabilidade sobre a superfície da água. Durante a deposição o filme de Langmuir é mantido sob pressão de superfície constante, no seu estado condensado. As velocidades de imersão e retirada do substrato (lâmina) variam de 0,5 a 4mm/min, dependendo do tipo de lignina, do substrato (se metalizado ou não), e do número de camadas já depositadas. A taxa de transferência é de aproximadamente 1, e os filmes obtidos são do tipo Y, ou seja, há deposição tanto na subida quanto na descida do substrato. Isso só foi alcançado através de um procedimento inovador, em que a velocidade da barreira na Cuba de Langmuir é controlada durante a deposição para proporcionar uma taxa de transferência máxima. Medidas preliminares indicam que o potencial de superfície dos filmes LB de ligninas de bagaço de cana é negativo, enquanto que o das ligninas de Pinus é positivo. Isto provavelmente deve-se à menor contribuição dos momentos de dipolo das moléculas de ligninas de bagaço, consistente com medidas de potencial dos filmes de Langmuir sobre a superfície de água pura.

Langmuir-Blodgett Mixed Films of Surfactants and Phospholipid

MÔNICA MIRANDA DE MORAIS, NEREIDE S. SANTOS
MAGALHÃES

Laboratório de Imunopatologia Keizo-Asumi (UFPE)

ROSA SOUTO MAIOR

Departamento de Química Fundamental

CELSO P. DE MELO

Departamento de Física - UFPE

While recent work has examined the behavior of mixed films of poloxamer and soya phospholipid by Wilhelmy and Langmuir techniques, the penetration of the surfactant into the phospholipid monolayer has been quantified by different thermodynamical approaches. In the present work the possible molecular interaction between these two species present in Langmuir-Blodgett films of mixed nature is examined by FTIR techniques. A block copolymer of ethylene-oxide (EO) and propylene-oxide (PO) surfactant with molecular weight 8350 was used, and the soya phospholipid contained a minimum of 95% of phosphatidylcholine. Standard Langmuir-Blodgett procedures were adopted to determine both the characteristics of the Langmuir film obtained at the air-water interface and the optimized parameters for the best transfer of the films to a solid substrate. The infrared spectra of the solid films were then investigated by Grazing Incidence Reflectance (GIR) and Attenuated Total Reflectance (ATR) experiments to permit an

analysis of the effects of the surfactant-phospholipid interaction. (Apoio FACEPE, CNPq, FINEP and JICA).

SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE COPOLÍMEROS ACRÍLICOS PARA ÓTICA NÃO LINEAR

JOSÉ L. C. FONSECA, DAVID S. SANTOS JR, JOSÉ A. GIACOMETTI

Instituto de Física de São Carlos—Universidade de São Paulo

Recentemente tem-se dado uma grande ênfase ao uso de polímeros para aplicações em ótica não linear, embora vários materiais inorgânicos, tais como KDP, KTP, LiNbO₃ e cristais de boratos possam ser encontrados no mercado para este uso. Isto porque materiais inorgânicos são de difícil fabricação, não sendo, ainda, facilmente integrados em circuitos monolíticos. Soluções para estas e outras desvantagens têm sido procuradas em materiais orgânicos para ótica não linear, sendo os materiais poliméricos uns dos mais promissores. Sistemas do tipo "guest-host", consistindo de misturas de corantes com termoplásticos de T_g (temperatura de transição vítrea) alta, foram uns dos primeiros a serem estudados. Nestes materiais, os dipolos são orientados por um campo elétrico, de forma a produzir-se a anisotropia necessária para que efeitos de ONL ocorram. Tais sistemas apresentam, porém, a desvantagem da não estabilização da polarização. Neste trabalho, uma alternativa para tais sistemas é apresentada. Misturas compostas de corantes hidroxilados (DR1 e DR13) e copolímeros acrílicos hidroxilados (sintetizados através de polimerização via radicais livres) são polarizadas, ocorrendo, ao mesmo tempo, reações de intercruzamento promovidas por diisocianatos. O intercruzamento destes materiais é caracterizado através de espectrofotometria na região do infravermelho, ensaios de inchamento e variação na T_g (através do uso de calorimetria diferencial de varredura—DSC). A estabilização da orientação dipolar promovida por tal intercruzamento é caracterizada através de medidas de corrente termo estimulada.

ESTUDO DO COPOLÍMERO POLI(EPICLORIDRINA-ÓXIDO DE ETILENO) DOPADO COM LiClO₄

A. E. WOLFENSON, T. J. BONAGAMBA, E. L. G. VIDOTO, H. PANEUCCI

Instituto de Física de São Carlos - USP

R. M. TORRESI

Instituto de Química de São Carlos - USP

M. A. DE PAOLI

Instituto de Química - UNICAMP

Os eletrólitos poliméricos têm despertado grande interesse nos últimos anos devido as suas possíveis aplicações como baterias e dispositivos eletrocromáticos.

O Poli(óxido de etileno) (POE) combinado com sais de lítio tem sido o polímero mais estudado até o momento devido ao fato de apresentar boas propriedades mecânicas e alta condutividade iônica para temperaturas superiores aos 60 graus celsius. No entanto, devido a sua alta cristalinidade ele apresenta baixa condutividade a temperatura ambiente. Devido as excelentes propriedades mecânicas que possui a temperatura ambiente, o copolímero da epícloridina e óxido de etileno, poli(epícloridina-óxido de etileno) (PEPI), poderia ser um interessante candidato a utilizar-se como eletrólito polimérico. Embora, não tenhamos realizado uma completa caracterização deste polímero e dos efeitos da dopagem sobre o mesmo. Neste trabalho apresentamos o estudo por meio de RMN de ^{13}C da PEPI e a análise dos efeitos sobre a cadeia polimérica sob dopagem com LiClO_4 . Além disso, realizamos uma completa análise do processo de dissolução do sal no polímero e dos efeitos do solvente no composto resultante. Efetuamos a caracterização de suas propriedades condutoras através de estudos de impedância e medidas de condutividade. Agradecimentos: FAPESP, FINEP, CNPq, CAPES

Estudo da cristalização dos copolímeros P(VDF-TrFE) através de técnicas de medidas de corrente termoestimuladas - TSC

NERI ALVES

Faculdade de ciência e Tecnologia - UNESP

JOÃO MARIZ GUIMARÃES NETO

Univ. Federal do Piauí

Os copolímeros de polivinilideno fluorado com trifluoretileno - P(VDF-TrFE) são ferroelétricos e, ao contrário do PVDF (polivinilideno fluorado), apresentam a transição ferro-paraelétrica antes da fusão. Este fato é de grande interesse por possibilitar estudos que auxiliam na compreensão da ferroeletricidade em polímeros. A transição ferro-paraelétrica nestes copolímeros tem sido motivo de numerosos estudos. Medidas de Calorimetria Diferencial de Varredura (DSC) mostram dois picos além do de fusão para os copolímeros com composições molares de 60/40 e 70/30. Suas posições e a intensidade relativa variam com o método de preparação e com o tratamento térmico dado às amostras. A presença de tais picos tem sido associada à transições ferro-paraelétrica em duas fases do material, embora a natureza destas fases ainda não é consensual. Outra interpretação é baseada na existência de domínios ferroelétricos com diferentes tamanhos. Assim, o pico em temperaturas mais baixas provém da transição de domínios pequenos e o pico a temperatura maior de domínios grandes. Segundo este modelo o tratamento térmico altera a distribuição dos tamanhos dos domínios. Neste trabalho apresentamos medidas de Despolarização Termoestimuladas (TSD) em curto circuito, indicando que a presença dos dois picos está rela-

cionada também com o tempo de descanso da amostra. Apresentamos também medidas de corrente termoestimulada em circuito fechado realizadas durante todo o ciclo de tratamento térmico para diferentes temperaturas e razões de aquecimento, e comparamos os resultados com as medidas de DSC. Constatamos que tratamentos em temperatura intermediária às temperaturas de transições faz com que a amostra cristalize de forma a apresentar um aumento no pico em temperaturas mais altas, indicando um melhor arranjo cristalino e um crescimento dos domínios. Apoio: CNPq, FAPESP e Fundunesp

THERMO-STIMULATED CURRENT ANALYSIS OF POLYURETHANE BASED ON CASTOR OIL

HAROLDO N. NAGASHIMA, WALTER K. SAKAMOTO,
DARCY H. FUJII KANDA
UNESP - FEIS - Ilha Sotaira

In this work, we used thermally stimulated depolarization current (TSDC) and thermally stimulated polarization current (TSPC) method to analyse the mechanisms of the thermo-stimulated current in thin films of polyurethane based on castor oil (PU). The TSDC global and partial method were used to carried out measurements in samples with blocking electrode, in the temperature range 203K to 353K. The characterization of samples used for TSDC global showed three maxima peaks current. The first peak at low-temperature was observed around 223K. It has been associated with end group rotation and motions of short segments of the chain backbone. The second peak that was observed around 313K is associated with motion about the chain backbone of relatively small number of monomer units or motion of side groups. And the third peak was observed around 323K and corresponds with the glass transition temperature. The TSDC partial measurements has showed the activation energy E_a of α peak is about 1,1 eV. And TSPC measurements were realized also in sample with blocking electrode, in the temperature range 300K to 353K. The spectrum of TSPC, above α peak, pointed out the existence of heterocharge. These results confirm the peak observed around 323K is a dipolar relaxation (primary relaxation). FINANCIAL SUPPORT: FUNDAÇÃO BANCO DO BRASIL - F.B.B.

Obtenção e Caracterização de Diodo Usando a Poli(o-metoxianilina)

ROBERTO KOJI ONMORI

Lab. de Microeletrônica da Escola Politécnica da USP

LUIS H. C. MATTOSO, ROBERTO M. FARIA

DFCM Instituto de Física e Química de São Carlos

O objetivo do trabalho é a fabricação e caracterização de um diodo retificador de corrente elétrica usando

a poli(o-metoxianilina) (-POMA-) em substituição ao silício. Usando uma lâmina de vidro como substrato, deposita-se uma película de POMA (5000 Å) através da técnica de "spin coating". Uma nova camada de material fotosensível a UV é depositada e a partir da tecnologia de fotolitografia, tem-se uma "máscara" na superfície da POMA protegendo determinadas regiões. O conjunto é imerso numa solução de HCl. O HCl é um agente dopante em contato com a POMA. Após a secagem e a remoção da fotomáscara, deposita-se prata para os contatos elétricos nas regiões dopadas e não dopadas. Na interface entre a região dopada e a não surge uma barreira de potencial caracterizada pelo equipamento HP-4145B. Resultados preliminares, como a curva corrente por tensão, mostram a presença da barreira com correntes de fuga inferiores a 2nA a -8V e correntes de 30nA a 3,5V.

ESPECTROSCOPIA MECÂNICA EM POLÍMEROS

CARLOS ROBERTO GRANDINI

UNESP - Bauru

As técnicas de Espectroscopia Mecânica (Atrito Interno) para a caracterização de materiais vem sendo muito utilizadas desde a década de 30, contribuindo de maneira bastante efetiva para a compreensão dos mecanismos de interação entre defeitos e a matriz metálica, além de oferecer informações com relação à transições de fase e outras propriedades mecânicas. Este trabalho tem como objetivo mostrar a possibilidade de se utilizar as técnicas de espectroscopia mecânica para a caracterização de polímeros. Para tanto, utilizamos um Pêndulo de Torção operando com frequência entre 1.0 e 5.0 Hz, num intervalo de temperatura compreendido entre 300 e 700 K. São apresentados espectros de relaxação mecânica em polímeros comerciais como PVC, Nylon e Teflon. (Apoio: CNPq e FUNDUNESP).

Desenvolvimento e Análise de Polianilinas (POL) - 07/06/95

ESTUDO DA INTERCONVERSÃO DOS ESTADOS DE OXIDAÇÃO DA POLIANILINA: LEUCOESMERALDINA, ESMERALDINA E PERNIGRANILINA.

JOSÉ EDUARDO DE ALBUQUERQUE

DPF/UFV/Viçosa-MG

LUIZ HENRIQUE CAPARELLI MATTOSO

CNPq/EMBRAPA/São Carlos-SP

ROBERTO MENDONÇA FARIA

DFCM/IFSC/USP/São Carlos-SP

ALAN GRAHAM MACDIARMID

Department of Chemistry, University of Pennsylvania,
Philadelphia

As polianilinas (bases) podem ser classificadas em três estados distintos de oxidação: leucoesmeraldina (LB), a forma totalmente reduzida, esmeraldina (EB), a forma metade-oxidada, e pernigranilina (PB), a forma totalmente oxidada. O estado de oxidação varia continuamente da base leucoesmeraldina até a base pernigranilina com a adição de oxidante, e vice-versa, com a adição de redutor. Neste trabalho, através da espectroscopia ótica UV-Visível, estudamos a conversão entre os estados de oxidação da polianilina (PANI) e da poli(o-metoxianilina) (POMA). Utilizamos o peroxidissulfato de amônia, como agente oxidante, e o ácido ascórbico, como agente redutor, para as soluções dos polímeros em N-metilpirrolidona (NMP). Os espectros UV-Vis apresentam basicamente duas bandas de absorção: uma em aproximadamente 3,8 eV, transição $\pi-\pi^*$ (para as três formas: LB, EB e PB), e outra em torno de 2 eV (para as formas EB e PB). Para a PANI, observamos pontos isobésticos nos espectros, quando uma base se transforma em outra, sendo uma indicação de que, a nível molecular, uma forma se transforma diretamente em outra, sem passar por formas intermediárias. Dados preliminares para a POMA mostram, também, pontos isobésticos nos espectros, porém em posições diferentes.

ESTUDO DA CINÉTICA DE ADSORÇÃO DE FILMES AUTO-MONTADOS DE POMA

VALTENCIR ZUCOLOTTI, OSVALDO N. OLIVEIRA JR

Instituto de Física de São Carlos, USP

LUIZ H. C. MATTOSO

CNPq/EMBRAPA - São Carlos

A técnica de auto-montagem para a formação de filmes ultra-finos de polímeros condutores tem proporcionado excelentes resultados, com a produção de novos materiais de características únicas. O processo de adsorção das cadeias poliméricas ao substrato sólido, entretanto, ainda não foi completamente elucidado, particularmente no que diz respeito à cinética de adsorção. Nesse trabalho foi realizado um estudo sistemático da adsorção de camadas de poli(o-metoxianilina) (POMA) alternadas com camadas de ácido polivinil sulfônico (PVS), através de medidas de absorvância no UV-vis. As deposições foram realizadas com soluções de $\text{pH} \approx 3.0$ e concentração de 10^{-2}M . Observou-se que a quantidade de material adsorvido aumenta abruptamente nos primeiros segundos de imersão do substrato, passa por um pico em aproximadamente 2-3 minutos, e depois atinge o estado estacionário no qual não há mais deposição. O tempo em que ocorre esse pico varia com o número de camadas já depositadas. A adsorção direta no substrato é a mais lenta, sendo que o pico se desloca para tempos menores quando a camada de POMA é depositada sobre 4, 9 ou 14 bicamadas de POMA/PVS.

Não se sabe, por enquanto, que mecanismo controla a adsorção, embora nossos resultados iniciais indiquem claramente que o controle não é por difusão exclusivamente, como ocorre com alguns polieletrólitos.

FILMES LANGMUIR-BLODGETT (LB) DE POLIANILINAS

ANTONIO RIUL JR, GUSTAVO D. TELLES, OSVALDO N. OLIVEIRA JR

Instituto de Física de São Carlos - USP

LUIZ H. C. MATTOSO

EMBRAPA/CNPDI (São Carlos - SP)

Filmes Langmuir-Blodgett (LB) de polianilina (PANI) foram fabricados sobre lâminas de vidro bk7. As condições otimizadas para deposição foram determinadas através de um estudo minucioso dos parâmetros que influenciam a formação da monocamada, sua estabilidade sobre uma subfase ácida (pH=2) e a posterior transferência sobre a superfície de um substrato sólido. Os filmes LB foram caracterizados por espectroscopia UV-vis, voltametria cíclica, e medidas de condutividade elétrica e de potencial de superfície. Os resultados de UV-vis são consistentes com os publicados na literatura para filmes de PANI fabricados por outros métodos. A absorvância aumenta linearmente com o número de camadas depositadas, o que indica que cada camada contribui com uma mesma quantidade de material. As medidas de potencial de superfície mostram que os filmes LB são relativamente homogêneos em nível macroscópico, embora alguns defeitos possam ser notados. Através de voltametria cíclica pôde-se verificar que os filmes apresentam eletroatividade, similar à encontrada na literatura para a PANI preparada convencionalmente por centrifugação. A condutividade dos filmes LB de PANI é da ordem de 10^{-4} S/cm, com exceção de um filme exposto durante trinta dias a vapores de m-cresol. Neste caso, a condutividade atingiu 10^{-2} S/cm. Estes valores de condutividade são inferiores aos obtidos com filmes convencionais de PANI, embora maiores que os relatados para outros filmes LB similares.

EFEITOS DE LOCALIZAÇÃO ELETRÔNICA EM COPOLÍMEROS DE POLIANILINA

ALEXANDRE CAMILO JUNIOR

Universidade de São Paulo - Instituto de Química de São Carlos

DOUGLAS SOARES GALVÃO

Universidade Estadual de Campinas - IFGW

A presença de estados estendidos em cadeias desordenadas de polianilina protonada como a origem da transição metálica tem sido uma questão bastante investigada nos últimos anos [1-3]. Neste trabalho nós investigamos a estrutura eletrônica de polianilina-p-

fluoroanilina e derivados, dentro de uma aproximação "tight-binding". Nós investigamos mais especificamente os efeitos da desordem estrutural nos processos de condução. Os autores são gratos ao "Centro Nacional de Supercomputação" (Cray MP-Y2), ao IFGW e ao IPSC pelo suporte computacional.

[1] D.S. Galvão, D.A. dos Santos, B. Laks, C.P. de Melo & M.J. Caldas Phys. Rev. Lett., **63**(7), 786(1989); **65**(4), 527(1990)

[2] H.-L. Wu & P. Philips Phys. Rev. Lett., **66**, 1366(1991)

[3] F.C. Lavarda, M.C. dos Santos, D.S. Galvão & B. Laks Phys. Rev. Lett., **73**(9), 1267(1994)

Suporte Financeiro : CAPES

EFEITO DO CAMPO ELÉTRICO NA FORMAÇÃO DE FILMES AUTO-MONTADOS

RICARDO S. PONTES, OSVALDO N. OLIVEIRA JR
Instituto de Física de São Carlos—Universidade de São Paulo

MARIA RAPOSO

Faculdade de Ciências e Tecnologia—Universidade Nova de Lisboa, Portugal, Bolsista PRAXIS XXI (JNICT, Portugal)

LUIZ H. C. MATTOSO

CNPDI, EMBRAPA, São Carlos, SP.

Filmes auto-montados (*self-assembly*) (SA) são formados pela adsorção espontânea de camadas alternadas de materiais poliméricos, catiônicos e aniônicos, sobre substratos sólidos. Esta adsorção ocorre devido à interação eletrostática entre as cadeias poliméricas de sinais opostos. Portanto, é de se esperar que a aplicação de um campo elétrico externo apropriado venha facilitar a deposição de camadas, e por isso iniciamos um projeto para investigar o seu efeito no processo de adsorção. Foi utilizado vidro condutor (ITO) como substrato e depositadas camadas alternadas de ácido polivinil sulfônico (PVS) e poli(o-metoxianilina) (POMA), partindo de soluções de concentração de 0.01 M e pH=3. Ao contrário do que ocorre com substratos de vidro comum, para o ITO deve-se depositar primeiramente uma camada de PVS. Comprovamos que a aplicação de um campo de cerca de 3 V/cm aumenta consideravelmente a adsorção de PVS, e conseqüentemente de POMA numa próxima camada. Em algumas experiências com campos mais elevados (30 V/cm), verificou-se que há formação de um filme extremamente espesso e de cor cinzenta. Esta cor denota que a POMA provavelmente foi degradada devido à super-oxidação. Efeitos similares, mas em menor proporção, são observados para campos de 10 V/cm. Dentre os outros efeitos causados pela aplicação do campo, destacam-se a mudança no grau de dopagem da POMA, o que em alguns casos pode prejudicar a formação de multicamadas. Estamos no momento realizando experiências

para verificar a influência de outros parâmetros importantes para a deposição, como a concentração do polímero em solução, além de possíveis processos de eletroforese que podem ocorrer com a aplicação do campo. O objetivo final é empregar campos elétricos como agentes controladores da fabricação de filmes com arquiteturas variadas para aplicações específicas.

CONDUTIVIDADE AC E CORRENTES TERMOESTIMULADAS EM POLIANILINAS

JOSÉ DE SOUZA NOGUEIRA
Depto. de Física/ICET - UFMT
 LUIS HENRIQUE C. MATTOSO
EMBRAPA - São Carlos SP
 ROBERTO MENDONÇA FARIA
FCM/IFSC/USP

As polianilinas são polímeros condutores sob dopagem prótonica. Nesse trabalho realizamos alguns estudos da evolução de sua condutividade dc em função da temperatura, no sentido de verificar a relação $\sigma \propto T^{-1/n}$ (variable range-hopping), onde n está ligado ao fator de dimensionalidade da condutividade. Acima da temperatura ambiente observa-se um pico acentuado, em torno de 80°C, na medida de corrente termoestimulada, a qual está associada a uma mudança, na estrutura conformacional do polímero. Cálculos aproximados baseados na subida inicial do pico de corrente deriva o valor da energia de ativação da transição estrutural.

Aplicações Tecnológicas e Polímeros (POL) - 08/06/95

Capacitores Poliméricos Preparados a Plasma

MADALENA ALICE PRIANTE, ROGÉRIO PINTO MOTA, MAURICIO ANTONIO ALGATTI
Departamento de Física e Química, Faculdade de Engenharia, UNESP, Campus de Guaratinguetá

A partir de uma descarga elétrica de corrente contínua de 800 V negativos estabelecida entre dois eletrodos circulares e paralelos, na presença de atmosferas de hidrocarbonetos e siloxanos entre 0,1 e 1,0 Torr, foram obtidos plasmas polimerizantes decorrentes da fragmentação destes monômeros, resultando em um complexo mecanismo de reestruturação, do qual foram obtidos polímeros orgânicos na forma de filmes finos com espessura entre 2000 a 8000 Å. Estes filmes por sua vez, provenientes de C_2H_2 e $Si_2O(CH_3)_6$ foram previamente depositados sobre substratos de vidro recobertos por uma camada fina de alumínio de alta condutividade elétrica. O conjunto alumínio/polímero foi novamente

levado a um sistema evaporador e sobre o mesmo depositado mais uma camada fina de alumínio de modo a constituir um conjunto com formato de capacitor de placas paralelas, com contatos elétricos bem estabelecidos sobre o mesmo. Foram efetuadas medidas de capacitância em função da frequência, no intervalo de 0,1 a 100 KHz, resultando valores entre 0,5 μF a 500 pF, para diferentes condições de preparação destes capacitores. Por último foi observado uma razoável regularidade na espessura destes capacitores, verificada por meio de análise perfilométrica, sendo proposto um modelo para explicar a alteração da capacitância destes capacitores poliméricos com a frequência.

Comportamento de aditivo anti-estático, sob luz e calor, em polietileno

ROGÉRIO PARRA
Instituto de Física da Universidade de São Paulo Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de São Paulo
 ANA REGINA BLAK
Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Foram estudados os efeitos de tratamentos térmicos, de iluminação com luz ultravioleta e do envelhecimento natural, através da técnica de CDTE-correntes de despolarização termicamente estimuladas. Os aditivos anti-estáticos de uso interno migram para a superfície do material em que são aplicados e podem ser retirados por manuseio do material, por atrito. As amostras foram especialmente preparadas pela ITAP Embalagens S.A.-Divisão CROMEX. O filme foi extrudado sem pigmentos (cor transparente) ou outros aditivos. Retirou-se uma amostra do filme puro e de filmes com "masterbatch" anti-estático nas proporções de 2%, 5%, 10% e 20% em massa, resultando num total de 5 amostras. A espessura nominal dos filmes foi de 100 μm ($\pm 10\%$), parede dupla. Medidas de absorção óptica foram feitas nas regiões espectrais do ultravioleta, visível e infravermelho, das quais procuramos verificar: i) A possibilidade de se identificar diferenças na concentração entre as amostras recebidas; ii) Se havia efeitos do ato de realizar um ou dois ciclos térmicos de medidas de CDTE; iii) Se o resfriamento à temperatura de nitrogênio líquido e retorno à temperatura ambiente causa diferença nos espectros. Nas medidas de CDTE, procuramos verificar: i) a dependência da altura dos picos com a concentração do aditivo; ii) a dependência da altura dos picos de corrente com o campo de polarização; iii) os efeitos de tratamentos térmicos nas amostras, simulando condições encontradas na distribuição física (transporte rodoviário, ferroviário e marítimo); iv) os efeitos de exposição à radiação ultravioleta durante vários intervalos de tempo, e por fim, v) estimou-se o efeito do tempo de vida de prateleira da amostra. O armazenamento durante quase um ano poderia ter afetado a integridade da amostra recebida.

Electro-optical characterization of poled synthesized organic polymeric films

SUSANA A. PLANAS

UNICAMP - IFGW (on leave from U.F.F.)

M. F. VILLANI, M. P. R. SANCHES

CPqD Telebrás

H. L. FRAGNITO

Unicamp - IFGW

Polymer films doped with organic molecules oriented in an electric field (poled) are promising materials for the confection of integrated electro-optical modulators. The potential application of these devices in telecommunications, the simplicity of the fabrication process, and the possibility of choosing the dopant molecule to tailor specific applications have attracted considerable interest for these materials. A research program to evaluate this technology is currently in progress at CPqD/Telebrás in collaboration with the Physics Institute at Unicamp. In this paper we report on the electro-optical properties of chemically bonded doped PMMA (Poly-Methyl-Metha-Acrylate) developed under this program. Chemically bonded doping is expected to have advantages over physical doping for it allows for higher concentration (and thus larger electro-optic coefficient) and longer relaxation times of the poled dopant molecules. The functionalized polymer is obtained by radical copolymerization (MMA/MMA grafted with Disperse Red chromophore). The films, typically 1 - 2 μm thick, were deposited by the spin coating method on a transparent substrate (borosilicate glass with or without ITO coating used as a transparent electrode). Gold coplanar electrodes with a gap of 15-20 μm were deposited on top of the film. The electro-optic coefficient r_{33} was measured using cross polarizers and a Soleil-Babinet compensator to determine the polarization rotation of a laser beam ($\lambda = 633 \text{ nm}$) as a modulation signal was applied to the electrodes. For different samples with poling field strengths in the range 0.3-0.5 MV/cm and different sub T_g annealing conditions we obtained r_{33} in the range 0.1 - 20 pm/V. The decay of the electro-optic coefficient was monitored during 120 days. Typically, r_{33} decays to 20 % in 20 - 30 days and stabilize to 15 % of the fresh value after 50 - 60 days.

Preparação e Caracterização de Filmes de Langmuir-Blodgett de Retinal

MIRNA M. SANCHEZ, CELSO P. DE MELO

Departamento de Física - UFPE

A técnica de Langmuir-Blodgett é utilizada para a preparação de estruturas organizadas de derivados do retinal, molécula essencial em importantes processos biológicos como a visão em animais e o armazenamento de energia na membrana púrpura de bactérias.

As isotermas de compressão dos filmes de Langmuir correspondentes obtidos na interface ar-água são levantadas e, após serem determinadas as respectivas pressões de colapso, as condições de transferência sucessiva para substratos sólidos são otimizadas. Os filmes de Langmuir-Blodgett assim obtidos são então analisados pela comparação dos diferentes espectros de transmissão e reflexão no infravermelho. O interesse final por essa família de compostos se deve a sugestões teóricas de que a preparação de amostras altamente orientadas desses materiais poderiam servir de base à construção de chaveadores óticos que explorassem a fotossomerização característica do retinal. (Apoio CNPq e FINEP).

EFEITO DA ABSORÇÃO DE UMIDADE NA CONDUTIVIDADE DO TEFLON FEP

MARIA RAPOSO, PAULO ANTÓNIO RIBEIRO

Faculdade de Ciências e Tecnologia—Universidade Nova de Lisboa, Portugal, Bolsistas PRAXIS XXI

(JNICT, Portugal)

GUILHERME F. LEAL FERREIRA, JOSÉ A.

GIACOMETTI

Instituto de Física de São Carlos—Universidade de São Paulo

O tetrafluoretileno propileno (Teflon FEP) é um polímero que pode armazenar densidades de carga elevadas e apresenta uma elevada resistividade elétrica de volume. Resultados do crescimento do potencial de superfície de amostras de Teflon FEP carregadas pelo método de corona a corrente constante, efetuadas em diferentes condições de umidade, mostraram que a condutividade destas amostras cresce com o aumento da umidade na atmosfera. Poder-se-ia atribuir este fenómeno à existência de correntes de superfície, mas esta hipótese foi excluída por estas correntes serem consideravelmente inferiores à corrente de carga e por não haver espalhamento de carga na superfície da amostra. Medidas com técnica do pulso térmico mostram que o centróide das cargas é deslocado para o interior da amostra quando há umidade na atmosfera de carregamento. Observa-se também um decaimento da carga de superfície quando as amostras são colocadas em ar úmido (em circuito aberto). Estes fenómenos podem ser interpretados se considerarmos que o Teflon FEP adsorve as moléculas de vapor de água na sua região amorfa. Os ions H^+ e ou OH^- seriam, em ar úmido, os responsáveis pela condução de volume neste material e pelo decaimento do potencial de superfície em circuito aberto.

*Transições de Fase em Material Polimérico
(POL) - 08/06/95*

**ESTUDO DO PROCESSO DE
POLARIZAÇÃO FERROELÉTRICA DO
PVDF**

PAULO ANTÓNIO RIBEIRO, MARIA RAPOSO
*Faculdade de Ciências e Tecnologia—Universidade Nova
de Lisboa, Portugal, Bolsistas PRAXIS XXI (JNICT,
Portugal)*

JOSÉ A. GIACOMETTI
*Instituto de Física de São Carlos—Universidade de São
Paulo*

AIMÉ S. DE REGGI
*National Institute of Standards and Technology,
Gaithersburg—USA*

Utilizando-se o triodo de corona com corrente constante foram realizadas medidas sistemáticas do processo de carregamento elétrico no polímero Fluoreto de Polivinilideno (PVDF) estirado biaxialmente (contendo estruturas cristalinas na fase α e β). Numa atmosfera controlada de ar seco foram estudadas as dependências do processo de carregamento com as espessuras das amostras, corrente de carregamento e em sucessivos processos de carregamento. A partir de medidas de raios X e espectrofotometria de infravermelho foram observadas transições da fase α para a fase δ e posteriormente para a fase β quando as amostras foram sujeitas a campos a partir de 500 MV/m. A técnica do pulso térmico foi utilizada para provar que a reorientação ferroelétrica pode ser associada ao patamar mostrado nas curvas de subida do potencial. Também mostrou-se que os perfis de polarização, durante todo o processo de reorientação ferroelétrica, são praticamente uniformes no interior da amostra.

**IS DIFFERENTIAL SCANNING
CALORIMETRY A SUITABLE TOOL FOR
STUDYING WAX POLYMER
ELECTROLYTES?**

CLAUSYMARA LARA SANGIORGE
Departamento de Química, CEFET-BH

GLAURA GOULART SILVA
Departamento de Química, ICEX-UFMG

OLÍSIA DE OLIVEIRA DAMASCENO, ARMANDO LOPES
DE OLIVEIRA

Departamento de Física, ICEX-UFMG

ANATÁLIA LARA SILVA
Departamento de Engenharia Química, EE-UFMG

In the present work we have used Differential Scanning Calorimetry (DSC) for studying

the Poly(Ethylene Glycol-400)Diesterate- $LiClO_4$ system (PEGD/ $LiClO_4$) which has been previously explored by using Impedance Spectroscopy [1]. DSC is an usual method for determining different phases properties of Polymer Electrolytes as for example melting (T_m), glass transition (T_g) temperatures and fusing enthalpies [2]. Our results have shown a characteristic T_m for a range of $LiClO_4$ concentrations between 7.6 and 16.7 m/m (%). A second T_m was observed for all concentrations at least up to 12.5 m/m (%). The T_g are at the same time influenced by crystalline phases and salt concentrations. In our measurements they have shown complex features.

[1] A.L. de Oliveira, O. de O. Damasceno, P.R. Silva, C.L. Sangiorge, M. Armand and M. Kleitz, Solid State Ionics 60, 99 (1993)

[2] S. Besner and J. Prud'homme, Macromolecules 22, 3029 (1989)

**Estudo por RMN de 7Li e de ^{13}C no Polímero
DPEG-400 dopado com $LiClO_4$**

MARCUS VINICIUS GIOTTO, TITO JOSÉ
BONAGAMBA, PEDRO DONOSO, EDSON LUIZ GEA
VIDOTO, HORÁCIO PANEPUCCI

Instituto de Física de São Carlos - USP

ARMANDO LOPES DE OLIVEIRA
Departamento de Física, ICEX, UFMG, MG

Neste trabalho estudamos o processo de relaxação spin-rede do 7Li em função da temperatura e sua forma de linha no polímero sólido (limite de rede rígida), bem como os espectros de alta resolução de ^{13}C . O Polímero em estudo é o Polietilenoglicol Diesterato(DPEG), um diéster de ácido esteárico e polietilenoglicol de peso molecular 400. O complexo $(DPEG)_n LiClO_4$, onde $n = [O]/[Li]$ indica o grau de dopagem, possui temperatura de fusão em torno de 35 graus celsius. As taxas de relaxação spin-rede estudadas neste polímero estão associadas com a modulação da interação dipolar magnética entre os núcleos de lítio e os prótons na cadeia polimérica. Observando a transição central da linha espectral do lítio, verificamos que a interação dominante ocorre entre lítio e hidrogênio, enquanto que a interação entre os lítios é 10 vezes menor. O acoplamento quadrupolar, observado pela distância entre as linhas satélites, sofre um abrupto decréscimo em torno da temperatura de fusão. A aplicação da técnica de espectroscopia de alta resolução em sólidos por RMN de ^{13}C no polímero, utilizando desacoplamento a alta potência e rotação da amostra em torno do ângulo mágico pode nos dar informações sobre a estrutura do polímero. Os espectros de ^{13}C podem contribuir para a melhor compreensão de possíveis transições do tipo ordem-desordem presentes neste material.

Agradecimentos: FAPESP, FINEP, CNPq e CAPES

**POLY(ETHYLENE GLYCOL-400)
DISTEREATE-BASED POLYMER
ELECTROLYTES STUDIED BY RAMAN
SPECTROSCOPY**

CLAUSYMARA LARA SANGIORGE

Departamento de Química, CEFET-BH

GLAURA GOULART SILVA

Departamento de Química, ICEX-UFMG

RAIGNA MACHADO DA SILVA, MARCOS ASSUNÇÃO

PIMENTA, OLÍSIA DE OLIVEIRA DAMASCENO,

ARMANDO LOPES DE OLIVEIRA

Departamento de Física, ICEX-UFMG

We have used Raman Spectroscopy for studying Lithium Perchlorate dissolved in Poly(Ethylene Glycol-400) Distereate systems (PEGD/ $LiClO_4$) at ten different compositions expressed as $n = [O]/[Li]$. We have previously emphasised [1] that the two parts of PEGD molecule endow it with interesting properties. They have different polarizabilities what causes a segregation at microscopic level between a no polar crystalline phase (hydrocarbon branches) and a polar quasi-liquid phase (segments of ethylene oxide). It has been shown by other groups that Raman Spectroscopy is a suitable tool for picking up free ions, ion pairs and in some cases ion aggregates formation in Poly(Propylene Oxide)-based materials [2]. Apparently it is also the case for some Poly(Ethylene Glycol)-based complexes where it is possible to follow the evolution of oxygen rings breathing modes surrounding Na^+ ions as a function of host polymer molecular weight and salt concentration [3]. Our results are preliminary. They show that PEGD- $LiClO_4$ systems do not have well resolved Li^+ -oxygen breathing modes. Consequently it is not an easy task up to now to follow free ions, ion pairs or ion aggregates formation by using our preliminary data. There are therefore some evidences from our preliminary results that the Raman acoustic response region can be explored for picking up information about dynamic order-disorder transitions at the micro structure level in PEGD/ $LiClO_4$ systems [4].

[1] A.L. de Oliveira, O. de O. Damasceno, P.R. Silva, C.L. Sangiorge, M. Armand and M. Kleitz, *Solid State Ionics* 60, 99 (1993).

[2] L.M. Torell and S. Schantz, *Polymer Electrolytes Reviews-2* (Elsevier Applied Science, London and New York), Chapter 1 (1989).

[3] K. Kasatani and H. Sato, *Chemistry Letters*, 991 (1986).

[4] To be published

*Estrutura Eletrônica de Cadeias Poliméricas
(POL) - 08/06/95*

**FUNÇÃO DE ESPALHAMENTO DE
NEUTRONS EM POLÍMEROS ESTRELA:
UM MODELO E VÁRIAS APROXIMAÇÕES.**

DORA IZZO

USP

EDUARDO MENDES JR

Laboratoire d'Ultrasons et de Dynamique des Fluides

Complexes

CARLOS M. MARQUES

Institut Charles Sadron

O estudo de gels, no âmbito dos fluidos complexos, tem atraído grande interesse devido à sua aplicabilidade na indústria química. O tipo de reticulação que ocorre a partir do sol é responsável por algumas das propriedades dos gels. Análises a partir de experiências de espalhamento de neutrons e de raios X fornecem informação sobre o tipo de estrutura presente. Estudos teóricos baseados em modelos estatísticos permitem prever a forma das funções de espalhamento fornecidas pela experiência. Nesse trabalho propomos um modelo teórico que consiste em representar o gel como uma solução diluída de polímeros-estrela. Os polímeros-estrela em solução foram caracterizados por Daoud e Cotton. A intensidade de espalhamento é calculada a partir de primeiros princípios. Obtemos uma forma analítica para a qual apresentamos dois métodos de tratamento. O primeiro consiste em tratar aproximadamente as integrais de convolução, o segundo consiste em considerar um fundido de "super-estrelas" e, a partir delas, desenvolver uma "random phase approximation" (RPA) para esse novo sistema-modelo. Essas aproximações são consistentes à medida que fornecem formas qualitativamente comparáveis. Esse trabalho é relevante pois é capaz de reproduzir resultados experimentais recentes; em particular nossas curvas apresentam o pico anômalo observado por Mendes et al.

**A MOLECULAR ORBITAL STUDY OF THE
GEOMETRICAL AND ELECTRONIC
PROPERTIES OF POLY(P-PHENYLENE
VINYLENE) - PPV OLIGOMERS**

ALEXANDRE CAMILO JUNIOR

Universidade de São Paulo - Instituto de Química de São Carlos

DOUGLAS SOARES GALVÃO

Universidade Estadual de Campinas - IFGW

We report a geometrical and spectroscopical study of poly-p-phenylene vinylene (PPV) oligomers as a function of the number of rings. PPV has been subject of intense study due to its unusual properties

[1,2]. We have studied ground, excited (singlet and triplet) and ionic states (± 1 and ± 2 , corresponding to positive and negative polarons and bipolarons, respectively) using the Parametric Method 3 (PM3). We have also performed a comparative spectroscopic study using different semi-empirical methods, such as INDO/S-CI (intermediate neglect of differential overlap method with spectroscopic parametrization), PPP (Parise-Parr-Pople model for the π electrons), VEH (valence effective Hamiltonian method) and modified EHT (extended Hückel theory). The authors are grateful to the "Centro Nacional de Supercomputação" (Cray MP-Y2), IFGW and IFSC for the computational support.

[1] Z.G. Soos, S. Ramasesha & D.S. Galvão Phys. Rev. B, 47(4), 1742(1993)

[2] Z.G. Soos, S. Ramasesha & D.S. Galvão Phys. Rev. Lett., 71(10), 1609(1993)

Financial Support : CAPES

Propagation of Solitons and Polarons in a Continuum Model for Polyacetylene.

RONAN RODRIGUES BRAGA, GERALDO MAGELA E SILVA
UnB

The kinematics and dynamics of Solitons and Polarons in a one-dimensional system are studied through numerical integration of the wave functions and the order parameter with a continuum model. The continuum model for polyacetylene of Takayama, Lin-Liu, and Maki (TLM Model) is used. The time-dependent numerical integration of the wave function is carried out through the transformation of the Schrödinger picture wave function to a new representation by a convenient unitary transformation. The propagation is done using a second-order finite difference method. The mobility, velocity of propagation, and interaction between solitons, including soliton collisions is studied. The same study is done for polarons. Special attention is devoted to the behavior of the electric charge in these defects and the influence of collisions on charge transfer between them. Considerations of the energy involved in all these processes are made and the results compared to other theoretical works.

Dinâmica de Sólitos em Poliacetileno.

CLEBER DA SILVA PINHEIRO, GERALDO MAGELA E SILVA
UnB

A dinâmica de sólitos em poliacetileno é numericamente estudada usando uma extensão do modelo SSH para incluir a influência de um campo elétrico externo. O campo elétrico é usado para acelerar sólitos eletricamente carregados na molécula. 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 π . Neste trabalho estuda-se a interação de um par de defeitos estruturais numa mesma molécula, sendo um carregado e outro neutro. Após ser acelerado, o sólito carregado colide com o sólito neutro. São empregados campos elétricos com várias intensidades que transmitem diferentes velocidades ao sólito carregado. A transferência de energia e momento entre os sólitos é considerada. A probabilidade de transferência de carga entre os sólitos após as colisões é analisada.

ESTUDO ESPECTROSCÓPICO DOS FRAGMENTOS TRICIANO, TETRACIANO, CARBAZOL E TRICIANOVINILCARBAZOL NA REGIÃO DO UV E DO IR - UMA ABORDAGEM TEÓRICA

C. CUNHA, M. J. CALDAS
Instituto de Física da USP

Se refletirmos sobre a extensão de problemas químicos e/ou físicos acessíveis aos correntes métodos da teoria quântica para cálculos de estrutura eletrônica de moléculas, um é imediatamente descartado devido aos limites bastante restritos impostos pela viabilidade numérica e custo computacional. O problema fundamental, a partir de um ponto de vista computacional básico é que moléculas grandes requerem um grande número de funções base - se orbitais tipo Slater, ou funções Gaussianas, convenientemente contraídas forem usados - para provir, mesmo que uma descrição modesta, o ambiente eletrônico molecular. Isso leva à necessidade de lidar com matrizes muito grandes e um número também enorme de integrais, dentro da aproximação de Hartree-Fock, tornando-se rapidamente ambos, difícil numericamente e não econômico. Se processos termoquímicos ou energias de excitação eletrônica são requeridos, algum tratamento do problema de correlação se faz necessário. O objetivo fundamental dos métodos semiempíricos é o desenvolvimento de um tratamento quantitativo de propriedades moleculares com precisão, confiabilidade e custo computacional suficiente para ser de valor prático em química e/ou física, em particular em áreas onde há falta de dados experimentais ou onde os procedimentos experimentais não funcionam satisfatoriamente. Acredita-se que a grande chance de sucesso reside numa parametrização criteriosa do método mecânico-quântico desenvolvido por Roothaan e Hall também conhecido como "Hartree-Fock Self-Consistent Field Linear Combination of Atomic Orbital Molecular Orbital" (HF-SCF-LCAO-MO). Para mater os custos computacionais sob controle é necessário simplificar o tratamento de Hartree-Fock para sistemas moleculares. Uma cadeia recentemente sintetizada com

um grupamento lateral contendo unidades carbazol e tricrianovinilcarbazol tem sido apresentada como um excelente material para aplicações em ótica não linear^a. Estudamos as unidades isoladas deste material utilizando técnicas semiempíricas de estrutura eletrônica para a otimização da geometria e para a análise espectroscópica. Os resultados são comparados aos resultados experimentais para o polímero e pudemos identificar algumas características espectrais.

^aK. Tamura, A. B. Padias, H. K. Hall Jr. and N. Peyghambarian, *Appl. Phys. Lett.*, **60**, 1803 (1992)

UM ESTUDO DA FLUORESCÊNCIA ANÔMALA DE OLIGOTIOFENOS SUBSTITUÍDOS

LUZ ELENA BOLIVAR MARINEZ, DOUGLAS SOARES GALVÃO, MARIA CRISTINA DOS SANTOS
Universidade Estadual de Campinas - IFGW

Polímeros condutores são uma nova classe de materiais eletrônicos com propriedades não usuais. Entre os polímeros condutores o politiofeno (acoplamento 2-2') tem sido bastante estudado nos últimos anos em virtude de potenciais aplicações tecnológicas, como transistores e dispositivos óptico-eletrônicos. Entre as características especiais de oligotiofenos podemos citar o comportamento anômalo de fluorescência de oligotiofenos substituídos com grupos terminais doadores e aceitadores de elétrons em função do número de anéis. Existem evidências experimentais da presença de um mecanismo envolvendo transferência de carga intramolecular, que desaparece a partir de um tamanho crítico dos oligômeros. Neste trabalho nós propomos um modelo, baseado em cálculos semi-empíricos (PM3 e ZINDO/S-CI), para explicar o comportamento anômalo da fluorescência. Nossos resultados mostram que o comportamento da fluorescência pode ser explicado em termos de transições conformacionais envolvendo estados excitados.

Suporte Financeiro : CAPES

Inclusão da Correlação Eletrônica em Cadeias Infinitas de Transpoliacetileno (TPA)

GUSTAVO EDWARD DE MUELENAERE CORRÊA
Departamento de Física - UnB
MARÍLIA JUNQUEIRA CALDAS
Instituto de Física - USP

O gap entre a banda de valência e de condução de polímeros condutores é fortemente dependente das interações elétron-elétron. Para o transpoliacetileno

(TPA), o valor experimental do gap está em torno de 1.5 eV, e é bem conhecido que cálculos teóricos baseados nas aproximações de elétron independente ou de campo autoconsistente (SCF) levam a resultados que excedem em muito esse valor. Por exemplo, o cálculo SCF da densidade de estados (DOS) da cadeia infinita de TPA traz como resultado um gap em torno de 3.5 eV [1], tornando clara a necessidade da inclusão de efeitos de correlação eletrônica para esse sistema. Qualquer tentativa nesse sentido, utilizando por exemplo o método de interação de configuração (CI), esbarra numa dificuldade evidente: a existência de infinitos orbitais moleculares, que levam a matrizes de configuração de ordem também infinita. Uma possível solução está em implementar o cálculo de CI de maneira indireta, sobre a hamiltoniana efetiva (numérica) de um cluster finito que representa satisfatoriamente as propriedades físicas da cadeia infinita. Este cluster já foi calculado utilizando os valores numéricos (obtidos em [1]) para as energias de caroço e de ressonância das ligações simples e duplas, presentes na cadeia do TPA; está agora em andamento o cálculo do CI para o mesmo. Pretende-se nesse trabalho apresentar o modelo do cluster finito como alternativa para o tratamento de correlação eletrônica em cadeias infinitas, e a matemática envolvida na aplicação do método de CI sobre uma hamiltoniana efetiva numérica.

[1] H.S. Brandi, B. Koiller e M.J. Caldas, nota científica 26/89, Física-PUC/RJ (1989).

Teoria de Campos em Cadeias Poliméricas de Hubbard

ERNESTO CARNEIRO PESSOA RAPOSO, MAURÍCIO DOMINGUES COUTINHO-FILHO
UFPE

Recentemente mostrou-se [1] que cadeias orgânicas e inorgânicas com interação eletrônica à Hubbard (parâmetros t e U) exibem estado fundamental com ordem ferrimagnética, além de um rico diagrama de fases em função da dopagem. Neste trabalho construímos uma teoria de campos através da integração funcional de estados coerentes representativos dos graus de liberdade de spins, válida para o caso de um elétron por sítio (banda semi-cheia). A topologia da estrutura losangular da cadeia, responsável pela banda não-dispersiva e mais duas dispersivas na estrutura eletrônica, é fator determinante nas propriedades do modelo. Em particular, a linearização das equações resultantes da minimização da ação nos fornece o espectro de ondas de spin formado por três ramos: um modo óptico não-dispersivo de energia $(E)_0 (= H + J)$ e dois modos dispersivos (óptico e acústico) de energias $(E)_\pm(k) = (3J/2) \pm ((H(H-J) + (J)^2/4)(1 + 8\cos)^2((ka/2)))^{1/2}$. Dos resultados acima concluímos que existe um campo

magnético crítico, $(H)_c (= J = 4t^2/U)$, acima do qual a ordem ferrimagnética de longo alcance se torna instável. [1] A.M.S. Macêdo, M.C. dos Santos, M.D. Coutinho-Filho e C.A. Macêdo, "Magnetism and phase separation in polymeric Hubbard chains", *Phys. Rev. Lett.* (1995), a ser publicado.

ESTUDO DA ESTRUTURA ELETRÔNICA DA POLICARBONITRILA.

JORDAN DEL NERO, BERNARDO LAKS
Universidade Estadual de Campinas - IFGW

Os polímeros orgânicos estão a cada dia despertando mais a atenção devido ao fato de haver um ganho na condutividade elétrica que pode ser obtido por várias formas de defeitos em materias.

Este trabalho teve como objetivo o estudo teórico de alguns fenômenos que ocorrem em polímeros conjugados, neste caso a Policarbonitrila. Tratamos, inicialmente, a procura da melhor estrutura configuracional do polímero, ou seja, a procura da geometria mais estável da policarbonitrila. Após isto apresentamos a estrutura eletrônica sob efeito de protonação. Investigamos estes defeitos através do método de Hückel Simples com modificações e o sistema será protonado de forma aleatória e uniforme. A metodologia utilizada neste trabalho estão baseadas nas técnicas de HS modificado, EHT, Hückel com compressibilidade, AM1 e NFC.

Suporte Financeiro : CNPq

CINÉTICA DA REVERSÃO DA POLARIZAÇÃO EM POLÍMEROS FERROELÉTRICOS SOB CAMPOS ELÉTRICOS NÃO CONSTANTES.

RENÉ A. MORENO
Depto. de Física UNESP Rio Claro
GUILHERME F. L. FERREIRA
Instituto de Física USP São Carlos

Os processos de reversão de polarização (switching) para campos constantes são bem conhecidos. Na maioria dos casos as condições experimentais não ocorrem com campos elétricos constantes daí a importância de um tratamento analítico deste problema. Os processos de switching em polímeros ferroelétricos podem ser equacionados usando uma definição conveniente do tempo intrínseco característico do processo. Com o uso deste tempo é possível atualizar os efeitos sobre a polarização produzidos pelos campos elétricos variáveis em tempos passados, isto é os efeitos da polarização atrasada. O método é aplicado a resultados experimentais obtidos com PVDF na fase β e os ajustes obtidos são satisfatórios. Os parâmetros obtidos no ajuste são compatíveis com os publicados na literatura.

Workshop: Novos Polímeros (POL, CCP, SUF, OTI, BIO) - 09/06/95

ESTUDO DA ORIENTAÇÃO DIPOLAR DE CORANTES DISPERSOS EM FILMES DE POLIESTIRENO PARA APLICAÇÃO EM ÓTICA NÃO LINEAR.

JOSÉ L. C. FONSECA, JOSÉ A. GIACOMETTI
Instituto de Física de São Carlos—Universidade de São Paulo
MAURO M. COSTA
Universidade Federal de Mato Grosso

Polímeros constituem uma importante alternativa tecnológica para dispositivos de ótica não linear (ONL). Uma das possibilidades é a preparação de filmes por solução de um polímero amorfo na qual é adicionada um corante com propriedades óticas não lineares. Este sistema é geralmente denominado de "guest-host". Para obter-se efeitos óticos não lineares de segunda ordem faz-se necessária a orientação dipolar dos corantes e a obtenção de um sistema "guest-host" no qual a orientação é estável. Neste trabalho mostra-se as propriedades de orientação dipolar de corantes como o DANS, DR1 e DR13 dissolvidos no polímero poliestireno. Medidas da constante dielétrica e perdas, a diferentes temperaturas, permitem avaliar os processos de relaxação dipolar. Medidas de correntes termo estimuladas permitem estimar a polarização induzida na amostra e as características da estabilidade térmica da orientação dipolar. É também mostrada a correlação entre os dois tipos de medidas. Resultados de

medidas de calorimetria diferencial foram usadas para se determinar a temperatura de transição vítrea do sistema corante/poliestireno.

Estudo de RMN no Eletrólito Sólido Polimérico PPO:LiBF₄

DONOSO P, BONAGAMBA T, FRARE P. L, MAGON C, OLIVEIRA L. N, PANEUCCI H

Instituto de Física de São Carlos, USP

Eletrólitos poliméricos amorfos são formados entre o polímero Poly(óxido de propileno), PPO, e um sal alcalino (LiClO₄, LiAsF₆). Nestes complexos o sal fica parcialmente dissociado na matriz polimérica dando origem a condutividade iônica [1]. Neste trabalho realizamos os seguintes estudos: i) a largura da linha espectral do ⁷Li em função da temperatura, comprovando-se que o processo de motional narrowing ocorre na temperatura de transição vítrea do complexo. ii) Segundo Momento da ressonância do núcleo ⁷Li, depois de aplicar o método de desacoplamento nuclear para eliminar as contribuições heteronucleares da linha espectral. A contribuição Li - H (interação entre um lítio quase estacionário e um próton da cadeia polimérica) corresponde a 80 - 90% da largura de linha. iii) medidas da taxa de relaxação spin rede (T₁⁻¹) do ¹H, ⁷Li e ¹⁹F em função da temperatura e da frequência. Verificamos que nestes complexos há uma correlação entre o movimento do cátion e os movimentos segmentários das cadeias poliméricas. Nestes complexos de PPO, o T₁⁻¹ do ⁷Li apresenta um máximo numa temperatura mais alta do que nos complexos com base do PEO[2], indicando uma mobilidade iônica menor nos complexos de PPO. Examinamos também o problema da dependência da relaxação com a frequência, aplicando um procedimento gráfico desenvolvido anteriormente [3], para levantar a função de densidade espectral no limite de baixas frequências.

1 - Solid St. Chem. 17, 145, 1987; Solid St. Ionics 69, 309 1994

2 - J. Chem. Phys. 98, 10026, 1993

3 - J. Phys. C 19, 963, 1986.

TERMOPLASTICIDADE E REATIVIDADE DE SILICONAS

CARLOS ALBERTO PAULA LEITE, SANDRA G. C. DE CASTRO

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

FERNANDO GALEMBECK

Instituto de Química, UNICAMP, Campinas, SP, Brasil

Poli(dimetilsiloxano) reticulado, obtido a partir de uma goma RTV misturada a tolueno, quando submetido a temperaturas entre 250 e 280°C, durante tempos que variam de meia a duas horas, apresenta certas reações que conferem à borracha um caráter parcialmente termoplástico. Nessa faixa de temperaturas associada a tempos de aquecimento ocorre a formação de grupos reativos, principalmente silanóis, que podem se difundir na malha polimérica e se recombinar, permitindo a autoadesão entre filmes de PDMS. O aquecimento a 200°C por duas horas não provoca autoadesão, enquanto que o aquecimento a 280°C por duas horas conduz a perdas nas propriedades mecânicas elásticas, tornando o filme quebradiço. Por outro lado, o tratamento térmico a 280°C por 15 minutos pode conduzir aos mesmos efeitos observados em filmes aquecidos a 250°C por 2 horas. Os resultados obtidos, através das técnicas de ressonância magnética nuclear, espectroscopia de fotoelétrons e ensaios de intumescimento permitem explicar os fenômenos de termoplaticidade e autoadesão através da dinâmica de cadeias que se soltam parcialmente da malha polimérica e migram através da rede, recombinando na interface ou no interior do polímero.

IS IT POSSIBLE TO AVOID ERROR SOURCES WHICH CAN MASK ORDER-DISORDER TRANSITIONS IN POLYMER ELECTROLYTES?

CLAUSYMARA LARA SANGIORGE

Departamento de Química, CEFET-BH

PAULO ROBERTO SILVA, OLÍCIA DE OLIVEIRA DAMASCENO, ARMANDO LOPES DE OLIVEIRA

Departamento de Física, ICEX, UFMG

ANATÁLIA LARA SILVA

Departamento de Engenharia Química, EE-UFMG

We have previously proposed a peculiar α -order, β -disorder, γ -order transition model for Lithium Perchlorate dissolved in Poly (Ethylene Glycol-400) Distereate systems ($LiClO_4/PEGD$). We have shown experimental evidences for supporting our model from Impedance Spectroscopy measurements, which we have performed at different concentrations and temperatures. Our model has the advantage of encompassing both critical and not critical features displayed by the specific conductivity dependence of $LiClO_4/PEGD$ systems repectively on concentration and temperature [1]. It had a previous preliminary version [2]. In the present work we present some tricks for avoiding the main error sources which in some cases can mask it.

[1] Oral presentation, Fourth Polymer Electrolytes Conference, Newport, Rhode Island, USA, 19-24 July 1994, Extended Abstracts p. 78. To be published.

[2] A.L. de Oliveira, O. de O. Damasceno, P.R. Silva, C.L. Sangiorge, M. Armand and M. Kleitz, Solid State Ionics 60, 99 (1993).

Crescimento e Caracterização de Compostos Poliméricos (POL) - 09/06/95

MEDIDAS DE CONDUTIVIDADE EM FILMES POLIMÉRICOS ULTRAFINOS

GUSTAVO D. TELLES, ANTONIO RIUL JR, SARITA V.

MELLO, OSVALDO N. OLIVEIRA JR

IFSC - USP

LUIZ H. C. MATTOSO

EMBRAPA/CNPDIA (São Carlos - SP)

Muitas têm sido as aplicações sugeridas para os filmes poliméricos ultrafinos, como os produzidos pelas técnicas de Langmuir-Blodgett (LB) e auto-montagem (*self-assembly*). Este interesse surge principalmente pela possibilidade de controle da espessura e do alto grau de ordenamento estrutural destes filmes. Para os polímeros condutores, em particular, o objetivo é explorar a alta condutividade que filmes dopados podem atingir. A medida da condutividade nos filmes ultrafinos é, entretanto, bastante delicada, sendo geralmente realizada pelos métodos de Montgomery ou de Van der Pauw. Em ambos é necessário empregar contatos em quatro pontos distintos da amostra, e por isso ficaram conhecidos como **método de quatro pontas**. Nesse trabalho utilizou-se o método de Van der Pauw para filmes LB de polianilina (PANi) e de poli(o-etoxianilina) (POEA), um derivado da PANi. Para evitar interferência de campos elétricos externos, o sistema de medidas foi blindado eletrostaticamente. Os filmes LB já são produzidos no estado dopado, uma vez que utilizam-se subfases aquosas ácidas para a confecção da

monocamada de Langmuir. Os valores de condutividade para os filmes LB de POEA e PANi são da ordem de 10^{-3} S/cm, com exceção de um filme de POEA que ficou exposto ao ar durante 3 meses e que apresentou condutividade da ordem de 10^{-4} S/cm. Quando esta amostra foi submetida a um processo de dopagem de 30 minutos em vapor de HCl, sua condutividade aumentou duas ordens de grandeza (10^{-2} S/cm), ou seja, o polímero ficou mais dopado do que no caso de filme recém produzido. *

Análise da deposição de energia e dimensão das trilhas causadas pela irradiação de íons de MeV em PPS

L. S. FARENZENA, R. P. LIVI

Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

M. A. DE ARAÚJO

Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

R. M. PAPALÉO, A. HALLÉN, B. U. R. SUNDQVIST

Divisão de Física de Íons, Departamento de Ciências da Radiação, Universidade de Uppsala, Suécia.

Folhas finas de Poli(sulfeto de p-fenileno) (PPS), com 2 μ m de espessura, foram irradiadas com os íons $^4He^+$, $^{12}C^{2+}$, $^{16}O^{3+}$, $^{32}S^{3+}$, $^{79}Br^{9+}$ e $^{127}I^{14+}$, no acelerador EN-TANDEN em Uppsala (Suécia). Através da Espectroscopia de absorção no infravermelho por transformada de Fourier (FTIR) do PPS irradiado em diversas doses foram obtidas as seções de choque para a quebra de ligações correspondentes às diversas bandas de

absorção para todos os íons incidentes. Com a espectroscopia de absorção no ultravioleta-visível (UV-VIS) podemos acompanhar a eficiência na criação de grupos cromóforos em função da dose iônica para as diversas irradiações. Da análise das seções de choque obtidas com o FTIR (σ_{IR}) foi verificada uma dependência aproximadamente quadrática com o poder de freamento (dE/dx) do íon no PPS (independente da natureza da ligação química). Da análise na região do UV-VIS obtivemos uma dependência da eficiência na criação de cromóforos proporcional à $(dE/dx)^{2.2}$ em $\lambda=375$ nm e à $(dE/dx)^{2.5}$ em $\lambda=450$ nm. Estas dependências são bem respeitadas em todo o intervalo de poder de freamento estudado (17-740 eV/Å). Através das σ_{IR} , supondo uma região de dano cilíndrica em torno da trajetória do íon, foram estimados os

raios de dano para cada ligação dentro dos quais uma dada ligação é quebrada devido à energia depositada pelo íon incidente. Utilizamos também um modelo teórico para o cálculo da densidade de energia depositada no "ultrack" por elétrons secundários (raios δ) e calculamos o raio de dano previsto por esse modelo para cada tipo de ligação. Os valores dos raios calculados teoricamente tem uma boa correlação com os medidos experimentalmente.

Espectroscopia Raman aplicada ao estudo de materiais eletrólitos poliméricos.

RAIGNA AUGUSTA DA SILVA, GLAURA GOULART SILVA, MARCOS ASSUNÇÃO PIMENTA
Instituto de Ciências Exatas-UFMG

Eletrólitos poliméricos são sistemas cuja característica principal é o fenômeno de deslocamento de cátions e ânions no interior de uma matriz macromolecular sob ação de um campo elétrico produzindo uma condutividade iônica resultante. Estes "novos" materiais apresentam grande interesse acadêmico e tecnológico, sendo utilizados na fabricação de dispositivos para a indústria eletro-eletrônica e na estocagem energética.

A Espectroscopia Raman tem sido aplicada no estudo destes sistemas complexos (polímero/sal em concentrações elevadas 1 – 50 m/n%) para a obtenção de informações sobre a dissolução e as interações entre os íons no interior da matriz.

Neste trabalho será apresentado uma análise dos espectros Raman de sistemas poliéteres e poliacetais após adição dos sais $LiClO_4$ e $NaClO_4$ (numa série ampla de concentrações). Os poliéteres escolhidos foram:

- polietilenoglicol ($M_w = 200, 400$ e 6000)
- polipropilenoglicol ($M_w = 425$)
- polióxido de etileno/propileno carbonato,

usado como plastificante ($M_w = 600000$)

Já o poliacetal escolhido foi o *polidioxolano* ($M_w = 3000$).

Foram monitorados principalmente o modo totalmente simétrico do ânion ClO_4^- , ν_1 (935 cm^{-1}) e a banda metal-oxigênio à $860\text{-}870\text{ cm}^{-1}$, ativa no Raman.

Foi possível, por exemplo, evidenciar nestes sistemas o aumento da intensidade de ν_1 com a concentração até limites onde adições posteriores de sal produziam associações entre ânions alargando a banda e diminuindo sua intensidade.

ESTUDO DO POLY-PARAPHENYLENE (PPP) ATRAVÉS DE ESPECTROSCOPIA DE ALTA RESOLUÇÃO EM SÓLIDOS POR RMN.

PAULO HENRIQUE DE SOUZA, TITO JOSÉ BONAGAMBA, HORÁCIO PANEPUCCHI, CLAUDIO JOSÉ MAGON, EDSON LUIZ GÉA VIDOTO, MARCUS VINICIUS GIOTTO
IFSC-USP

JOSÉ FERNANDO NASCIMENTO, BRAZ BELLO JR
IQSC-USP

O PPP é um dos polímeros condutores eletrônicos que mais tem atraído atenção nos últimos anos devido às suas propriedades físicas e possíveis aplicações tecnológicas. Por esta razão, vários estudos foram realizados, os quais levaram à construção de um modelo para explicar suas propriedades elétricas, magnéticas e ópticas. No entanto, ainda existem algumas questões em aberto relacionadas com o mecanismo de condução. Nosso estudo consiste no processo de síntese, dopagem e caracterização das amostras utilizando os seguintes métodos: Ressonância magnética nuclear (RMN), Ressonância paramagnética eletrônica (RPE), Infravermelho (IV) e Condutividade elétrica. As principais medidas deste estudo são os espectros de alta resolução e medidas de relaxação longitudinal do ^{13}C por RMN, em função do grau de dopagem do polímero, fator que define o tipo de defeito produzido na cadeia polimérica e a condutividade elétrica resultante. As medidas de RPE têm como finalidade quantificar o número absoluto de spins associados aos defeitos e ao agente dopante, no caso Fe^{3+} . A espectroscopia IV está sendo utilizada para verificar a presença dos defeitos na cadeia polimérica, onde os anéis benzeno se transformam em anéis quinóides. Todos estes resultados estão sendo analisados em conjunto com as medidas de condutividade elétrica. Desta forma relacionam-se os resultados de RMN com os mecanismos de condução do PPP. Agradecimentos: FAPESP, FINEP, CNPq e CAPES.

Medidas de Susceptibilidade a.c. em pastilhas prensadas de poli(3-metiltofeno) dopadas com ClO_4^-

F. M. A. MOREIRA, A. J. A. DE OLIVEIRA, W. A. ORTIZ

Departamento de Física, Universidade Federal de S. Carlos, S.P.

E. C. PEREIRA, L. O. S. BULHÕES

Laboratório Interdisciplinar de Eletroquímica e Cerâmicas Depto de Química, Universidade Federal de S. Carlos, S.P.

A. PAWLICKA

Instituto de Física de S. Carlos, USP, S. Carlos, S.P.

L. WALMSLEY

Departamento de Física, Instituto de Geociências e C. Exatas, UNESP, Rio Claro, S.P.

Medidas de susceptibilidade a.c. em pastilhas prensadas de poli (3-metiltofeno) (P3MT) dopadas com ClO_4^- mostram evidência de transições de estado metálico (susceptibilidade de Pauli) para estados de onda de densidade de carga (CDW). Essas transições mostram dependência da história térmica, com variações significativas na curva de susceptibilidade para amostras resfriadas lentamente, congeladas à temperatura de transição de um estado CDW e depois esquentadas ou congeladas a outra temperatura e depois esquentadas. Também mostram variação para duas amostras diferentes preparadas sob as mesmas condições mostrando a sensibilidade da técnica às inhomogeneidades da amostra e ao seu envelhecimento (dedopagem). Podemos entretanto caracterizar essas transições como ocorrendo a 280 K, 240 K, 150 K e 90 K. A transição de 240 K já foi observada anteriormente por Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE) e a transição a 90 K também foi observada anteriormente por medidas de condutividade d.c..

CARACTERIZAÇÃO DO POLI(ÓXIDO)PROPILENO COMPLEXADO COM SAIS DE LÍTIO UTILIZANDO A TÉCNICA DE ESPECTROSCOPIA DE ALTA RESOLUÇÃO EM SÓLIDOS POR RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

NILSON CAMARGO MELLO, TITO JOSÉ BONAGAMBA, LUIS HENRIQUE MATTOSO, JOSÉ PEDRO DONOSO, HORÁCIO PANEPUCCI, EDSON LUIS GÉA VIDOTO
Instituto de Física de São Carlos Universidade de São Paulo

Neste trabalho estudamos o processo de relaxação spin rede e a forma de linha do ^7Li no poli(óxido)propileno (PPO) complexado com sais de lítio através da técnica de Espectroscopia de Alta Resolução em Sólidos por RMN, em função do grau de complexão e da temperatura. As amostras foram preparadas com a solvatação de diferentes sais de metais alcalinos (LiBF_4 e LiClO_4) no PPO, com diferentes concentrações de

Li ($n=\text{O}/\text{Li}=4$ e 8). A partir das curvas de taxa de relaxação longitudinal em função temperatura, determinamos parâmetros associados com o mecanismo de condução iônica tais como energia de ativação do processo e frequência de salto do íon. Já no estudo de forma de linha em função da temperatura, analisamos o espectro do ^7Li com e sem o desacoplamento da interação dipolar magnética dos núcleos de ^1H e ^{19}F . Desta forma determinamos qual é a contribuição na largura de linha do ^7Li , em regime de rede rígida, das interações dipolares Li-Li, Li-H e nos casos onde ela ocorre, Li-F. Além disso, determinamos também a temperatura de transição vítrea do material. Agradecimentos: FAPESP, FINEP, CNPq e CAPES.

Condutividade elétrica em poli(p-fenileno sulfeto) (PPS) e suas blendas dopadas com tetracianoquinodimetano (TCNQ) - dependência com o tipo de dopagem e com a preparação da amostra.

MARTA BUENO DE MORAES

IFSC-USP-São Carlos - SP

ROSÁRIO BRETAS

DEMa-UFSCar - São Carlos - SP

Filmes de poli(p-fenileno sulfeto) puro e suas blendas com um cristal líquido polimérico (LCP) foram preparados por "casting" a partir de solução, fusão e prensagem a quente. Estes filmes foram dopados por três métodos: fusão, solução e evaporação do TCNQ. Foi feita com estas amostras uma análise térmica diferencial de varredura (DSC) para esclarecer a estrutura cristalina e a miscibilidade dos componentes no polímero dopado e na blenda dopada e não dopada. Com estes termogramas pode-se definir a homogeneidade resultante de cada tipo de preparação de amostra. O método usado para medir a condutividade elétrica foi o método de 2 pontos. Aplica-se uma voltagem de polarização na amostra mantida a uma temperatura constante enquanto é registrada a corrente de polarização até que se obtenha a corrente de condução. Este método é mais indicado para amostras que não possuem condutividade "metálica". Os campos elétricos aplicados variaram de valores baixos ($E = 10 \neq 3\text{V/cm}$) até valores altos ($E = 10 \neq 5\text{V/cm}$). Filmes de PPS dopados com TCNQ podem ter seus valores de condutividade aumentados e mais estáveis, tanto com relação ao tempo como à temperatura, inclusive sob campos elétricos altos quando os processos de preparação da amostra levam a uma maior homogeneidade dos componentes da mesma. Os valores de condutividade variaram entre $10 \neq -13\text{S/cm}$ a $10 \neq -8\text{S/cm}$. Na dopagem por solução a escolha do solvente é relevante para a homogeneidade da dopagem e para o valor de condutividade obtida.

DETERMINAÇÃO DA DENSIDADE DE ESTADOS NO PPS UTILIZANDO CORRENTE LIMITADA POR CARGA ESPACIAL (SCLC)

EDINILTON MORAIS CAVALCANTE, GIOVANI CESAR DE FARIA

UNESP - Ilha Solteira - SP

Para determinar o possível mecanismo de transporte no Poli (sulfeto p- fenileno) - PPS foi plotada a densidade de corrente em função da raiz quadrada da voltagem. Para campos elétricos não muito intensos, uma dependência linear foi observada. Entretanto, à medida que a voltagem aumenta essa linearidade não é mantida. A dependência da densidade de corrente com a raiz quadrada da voltagem é característica de modelos de condução de Poole-Frenkel ou emissão de portadores de um eletrodo metálico corrigido pelo efeito imagem, ou seja, emissão de Schottky. Está se propondo um modelo para a região de altas voltagens onde a linearidade não foi observada. Uma das possibilidades é que para essa região a corrente está limitada por carga espacial (SCLC). Entretanto, para que tal fato ocorra, algumas condições devem ser satisfeitas. Uma das características da corrente limitada por carga espacial é de que a densidade seja proporcional a V^n , com $n \geq 2$. Condição esta que foi satisfeita. Uma outra característica importante é que SCLC é devida a um efeito de volume e que, portanto, não deveria depender do contato. Tal fato foi observado através de medidas da densidade de corrente em função da voltagem, isto é, à medida que a voltagem cresce, o valor da densidade de corrente tende para um valor comum, independente do eletrodo. Uma outra característica fundamental a ser seguida é a chamada lei de escala, onde a corrente deve depender da espessura da amostra segundo uma expressão da forma: $\frac{I}{\ell} = f\left(\frac{V}{\ell^2}\right)$ onde ℓ é a espessura. Com a análise dos resultados, encontrou-se uma dependência muito boa com a espessura das

amostras, levando portanto a conclusão de que para voltagens maiores que $V=250V$, a corrente é limitada por carga espacial. Como um último teste de validade foram calculados, usando a teoria de SCLC, a densidade de estados presentes na amostra de PPS e comparados com a obtida utilizando-se um modelo de hopping. Entretanto, os valores encontrados para a densidade de estados difere daquele encontrado pelo modelo de hopping por uma ordem de grandeza.

MEDIDA FOTOACÚSTICA DA DIFUSIVIDADE TÉRMICA DO POLIPIRROL CONDUTOR

ANTÔNIO CARLOS RODRIGUES DA COSTA

Universidade Federal do Piauí

ANTÔNIO FERNANDES SIQUEIRA

Universidade Federal do Ceará

O polipirrol quando dopado apresenta características de um condutor. O estudo das propriedades de transporte neste material representa portanto um tópico de especial interesse. Destaca-se dentre estas propriedades, a difusividade térmica, podendo seu valor ser obtido de forma simples através do uso de técnica fotoacústica. O material usado na medida se constitui de filmes finos de polipirrol crescidos eletroquimicamente sobre substrato de aço inox, a partir de solução de pirrol em ácido p-tolueno sulfônico 0.08M. Cuidados especiais foram tomados na deposição afim de garantir uma maior homogeneidade quanto a espessura dos filmes obtidos, e a medida da difusividade térmica foi realizada em uma configuração de célula aberta. Os filmes analisados têm espessuras no intervalo entre 100μ a 125μ , e os valores da difusividade térmica mostraram-se dependentes das condições de síntese do material.

RESSONÂNCIA MAGNÉTICA

Relaxação em Ressonância Magnética (RES) - 07/06/95

Relaxação Magnética em Fluoritas Vítreas

DONOSO P, FRARE P. L, MAGON C, FERRAZ A. M

Instituto de Física de São Carlos, USP

DELBEN A. A. S. T

Departamento de Física, CCET, UFMS

M. AEGERTER, Y. MESSADDEQ

Instituto de Química, Unesp Araraquara

Os sistemas vítreos baseados em ZnF_4 e em In_2O_3 , constituem eficientes condutores iônicos rápidos [1]. Neste trabalho estudamos a dinâmica do íon móvel (F^-) através das medidas da relaxação magnética do núcleo ^{19}F em função da temperatura e da frequência, tanto na fase amorfa do material como também na fase desordenada, acima da temperatura de transição vítrea (T_g). Dois mecanismos de relaxação foram identificados nestes materiais [2]. O primeiro, dominante a baixas temperaturas ($T < 200$ K), causado pelas transições de baixas frequências entre estados de configurações atômicas, as quais são descritas pelo modelo fenomenológico do potencial duplo assimétrico (ADWP) [2]. O segundo mecanismo, dominante em temperaturas elevadas ($T > T_g$) é causado pela difusão iônica. Neste trabalho estudamos basicamente este último mecanismo em duas fluoritas vítreas de fórmulas: (A) $50ZrF_4 - 20BaF_2 - 21LiF - 5LaF_3 - 4AlF_3$ (ZBLALi na literatura [2], $T_g = 525$ K) e (B) $40In_2O_3 - 20ZnF_2 - 20SrF_2 - 2Ga_2O_3 - 2NaF - 16BaF_2$ ($T_g = 550$ K). As medidas do tempo de relaxação spin rede do ^{19}F foram realizadas num espectrômetro de RMN pulsado operando em 24 e 37MHz. Como a difusão iônica se produz num meio dinamicamente desordenado, o comportamento da relaxação spin rede não pode ser descrito pelos modelos clássicos utilizados nos condutores superiônicos cristalinos [3], especialmente no que diz respeito a dependência com a temperatura e frequência. 1 - Mat. Chem & Phys. 23, 189 (1989), J. Non Cryst. Solids 172/174, 1315 (1994) 2 - J. Non Cryst. Sol. 172/174, 1373 e 1424 (1994) 3 - Phys. Reports 51 (4) 189 (1979)

Modelo Microscópico de Relaxação Dispersiva

M. ENGELSBURG, RICARDO E. DE SOUZA

Departamento de Física - UFPE

A relaxação devida ao movimento em sistemas desordenados geralmente apresenta comportamento dispersivo devido a uma distribuição espacial de probabilidades de frequências de pulso. A relaxação frequentemente exhibe nestes casos uma dependência temporal uni-

versal da forma $e^{-(t/\tau)^\beta}$ com $0 \leq \beta \leq 1$. Esta forma "exponencial esticada" ou lei de Kohlrausch, pode ser sempre justificada por uma distribuição de probabilidades heurística, mas isto não explica nem a generalidade da lei de Kohlrausch, nem sua possível origem microscópica. Examinamos a relaxação spin-rede no sistema girante de cristais do condutor superiônico beta- PbF_2 dopado com o íon monovalente K^+ . Um modelo para o movimento de vacâncias de flúor parcialmente ligadas aos íons de K^+ , aleatoriamente distribuídos na rede, por um potencial de Debye-Huckel, explica as dependências com a temperatura, a frequência e o nível de dopagem. O modelo também explica o valor observado de β e outros expoentes.

CONTRIBUIÇÃO DA INTERAÇÃO HIPERFINA PARA O TEMPO DE RELAXAÇÃO SPIN-REDE NOS VIDROS METÁLICOS

$Ni_{36}Zr_{32}Hf_{32}H_{1.36}$,

$Ni_{36}Zr_{32}Hf_{32}H_{1.20}$ e $Ni_{36}Zr_{64}H_{0.50}$.

MARCO ANTÔNIO SPERB LEITE, WALDEMAR

WOLNEY FILHO, NILSON MENDES BORGES,

MAURÍCIO BRAGA DE ARAUJO

UFG

JOHN M. TITMAN, RAY L. HAVILL

Univ. de Sheffield- UK

Medidas de tempo de relaxação spin-rede T_1 em função da temperatura para prótons foram obtidas nos intervalos (200–480K), (200–480K) e (220–460K), respectivamente para as tres amostras acima citadas. As medidas mostram que os mecanismos de relaxação predominantes são a interação dipolo-dipolo através do processo de difusão de spins e a interação hiperfina devido aos elétrons de condução. Foi observado que em temperaturas mais baixas a interação hiperfina é o mecanismo dominante. Os resultados obtidos são discutidos a luz da teoria de Korringa e teoria de Torrey. As energias de ativação para a difusão do hidrogênio nestes sistemas foram calculadas.

FENÔMENOS DE RELAXAÇÃO SPIN-REDE EM HEXACIANETO DE RÓDIO.

JOSE AGUIAR COELHO NETO, NEY VERNON

VUGMAN

Instituto de Física - UFRJ

O tempo de relaxação spin-rede do hexacianeto de ródio divalente em rede hospedeira de KCl foi medido em função da temperatura pela técnica de recuperação de inversão, na faixa de temperaturas de 4.7 até 25 K. Encontrou-se um processo de relaxação ressonante a dois fônons (tipo Orbach) com estado excitado

$d_{x^2-y^2}$ situado a $(36 \pm 3) \text{ cm}^{-1}$ em relação ao estado fundamental d_{z^2} , demonstrando a simetria quase octaédrica do complexo e permitindo desta forma o acesso a uma informação única sobre o espaçamento dos níveis eletrônicos desta molécula. O tempo de relaxação medido é anisotrópico, sugerindo a presença de mecanismo de relaxação via interação hiperfina com o núcleo de ródio, ativado por vibrações anarmônicas localizadas.

Ressonâncias I (RES) - 08/06/95

ESR of Gd^{3+} and Er^{3+} in $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$

GEORGE BALSTER MARTINS, DEAN RAO, JOSÉ VALDIVIA LEÓN, MARIA AMELIA PIRES, GASTON EDUARDO BARBERIS, CARLOS RETTORI
Universidade Estadual de Campinas
 PABLO ANTONIO VENEGAS URENDA
Universidade Estadual Paulista, UNESP
 SAUL OSEROFF
San Diego State University - San Diego. U.S.A.
 ZACHARI FISK
Los Alamos National Laboratory - Los Alamos. U.S.A.

Electron Spin Resonance (ESR) of Gd^{3+} and Er^{3+} in single crystals of $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ ($0 \leq x \leq 0.15$) at liquid helium temperature shows crystal field (CF) effects corresponding to a C_{4v} point symmetry. Upon doping with Ce^{4+} , a reduction of about 23% in the second order CF parameter $|b_{20}|$, is found with no significant change for the other CF spin Hamiltonian parameters. The resonance lines broaden and present a Dysonian lineshape at higher Ce^{4+} concentration, which is consistent with an increase in the CF inhomogeneity and the metallic character of the compound. Magnetic susceptibility measurements present a small increase in the low temperature anisotropy upon doping, consistent with a smaller $\langle |B_0^2| \rangle$ crystal field parameter for Pr^{3+} in $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$. The reduction in the CF parameters is tentatively attributed to charge transfer from Ce atoms to the CuO_2 planes. The exchange parameters $j_{\text{Gd-Pr}}$ and $j_{\text{Pr-Pr}}$ are estimated from the ESR and susceptibility measurements.

Identificação de Espécies Paramagnéticas em Dolomitas e Utilização como Indicadoras de Eventos Geológicos

ROBERTO WEIDER DE ASSIS FRANCO, FERNANDO PELEGRINI
UFG
 ALEXANDRE MALTA ROSSI
CBPF

Neste trabalho são estudadas espécies paramagnéticas produzidas por radiação ionizante em dolomitas ($\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$) e avaliada a possibilidade de usá-las como indicadoras de eventos geológicos, conforme sugerido por Lloyd e Lumsden†. Amostras de dolomitas sedimentares apresentaram espectro composto de linhas associadas ao íon Mn^{2+} e espécies produzidas por radiação. Medidas em bandas X e Q, tratamentos térmicos e de radiação permitiram a identificação de seis espécies na região em $g=2$. As espécies A e B são radicais CO_2^- de simetria ortorrômbica ($g_1=2,0032$, $g_2=2,0014$, $g_3=1,9970$) e isotrópica ($g=2,0007$), respectivamente. A espécie C possui simetria axial ($g_{\perp}=2,0027$, $g_{\parallel}=2,0012$) e provavelmente está associada ao radical CO_3^{-3} . A espécie isotrópica D ($g=2,0026$) apresenta comportamento com a temperatura idêntico a uma espécie de origem orgânica. A espécie E possui propriedades similares a radicais sulfato, identificados em carbonatos sintéticos e naturais. A espécie axial F ($g_{\perp}=2,0043$, $g_{\parallel}=2,0023$) possui espectro hiperfino devido a interação elétron-núcleo ($I=1/2$). Esta espécie é atribuída a radicais fosfato. Os espectros das amostras estudadas apresentam grande superposição de linhas, dificultando a identificação e aplicação das espécies na datação. Comparando com os outros sinais, as linhas correspondentes ao radical CO_3^{-3} são as mais sensíveis à dose de radiação. Entretanto, aquecimentos isotérmicos mostram que esta espécie apresenta pequena meia-vida. As espécies B e D apresentam pequena sensibilidade com a dose de radiação e estabilidade a temperaturas de 400 e 200 C, respectivamente. A utilização destas espécies como marcadoras de eventos geológicos recentes é discutida. †Lloyd, R. V. e Lumsden, D. N., 1987. *Chem. Geol.*,64:103-108.

MAPEAMENTO POR IMAGENS DAS INOMOGENEIDADES DO CAMPO MAGNÉTICO ESTÁTICO (B_0) EM UM TOMÓGRAFO POR RMN.

ROBERTO E. DA FONSECA, HORÁCIO C. PANEPUCCI, ALBERTO TANNUS
Instituto de Física da USP - São Carlos - USPFSC

O mapeamento de campo por imagens em tomógrafos por RMN é uma técnica que vem sendo empregada cada vez com maior frequência devido principalmente, entre outros fatores, ao fato de que a instrumentação necessária já se encontra pronta, constituindo-se esta no próprio tomógrafo. Dentre as várias técnicas por imagens utilizadas implementamos em nosso equipamento a que utiliza a diferença de fase dos sinais [1,2,3]. Nesta técnica fazemos duas aquisições sendo que, na segunda aquisição, aumentamos o tempo ao eco TE para $\text{TE} + \Delta t$. A imagem assim gerada contém franjas que indicam as inomogeneidades de campo e estão relacionadas a estas através da expressão :

$$\Delta\phi = \gamma\Delta B\Delta t$$

$\Delta\phi$ diferença de fase entre as imagens γ fator giro-magnético do próton ΔB campo magnético que queremos medir Δt incremento de tempo

[1] Rolf Gruetter, Chris Boesh - J.M.R. 96, 324 (1992)

[2] Erika Schneider, Gary Glover - Mag. Res. in Medicine 18, 335 (1991)

[3] Manfred G. Prammer, John C. Haselgrove, Meir Shinnar, John S. Leigh J.M.R. 77, 40 (1988)

Maximização do contraste em imagens obtidas pela seqüência CE-FAST em pacientes com esclerose múltipla.

BERND UWE FOERSTER, ALBERTO TANNÚS,
HORÁCIO PANEPUCCI

Instituto de Física de São Carlos - USP

O presente trabalho trata da otimização do contraste em imagens de tomografia por RMN. Em tomografia existem técnicas de aquisição rápida baseadas no princípio de "steady-state", ou estado estacionário [1]. Apesar de tais técnicas terem uma grande utilidade, o comportamento do contraste nas imagens obtidas é uma função complexa dos parâmetros teciduais, como os tempos de relaxação e a densidade de prótons, e dos parâmetros experimentais, como o ângulo de excitação, o tempo de repetição e o tempo ao eco. Analisamos matematicamente essa dependência para a seqüência CE-FAST [2] no exemplo da patologia da esclerose múltipla e otimizamos os parâmetros experimentais a fim de obter máxima relação contraste-ruído. Realizamos experimentos com um paciente de esclerose múltipla crônica inativa para otimizar o contraste entre as lesões e a matéria branca. Os resultados experimentais obtidos foram compatíveis com os teóricos. Comparando os resultados após a otimização com os anteriores concluímos que, para a utilização da seqüência CE-FAST em pacientes com esclerose múltipla, uma otimização do contraste é indispensável para observar a patologia. Com a finalidade de facilitar a otimização em outros sistemas que trabalham em campos diferentes apresentamos ainda os parâmetros experimentais otimizados baseados nos tempos de relaxação dados na literatura. [1] R.R.Ernst, W.A.Anderson, Rev.Sci.Instr. 37,93(1966). [2] J.A.Tkach, E.M.Haacke, Magn.Reson.Imaging 6,378(1988).

RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA DE GRÃOS IRRADIADOS COM ^{60}Co

MARTA M. CATTANI, NÉLIDA L. DEL MASTRO
Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares-IPEN
ALEXANDRE M. ROSSI

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas-CBPF

A Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE) vem sendo apontada como uma das técnicas mais promissoras para a identificação e dosimetria de alimentos tratados com radiações ionizantes. Neste trabalho, estuda-se o espectro de RPE de radicais paramagnéticos criados pela radiação gama de um fonte de (^{60}Co) em cereais e leguminosas. Amostras de farinha de milho, cevada, soja, mandioca, centeio e trigo foram irradiadas com doses entre 0.5 e 70 kGy. Todos os grãos apresentam o mesmo espectro de RPE. Medidas em frequências de 9,5 e 34,5 GHz indicam que o espectro é constituído, provavelmente, pela superposição de linhas de 4 espécies paramagnéticas, com fatores-g próximos ao do elétron livre. Uma das espécies apresenta interação hiperfina do elétron não emparelhado com um próton (18G) e outras duas com 2 prótons (22G) e (16G), respectivamente. A produção destes centros com a dose de radiação varia significativamente com o tipo de grão e a saturação dos sinais ocorre em doses de 40kGy. O decaimento dos sinais, à temperatura ambiente, foi simulado com duas funções cinéticas de primeira ordem. Verifica-se que a meia-vida dos centros é sempre inferior a 200 horas, para qualquer tipo de grão. Avalia-se o potencial da RPE para identificar grãos submetidos a processos de radiação ionizante.

(Apoio Financeiro: CNPq)

Efeito da Intercalação do $\text{AlCl}_3 : \text{Mn}^{2+}$ em Grafite

MARIA AMELIA PIRES, EDNI NUNES DE OLIVEIRA,
WANDER MILTON MELO ALMEIDA
UFG

CARLOS RETTORI, GASTON EDUARDO BARBERIS
UNICAMP

Os Compostos de Grafite Intercalado (GICs), nos últimos anos tem despertado interesse entre vários pesquisadores, em virtude das potenciais aplicações tecnológicas destes materiais. Neste trabalho estudaremos o composto $\text{AlCl}_3 : \text{Mn}^{2+}$ -GIC, utilizando a técnica Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE). O íon Mn^{2+} foi diluído em AlCl_3 e inserido entre as camadas de Grafite Pirolíticamente Altamente Orientado (HOPG), utilizando-se a técnica de intercalação por duas zonas de vapor. Pequenos Cristais de $\text{AlCl}_3 : \text{Mn}^{2+}$ foram também crescidos e observados via RPE. Através do espectro característico do Mn^{2+} , podemos observar que a simetria básica no sítio do íon é preservada sob intercalação, mas o campo cristalino é fortemente reduzido ao se passar do cristal para o grafite intercalado. A partir deste resultado foi possível constatar que o AlCl_3 intercala com a mesma estrutura de camadas que o cristal, tendo como principal fator para a redução do campo cristalino, a natureza "laminar" da camada intercalada nos GICs. Mostraremos também alguns resultados obtidos do composto $\text{AlCl}_3 : \text{Fe}$ -GIC, em função

da concentração de Fe.

Ressonância de Quadrupolo Nuclear em Alguns Compostos Cloratos e Benzênicos

HIRAM BEZERRA PASCOAL, SAID RABBANI, HERNAN CERVANTES

Instituto de Física/USP

CHRISTOVAM MENDONÇA

Departamento de Física /UFSCar

Desde sua descoberta, a Ressonância de Quadrupolo Nuclear (RQN), tem sido usado no estudo das propriedades estáticas e dinâmicas dos cristais, onde exista interação do gradiente campo elétrico gerado pela distribuição de cargas na vizinhança do núcleo de prova e o momento de quadrupolo deste núcleo. Qualquer variação nos parâmetros da rede, seja ocasionado por movimentos térmicos, pressão, deformação etc, pode causar mudanças na distribuição de cargas variando o gradiente campo elétrico, afetando assim a frequência de ressonância. Neste trabalho são apresentados os resultados obtidos em nosso laboratório da variação da frequência e do tempo de relaxação spin-rede com a temperatura nos compostos p-diclorobenzeno, 123triclorobenzeno, 124triclorobenzeno, clorato de potássio e clorato de sódio. A partir dos dados da frequência com a temperatura e utilizando a teoria de Bayer com a aproximação de Brown calculou-se as frequências vibracionais das moléculas. Com o objetivo de obter informações da distribuição de campo elétrico no sítio do ^{35}Cl , foi feita uma análise do comportamento da forma de linha de ressonância destes compostos.

FONTE CONTROLADA PARA ELETROMAGNETOS COM CONTROLE DE CAMPO.

EDIRON LIMA VERDE, WALDEMAR WOLNEY FILHO, NILSON MENDES BORGES
UFG

A construção de fontes de potência de eletromagnetos para experimentos de ressonância magnética nuclear (rmn), em que se necessita um controle preciso e estável de corrente, deriva do fato de que na ressonância nuclear o campo produzido pelo eletromagneto deve ser o mais estável possível quando definido o seu valor. A topologia básica para este tipo de fonte é a regulação do tipo PASS a transistores, com referências de tensão da ordem de 10PPM no controle de realimentação. Transformadores trifásicos, isolados e comutados em seções, mantém o linear de operação dos transistores quanto a dissipação de potência. Uma fonte que gera 15KW com tensão de saída de 0 a 150V estável e controle de corrente da ordem de 150A foi construída. Um sistema de resfriamento líquido mantém mínima a interferência na corrente por efeito térmico no banco de transistores de controle. As medidas de

campo são monitoradas através de sensores Hall que apresentam uma medida do valor do campo magnético de indução em tempo real.

ESTUDO DE DIFERENTES MÉTODOS FÍSICOS PARA OBTENÇÃO DE IMAGENS CLÍNICAS POR RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

CARLOS AUGUSTO MONTEIRO, WALDEMAR WOLNEY FILHO, NILSON MENDES BORGES
UFG

Nos últimos anos a ressonância magnética nuclear tem contribuído de modo significativo para o desenvolvimento de uma nova técnica de obtenção de imagens na área médica. O núcleo do átomo de hidrogênio, presente em grande quantidade nos organismos vivos, é a principal agente para a formação de imagens com o uso da ressonância magnética nuclear (rmn). Pulsos de radiofrequência e gradientes de campo são aplicados de maneira controlada para obter o sinal de rmn. O tempo de observação do sinal é limitado pelos diferentes mecanismos de relaxação nos diferentes tipos de tecidos do corpo humano. Sequências de pulsos apropriados são aplicadas para enfatizar os parâmetros de relaxação spin-rede T_1 e spin-spin T_2 . A imagem formada representa um mapeamento da magnetização nuclear transversal em um dado tempo, durante a aplicação da sequência de pulsos. Os pulsos de radiofrequência juntamente com os gradientes de campos são usados para fazer a rotação do vetor magnetização de modo seletivo. O sinal detetado corresponde a um ponto no espectro de frequência espacial da imagem, sendo que a posição deste ponto é determinado por gradientes de campo adicionais. Este trabalho apresenta o desenvolvimento de dois métodos para obtenção de imagens de rmn.

Efeito do Tratamento Térmico em pastilhas prensadas de poli(3-metiltiofeno) dopadas com ClO_4^- : Separação macroscópica de fases observada por Ressonância Paramagnética Eletrônica

O. R. NASCIMENTO, A. PAWLICKA

Instituto de Física de São Carlos, USP, S. Carlos -S.P.

E. C. PEREIRA L. O. S. BULHÕES

Laboratório Interdisciplinar de Eletroquímica e Cerâmicas, Departamento de Química, U. Federal de S. Carlos

L. WALMSLEY

Departamento de Física, Instituto de Geociências e C. Exatas, UNESP, Rio Claro, S.P.

Pastilhas prensadas de poli(3-metiltiofeno) (P3MT) dopadas com ClO_4^- foram aquecidas por duas horas a 85°C e rapidamente resfriadas em nitrogênio líquido. A temperatura ambiente, o espectro de Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE) da amostra tratada

mostrou maior largura de linha e maior razão de assimetria (e consequentemente maior condutividade) que o da amostra não tratada. Quando resfriamos lentamente a amostra tratada , seu espectro de RPE revelou uma separação em duas linhas distintas, em torno de -60°C , com diferentes razões de assimetria para as duas linhas, evidenciando duas regiões macroscopicamente distintas na amostra. Quando estudadas em função da potência da microonda, uma das linhas mostrou saturação, sugerindo ser devida a estados localizados e a outra não saturou mesmo a potências de microonda de 100mW, evidenciando estar ligada a spins de portadores de carga delocalizados.

**ESTUDO POR RESSONÂNCIA
MAGNÉTICA DUPLA (ENDOR) E TRIPLA
(TRIPLE) DOS RADICAIS CO_2^-
PRODUZIDOS POR RADIAÇÃO γ EM
ARAGONITAS DE ORIGEM BIOLÓGICA.**

D. U. SCHRAMM, A. M. ROSSI

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF)

Radicaís CO_2^- , formados por irradiação em aragonitas de origem biológica, são usados como marcadores na dosimetria e na datação geológica por RPE [1]. A localização e as vizinhanças destes centros na estrutura da aragonita são, no entanto, pouco conhecidas. Neste trabalho, estuda-se por ENDOR e Ressonância Tripla amostras de algas e corais irradiados por uma fonte de ^{137}Cs . O espectro de RPE das amostras apresentam linhas dos grupos CO_2^- com simetria ortorrômbica, de grande intensidade. O espectro de ENDOR desta espécie foi interpretado com o auxílio de medidas de Ressonância Tripla, indicando que estes grupos interagem com 3 prótons não equivalentes de moléculas de água situados entre 5 e 6 Å do radical. Estes resultados indicam que a vizinhança do CO_2^- é constituída por moléculas de água situadas em sítios de CO_3^{2-} próximos ao radical. Estas moléculas de água podem desempenhar papel importante na estabilização destes centros paramagnéticos.

[1] A. M. Rossi, D. U. Schramm, O. Chaix and G. Poupeau. Thermal Stability of Trapping Centers in Natural Aragonites: Consequences to EPR Dating. Bulletin of Magnetic Resonance, Vol. 15, Nos. 1/2 (1993).

Frequência de RQN em função da temperatura das amostras policristalinas comercial e recristalizada da arsenolita

JOÃO GIL DOS SANTOS, SAID R. RABBANI

Universidade de São Paulo

Medidas de ressonância de quadrupolo nuclear (RQN) pulsada da arsenolita (As_2O_3) foram realizadas para estudar o comportamento da frequência de ressonância ν_Q do ^{75}As , em função da temperatura na faixa de 80 a 400K. Os resultados obtidos foram interpretados á luz das teorias desenvolvidas por Bayer e Brown, onde foram determinados os valores da frequência librional ν_l e do momento de inércia efetivo I_{ef} . Os valores obtidos para ν_l e I_{ef} representam uma média global em virtude da existência dos movimentos intermoleculares e intramoleculares realizado pela molécula. O estudo da frequência de RQN tem mostrado ser uma ferramenta poderosa para fornecer informações concernentes aos movimentos moleculares (librações, vibrações internas, etc) nos sólidos. A frequência de RQN em função da temperatura foi explicada em termos da ligação entre o tensor gradiente de campo elétrico e a vibração molecular (movimento torcional). Com base nesta interpretação, a frequência de RQN é considerada como uma função da amplitude média quadrática da vibração torcional $\langle \theta^2 \rangle$, onde θ é o desvio angular do eixo principal do gradiente de campo elétrico de sua posição de equilíbrio. A frequência de RQN normalmente decresce monotonicamente á medida que a temperatura da amostra aumenta, como consequência do efeito médio da vibração molecular sobre o gradiente de campo elétrico. Geralmente a frequência de oscilação ou libração é da ordem de $\omega_t = 10^{12}\text{s}^{-1}$, sendo bem maior que a quadrupolar onde $\omega_q = 10^8\text{s}^{-1}$, logo é válido supor que o efeito dos movimentos da molécula faz com que o núcleo veja um gradiente de campo létrico promediado.

Resonancia Cuadrupolar Nuclear en n-Alcanos

L. VEGA, G. MONTI, M. ZURIAGA, C. MARTÍN

Facultad de Matemática, Astronomía y Física -

Universidad Nacional de Córdoba

Los parámetros característicos de la Resonancia Cuadrupolar Nuclear del ^{35}Cl , frecuencia de resonancia (ν_Q), ancho de línea ($\Delta\nu$) y los tiempos de relajación espín-red (T_1) y espín-espín (T_2), fueron medidos en el 1,2,3-Tricloropropano (TCP) y el 1,4-Diclorobutano, en función de la temperatura entre 77K y el punto de fusión de los compuestos. El espectro de resonancia del TCP consta de tres líneas, indicando la inequivalencia de los átomos de Cl en la molécula. El DCB muestra dos fases cristalinas obtenidas por diferentes tratamientos térmicos, en ambas fases se observa una única línea de resonancia.

En ambos compuestos y en todas las líneas observadas, el comportamiento de T_1 con la temperatura muestra dos regiones bien diferenciadas. En la zona de ba-

Las temperaturas T_1 tiene un comportamiento normal con la temperatura del tipo $1/T_1 = aT^\lambda$. A medida que la temperatura se incrementa se produce un fuerte acortamiento de T_1 indicando la presencia de procesos térmicamente activados.

Los valores experimentales de T_2 y $\Delta\nu$ muestran un comportamiento aproximadamente constante con la temperatura en la región de bajas temperaturas, a medida que la temperatura aumente el acortamiento en T_1 parece dominar el comportamiento de T_2 . Se determinan energías de activación para todas las líneas observadas y se encuentra que en el caso del TCP estos parámetros concuerdan con los obtenidos a partir de T_1 , mientras que no ocurre lo mismo en el caso del DCB.

Los resultados de análisis térmico diferencial muestran la existencia de un estado vítreo en el TCP con una temperatura característica $T_g = 146K$, y dos fases cristalinas en el DCB con una $T_c = 209.6K$.

Workshop: Relaxation in Biologic Systems Studied by Pulsed ESR (RES) - 09/06/95

Spin Relaxation in Magnetic Resonance

H. PANEPUCCI

Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo

The general subject of spin relaxation in Electronic and Nuclear Magnetic Resonance will be briefly introduced. Some examples will be used to illustrate theoretical models and mechanisms. Some of the various experimental methods will be described and discussed in relation with the evolution of the Magnetic Resonance techniques. Finally the sort of information that can be obtained from relaxation times measurement will be briefly exemplified with some applications of relaxometry as an investigative tool in materials research and medical Magnetic Resonance.

MEASUREMENT OF INTERSPIN DISTANCE BY TIME-DOMAIN EPR OF SPIN-LABELED LOW-SPIN METHEMOGLOBIN

VLADIMIR BUDKER, JING-LONG DU, MICHAEL SEITER, GARETH R. EATON, SANDRA S. EATON

Department of Chemistry, University of Denver, Denver, Colorado USA 80208

Nitroxyl free radical electron spin relaxation times for spin-labeled low-spin methemoglobins were measured between 6 and 120 K by two-pulse electron spin echo spectroscopy and by saturation recovery EPR. Spin-lattice relaxation times for cyano-methemoglobin and imidazole-methemoglobin were measured between 8 and 25 K by saturation recovery and between 4.2 and 20 K by electron spin echo. At low temperature the iron electron spin relaxation rates are slow relative to the iron-nitroxyl electron-electron spin-spin splitting. As temperature is increased, the relaxation rates for the Fe(III) become comparable to and then greater than the spin-spin splitting, which collapses the splitting in the continuous wave EPR spectra and causes an increase and then a decrease in the nitroxyl electron spin echo decay rate. Throughout the temperature range examined, interaction with the Fe(III) increases the spin-lattice relaxation rate ($1/T_1$) for the nitroxyl. The measured relaxation times for the Fe(III) were used to analyze the temperature-dependent changes in the spin echo decays and in the saturation recovery (T_1) data for the interacting nitroxyl and to determine the interspin distance, r . The values of r for three spin-labeled methemoglobins were between 15 and 15.5 Å, with good agreement between values obtained by electron spin echo and saturation recovery. Analysis of the nitroxyl spin echo and saturation recovery data also provides values of the iron relaxation rates at temperatures where the iron relaxation rates are too fast to measure directly by saturation recovery or electron spin echo spectroscopy. Related experiments also were performed for spin-labeled iron porphyrins. These results demonstrate the power of time-domain EPR measurements to probe the distance between a slowly-relaxing spin and a relatively rapidly relaxing metal in a protein.

ELECTRON SPIN RELAXATION TIMES IN IRRADIATED ALANINE AND RELEVANCE TO RADIATION DOSIMETRY

JING-LONG DU, BARNARD GHIM, GARETH R. EATON, SANDRA S. EATON

Department of Chemistry, University of Denver, Denver, Colorado USA 80208

To compare EPR signal intensities obtained on different spectrometers with different resonators that produce different microwave B_1 per watt of incident power it is important to have information concerning the electron spin relaxation times of the paramagnetic centers. To achieve the highest possible signal-to-noise for weak signals EPR spectra sometimes are sometimes run at microwave powers in which the EPR signal intensity is not proportional to the square root of microwave power, i.e. the signal is partially saturated. Relaxation time data is particularly important for comparison of data obtained under these conditions. Current dosimetry measurements are done at about 9 GHz. A knowledge of the frequency dependence of relaxation times is one of the factors that is needed to determine whether improved sensitivity can be obtained at a different frequency and to compare measurements on different spectrometers. Studies of electron spin relaxation times for irradiated alanine measured by saturation recovery and electron spin echo spectroscopy as a function of microwave frequency will be discussed.

Ressonâncias Magnéticas (RES) - 09/06/95

ESTUDO DO CAMPO CRISTALINO NO SISTEMA BAIXO-SPIN OS-DTDP

ANTONIO N. MEDINA, FLÁVIO C. G. GANDRA

Instituto de Física Gleb Wataghin, UNICAMP

JOACY B. DE LIMA

Departamento de Química, Universidade Federal do Maranhão

DOUGLAS W. FRANCO

Instituto de Química de São Carlos, USP

MAURO L. BAESSO

Universidade Estadual de Maringá

Apresentamos resultados de absorção óptica e Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE) para um novo composto $[Os(NH_3)_5 - DTDP]TFMS_3$ (DTDP = 4,4'-dithiodipyridina e TFMS = trifluormetano sulfonado). Os experimentos de RPE foram realizados em banda-X (9.3 GHz) em amostras na forma de pó, na temperatura de 7K. O espectro de absorção óptica no Infra-vermelho próximo, foi obtido pelo método de fotoacústica, em temperatura ambiente, e mostra uma banda larga centrada em $2100cm^{-1}$ que está em acordo com a previsão obtida através dos resultados de RPE. Neste tipo de compostos Os^{3+} , na aproximação de campo forte, é descrito como sistema baixo-spin com momento angular orbital efetivo $L = 1$ e spin $1/2$. Nesta aproximação são apresentadas expressões analíticas para determinação dos parâmetros de distorção de campo cristalino e para os níveis de energia do sistema, supondo distorções axial e rômica. É descrito também, um método gráfico que possibilita a obtenção destes parâmetros diretamente dos valores de g , extraídos do espectro de RPE, sem a necessidade da realização de todos os cálculos. A análise do espectro

de pó para este composto, mostra que o melhor ajuste com os dados experimentais é obtido considerando três diferentes valores de g ($g_1 = 2.24, g_2 = 1.75, g_3 = 1.67$), largura de linha de 145 Oe e forma de linha Lorentziana. A partir destes valores determinamos os parâmetros de distorção axial ($\Delta = 597 cm^{-1}$) e rômico ($V = 77 cm^{-1}$) do campo cristalino cúbico e o fator de redução orbital ($k = 0.92$).

Agradecimentos : Este trabalho foi realizado com suporte financeiro da FAPESP e CNPq.

Determinação Estrutural por RMN de Sítios de Hidrogênio em $LiNbO_3$ Sujeito à Troca Protônica

M. ENGELSBERG, RICARDO E. DE SOUZA, L. H.

PACOBAYBA, GEORGE C. DO NASCIMENTO

Departamento de Física - UFPE

$LiNbO_3$ sujeito à troca protônica é um material de grande interesse tecnológico devido a suas aplicações na fabricação de guias de onda ópticos. As características ópticas desejáveis resultam do significativo aumento do índice de refração extraordinário e a pequena diminuição do índice ordinário que acompanha a troca iônica. Apesar deste grande interesse, o mecanismo físico que provoca estas mudanças é pouco compreendido, em parte pela falta de informação sobre a exata localização dos prótons. No presente trabalho utilizamos uma análise baseada no segundo momento de Van Vleck para a determinação estrutural dos sítios de interesse. Os resultados obtidos indicam que estes prótons entram na rede, não na posição dos íons de Lítio, senão que nos planos de oxigênio numa posição equidistante de dois dos oxigênios que formam o triângulo neste plano. Discutimos também as possíveis implicações da estrutura proposta na formulação de um

modelo para as mudanças observadas nos índices de refração.

O EFEITO DE OSCILAÇÕES ANARMÔNICAS NA REDE SOBRE A FREQUÊNCIA DE RQN EM CRISTAIS MOLECULARES

CHRISTOVAM MENDONÇA

Depto. Física, UFSCar.

SAID R. RABBANI, HIRAM B. PASCOAL, HERNÁN CERVANTES R.

Instituto de Física, USP

A frequência de ressonância de quadrupolo nuclear (RQN) diminui com o aumento da temperatura. Este efeito provém da modulação da interação quadrupolar pelos movimentos vibratórios da rede ou pelos modos internos das moléculas. Bayer (*Z. Phys.* **130**, 227 (1951)) relacionou a frequência de RQN com a amplitude quadrática média das librações, tomadas como harmônicas, e deduziu uma fórmula que expressa uma variação linear para altas temperaturas, o que não é comprovado experimentalmente. Neste trabalho a amplitude quadrática média da libração é calculada para um oscilador anarmônico com potencial simétrico, o termo adicional de quarta potência tratado como perturbação. A expressão obtida para frequência em função da temperatura é análoga à fórmula de Bayer, acrescida de um termo relacionado com a anarmonicidade e que reproduz o comportamento não linear observado para temperaturas próximas do ponto de fusão. A fórmula é testada com dados de espectroscopia Raman e RQN do cloro sólido.

Ressonâncias II (RES) - 09/06/95

ESTRUTURA MOLECULAR E ESPECTROS DE EPR DO COMPOSTO MONOCRISTALINO DIBROMOBIS(1-FENIL-3,5-DIMETILPIRAZOL)COBRE(II), $[CuBr_2(fdmp)_2]$.

CLAUDIA ELISABETH MUNTE, OTACIRO RANGEL NASCIMENTO

Instituto de Física de São Carlos - USP

MARIA PEDRINA MATTIOLI

Instituto de Química de Araraquara - UNESP

RAFAEL CALVO

INTEC, CONICET, Santa Fé, Argentina

Estudos estruturais e magnéticos do composto de $[CuBr_2(fdmp)_2]$, com auxílio de difração de Raio-X e espectroscopia de EPR são apresentados. O complexo cristaliza no grupo espacial monoclinico P21/n com $a = 8.165(5)\text{Å}$, $b = 10.432(3)\text{Å}$, $c = 13.385(4)\text{Å}$,

$\beta = 100.12(4)^\circ$ e $Z = 2$. Os íons de Cu(II), que estão em coordenação quadrado-planar trans ligando-se a dois Nitrogênios e dois Bromos, se encontram em um centro de inversão. Somente uma linha de EPR é observada, proveniente do colapso das ressonâncias relativas aos dois íon de Cu(II) magneticamente não equivalentes, causado pela interação de troca.

Devido à diferença significativa entre os pesos atômicos do Nitrogênio e Bromo, não é esperada uma simetria axial para o tensor \vec{g} como é comum ocorrer em vários complexos de Cu(II); de fato, a decomposição de \vec{g} cristalino para os dois \vec{g} moleculares revelou três autovalores distintos, com nenhuma das direções próximas à normal ao quadrado-planar. Medidas de absorção ótica foram realizadas, com o objetivo de identificar o estado fundamental, porém o espectro consta basicamente de bandas de transferência de carga e portanto informações a respeito das transições não puderam ser obtidas.

A contribuição à variação angular da largura da linha de ressonância se deve basicamente a interações dipolares, uma vez que não são observadas diferenças significativas entre medidas em Banda X e Banda Q. Estudos com a temperatura estão em andamento, para a determinação do parâmetro de troca \vec{J} .

Medições de EPR em $Cu(D,L - alanina)_2$, um antiferromagneto unidimensional.

MARIA DO ROSÁRIO ZUCCHI, CLAUDIA ELISABETH MUNTE, OTACIRO RANGEL NASCIMENTO, MARIA CRISTINA TERRILE

Instituto de Física de São Carlos - USP

R. A. CALVO, P. G. BOLCATTI, RAFAEL CALVO
INTEC, CONICET, Santa Fé, Argentina

Medidas de Ressonância Paramagnética Eletrônica foram realizadas em monocristais de $Cu(D,L - alanina)_2$, em função da orientação do campo magnético nos três planos cristalinos, à frequências de 9.2 e 35 GHz. Uma única linha de ressonância foi observada em todas as orientações, em ambas as frequências. A partir desses resultados foram obtidas as variações angulares do fator \vec{g} e da largura da ressonância. Os valores principais do tensor \vec{g}^2 obtidos em ambas as bandas foram: $g^2(a) = 4.215$, $g^2(b) = 4.510$ e $g^2(c) = 4.775$, correspondentes aos três eixos cristalinos. A largura de linha é máxima ao longo do eixo b , e aproximadamente constante no plano ab . Os resultados podem ser explicados considerando-se a estrutura cristalina de $Cu(D,L - alanina)_2$ [1]. Os íons cobre estão colocados em cadeias paralelas ao eixo c , conectados por uniões fracas através dos oxigênios de moléculas de água de hidratação. A dinâmica de spins mostra um comportamento unidimensional que é detectado através da variação angular da largura de linha observada. São discutidos os resultados de EPR em termos da estrutura do material.

[1] Calvo, R.; Levstein, P.R.; Castellano, E.E.; Fabiane, S.M.; Piro, O.E.; Oseroff, S.B.; *Inorganic Chemistry* 30, 216 (1991).

Relaxação Magnética do ^7Li no intercalado [PEO:Li]MoS₂

DONOSO P, T. BONAGAMBA, N. MELLO, FRARE P. L, PANEUCCI H

Instituto de Física de São Carlos, USP

G. GONZALEZ, M. SANTA ANA, E. BENAVENTE

Facultad de Ciências, Universidad de Chile

Estudamos as propriedades de difusão do Li^+ complexado com o polímero Poly(óxido de etileno), PEO, e intercalado em dissulfeto de Molibdênio, MoS_2 [1]. Aqui se aproveita a natureza laminar do MoS_2 , modificando-se a fase móvel onde se produz a migração do lítio, complexando-o na macromolécula PEO. A difusão do lítio nos espaços interlaminares do MoS_2 constitui uma das variáveis importantes na procura de compostos de intercalação apropriados para utilização em baterias [2]. O objetivo do estudo de RMN é caracterizar a mobilidade do lítio neste composto, comparando-a com aquela observada no intercalado Li_xMoS_2 . A mobilidade do Li^+ no composto [PEO:Li]MoS₂, foi investigada medindo-se o tempo de relaxação spin rede do ^7Li e do ^1H , a 34 MHz, em função da temperatura. Nossos resultados mostram a presença de um máximo na taxa de relaxação T_1^{-1} , em $T = 310 \text{ K}$, em ambos os núcleos. Este comportamento não é observado na relaxação do ^7Li no intercalado $\text{Li}_{0,1}\text{MoS}_2$. Isto indica que no [PEO:Li]MoS₂ a dinâmica do Li^+ passa a ser dominada pelos movimentos segmentários das cadeias poliméricas, da mesma forma como ocorre nos complexos poliméricos PEO:LiX ($X = \text{ClO}_4, \text{BF}_4$) [3].

1 - Adv. Mater. 5 (10) 738 (1993). 2 - IEEE Spectrum, 97-101 (Nov. 1992) 3 - J. Chem. Phys. 98, 10026 (1993).

ESTUDO DO COMPLEXO DO ÍON COBRE(II) COM DICLOROBIS(1-FENIL-3,5-DIMETILPIRAZOL), [$\text{CuCl}_2(\text{fdmp})_2$], POR RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA (RPE).

ANTÔNIO JOSÉ DA COSTA FILHO, OTACIRO RANGEL NASCIMENTO

Instituto de Física de São Carlos - USP

MARIA PEDRINA MATTIOLI

Instituto de Química de Araraquara - UNESP

RAFAEL CALVO

INTEC, CONICET, Santa Fé, Argentina

O íon Cobre(II) é encontrado formando uma série de complexos, cuja característica marcante é a presença de uma interação entendida como sendo devida à superposição de funções de onda dos elétrons de sítios

paramagnéticos próximos: a interação de troca. O complexo $\text{CuCl}_2(\text{fdmp})_2$ inclui-se nessa família e estudos estruturais constituem o objetivo do presente trabalho. O monocristal utilizado em nossas medidas apresentou uma estrutura cristalina diferente daquela determinada por R.H.P. Francisco *et al.* [1] e estudada por J. Goslar *et al.* [2]. Essa nova estrutura tem quatro íons por cela unitária, sendo monoclinica com parâmetros de rede $a = 8.3795 \text{ \AA}$, $b = 22.6298 \text{ \AA}$, $c = 12.2557 \text{ \AA}$, $\beta = 98.43^\circ$, como foi por nós determinada, através de difração de RX. Os quatro íons de Cobre(II) interagem aos pares, dando origem a espectros que apresentam duas linhas de ressonância em dois planos cristalinos e uma única linha de ressonância no terceiro plano. Nos planos onde ocorrem duas ressonâncias é observado um colapso das duas linhas para algumas direções de campo magnético aplicado, devido à presença da interação de troca. No terceiro plano ocorre colapso por simetria. O cálculo do parâmetro de troca, J , forneceu um valor de 6.9 mK . [1] R.H.P. Francisco, J.R. Lechat, A.C. Massabni, C.B. Melios, M. Molina; *J. Coord. Chem.*, 10(1980)149-153.

[2] J. Goslar, W. Hilczler, S.K. Hoffman; *Phys. Stat. Sol. (b)*, 175(1993)465-475.

CONTRIBUIÇÃO DA INTERAÇÃO QUADRUPOLAR NUCLEAR PARA A RELAXAÇÃO SPIN-REDE EM ALCALINOS-HALOGENADOS.

ABDUL HAMID SAEED KSHIR, WALDEMAR WOLNEY FILHO, NILSON MENDES BORGES
UFG

Medidas de tempo de relaxação T_1 nos alcalinos-halogenados fundidos LiBr , LiI , KI e misturas binárias de $\text{LiBr}_x - \text{NaBr}_{1-x}$ foram obtidos em diferentes intervalos de temperatura. Foi verificado que o mecanismo de relaxação dominante para os isótopos ^{81}Br e ^{127}I nestes compostos é o acoplamento do momento quadrupolar dos núcleos relaxantes com o gradiente de campo elétrico flutuante em suas posições. Os resultados experimentais são analisados através da teoria de Torrey modificada, extendendo-a para o caso de núcleos com spin $I > \frac{1}{2}$, levando-se em conta o acoplamento entre duas e três partículas na função de correlação do gradiente de campo elétrico.

ELECTRON SPIN RESONANCE IN QUATERNARY BOROCARBIDES

A. A. R. FERNANDES

IME

S. L. BUD'KO, A. M. ROSSI, E.

BAGGIO-SAITOVITCH

CBPF

Recently discovered series of quaternary borocarbides $\text{RT}_2\text{B}_2\text{C}$ ($R = \text{rare earth}$, $T = \text{transition metal}$) caused

a great deal of attention due to the elevated superconducting transition temperature for $LuNi_2B_2C$ and rich magnetic phase diagram for the borocarbides with R - magnetic rare earth. In the present work the X - band electron spin resonance powder spectra of RT_2B_2C ($R = Gd/Y$, $T = Ni, Co$) have been studied in the temperature range from 3 to 300 K, i.e. both above and below the magnetic ordering temperatures. The ESR spectra are qualitatively different in the two different temperature regions: above the magnetic transition they show a temperature dependence of intensity, linewidth and g - factor, characteristic of paramagnetic centers; at and below the transition temperature a new line, with a resonance field around 1.5 kOe (for $R = Gd$) and an anomalous behavior of the parameters, described above, appears in the ESR spectra. The results are compared with the magnetic phase diagram suggested by the macroscopic (ac susceptibility and resistivity) measurements in this series.

MEDIDA DA INTERAÇÃO HIPERFINA DO ^{13}C NO HEXACIANETO DE RÓDIO EM REDE DE KCl POR R.P.E.

NEY VERNON VUGMAN, RICARDO A. GIANNONI,
JOSE AGUIAR COELHO NETO
Instituto de Física - UFRJ
ALEXANDRE MALTA ROSSI
CBPF

Espécies paramagnéticas de hexacianeto de ródio divalente foram produzidas por irradiação com raios-X de monocristais de KCl dopados com este complexo na concentração de 0.5 M. Medidas de R.P.E. em onda contínua, R.P.E. pulsada por detecção do decaimento livre da magnetização (Fid induced EPR) e do eco de spin (EI-EPR) realizadas em banda X (9 GHz), na temperatura de 4.2K revelam a presença de linhas satélites de intensidade relativa 1:100 e 1:50 atribuídas respectivamente a interação hiperfina do carbono-13 com os cianetos (CN) axiais e equatoriais da molécula. A variação angular permitiu medir as componentes principais do tensor de interação hiperfina e calcular a densidade eletrônica não emparelhada nos carbonos pela primeira vez neste tipo de molécula. Medidas em banda Q (35 GHz) a 4.2K estão em andamento para complementar os dados obtidos.

TÉCNICAS DE SELEÇÃO DE ESPÉCIES EM R.P.E. PULSADO. UMA APLICAÇÃO AO HEXACIANETO DE RÓDIO.

JOSE AGUIAR COELHO NETO, NEY VERNON
VUGMAN
Instituto de Física - UFRJ

A separação do espectro de R.P.E. de espécies paramagnéticas superpostas conseguida pela subtração de espectros que foram obtidos de forma a possibilitar

diferenças nas amplitudes relativas das espécies com diferentes tempos de relaxação. Para a seleção com base nos tempos de relaxação spin-spin são obtidos espectros de R.P.E. pulsado com varredura de campo magnético, cuja detecção é feita pela amplitude do decaimento livre da magnetização (FID) e do eco de spin. A diferença nas amplitudes relativas entre as espécies provem da diferença de tempo entre o pulso de preparação e o instante da detecção nestes dois métodos. Para a seleção no espectro por varredura de campo magnético com base no tempo de relaxação spin-rede, é feita primeiramente uma inversão da magnetização por um pulso de 180 graus e, após um tempo de espera, obtém-se o decaimento livre da magnetização com um pulso de 90 graus, tal como na técnica de recuperação de inversão. Neste caso, a escolha conveniente do tempo de espera de forma que a magnetização de uma dada espécie seja nula no instante da detecção possibilita o cancelamento diferenciado de cada uma das espécies.

ESTUDIO POR RESONANCIA CUADRUPOLEAR NUCLEAR Y ESPECTROSCOPIA RAMAN DEL 4 CLOROBIFENILO Y DEL 4-4' DICLOROBIFENILO

JOSÉ F. SCHNEIDER, ALDO H. BRUNETTI
Facultad de Matemática, Astronomía y Física Universidad Nacional de Córdoba
LUIZ A. DE OLIVEIRA NUNES, ALBERTO E. WOLFENSON, PAULO PORTEZANI, SILVIA L. CUFFINI, YVONNE P. MASCARENHAS
Instituto de Física de São Carlos - USP.

Los compuestos de la familia de los bifenilos presentan interesantes características desde el punto de vista estructural, siendo objeto de amplios estudios por diferentes técnicas. Mediciones de Resonancia Cuadrupolar Nuclear (RCN) del ^{35}Cl en el 4-Cloro Bifenilo (4-CB), sugieren la existencia de un fuerte desorden estructural, manifestado en un ensanchamiento inhomogeneo de las líneas de resonancia y valores del tiempo de relajacion spin-red (T_1) particularmente bajos. El origen de este desorden puede ser atribuido a la existencia de una dispersión de valores del ángulo diedro entre los anillos bencénicos de la molécula, originado por la fuerte distorsión que sufre la molécula (respecto de su configuración de molécula libre) por el potencial intermolecular. Esto puede ser correlacionado con simulaciones de mecánica molecular del 4CB, en estado libre. Por otra parte, se detectan cambios dinámicos importantes (a través de mediciones de T_1 en función de la temperatura), esto se correlacionados con alteraciones de las líneas del espectro Raman. La importancia de la interacción intermolecular, tanto en los aspectos estructurales como dinámicos observados en la 4-CB fundamentada en mediciones efectuadas por RCN y Raman de la 4-4'Diclorobifenilo (4-4'DCB). La conformación

de esta molécula no se altera en el estado cristalino respecto al estado gaseoso, evidencia una estructura ordenada y muestra un comportamiento dinámico normal.

**FASES DESORDENADAS E
INCOMMENSURADAS EN BIFENILOS
CLORADOS ESTUDIADAS POR
RESONANCIA CUADRUPOLEAR NUCLEAR
Y ESPECTROSCOPIA RAMAN**

JOSÉ F. SCHNEIDER, ALDO H. BRUNETTI

*Facultad de Matemática, Astronomía y Física Universidad
Nacional de Córdoba*

LUIZ A. DE OLIVEIRA NUNES, ALBERTO E.

WOLFENSON

Instituto de Física de São Carlos - USP.

Se estudió la transición normal-incommensurada del 4,4'-Diclorobifenil sulfone (4,4'-DCBS) por RCN, a fin de caracterizar el comportamiento de la modulación IC cerca de la región de transición. Se midieron las frecuencias de resonancia y los tiempos de relajación spin-red (T_1) en función de la temperatura. Comparando los resultados obtenidos con lo previsto por los modelos de onda plana, se observa un buen acuerdo en la descripción de los espectros, sin embargo no hay acuerdo en el comportamiento de T_1 . Por otra parte, mediciones de RCN y espectroscopia Raman en la 4,4'-Diclorobenzofenona (4,4'-DCBF) muestra también la existencia de transiciones de fase a estados de desorden parcial, de naturaleza diferente a las observadas en el 4,4'-DCBS. Se observan anomalías en el comportamiento dinámico del compuesto a través ambas técnicas. Se detectan también fuertes efectos de histéresis en las temperaturas de transición, dependientes de las impurezas de la muestra.

**Vibrações Cristalinas e Moleculares no
compuesto $(\text{NH}_4)_2\text{FeF}_5\text{H}_2\text{O}$ Observadas por
Espectroscopia Mössbauer.**

LUCIANA KAZUMI HANAMOTO, CARMEN SILVIA DE
MOYA PARTITI

Instituto de Física da USP

É comum encontrar na literatura trabalhos, em EM, nos quais estudando a variação com a temperatura do deslocamento Doppler de 2ª ordem e do fator f, utilizam o modelo de Debye. Temos, no entanto, encontrado até um fator de 2 entre as temperaturas de Debye obtidas com os dois tipos de ajuste (1). É que nesses casos, especificamente, não só os modos acústicos, para os quais o modelo de Debye é uma boa aproximação, mas também os modos ópticos contribuem para o espectro de frequências. Temos resolvido esse problema incluindo no espectro de frequências também a contribuição dos modos ópticos que são bem descritos pelo modelo de Einstein (1). E mais ainda, muitas vezes a maior contribuição para o espectro de frequências vem

justamente dos modos ópticos.

Resultados anteriores de EM nos compostos $\text{K}_2\text{FeCl}_5\text{H}_2\text{O}$ e $(\text{NH}_4)_2\text{FeCl}_5\text{H}_2\text{O}$ forneceram a variação térmica do fator f e do deslocamento Doppler de 2ª ordem (1). O espectro de frequências proposto inclui a contribuição das vibrações intermoleculares (modelo de Debye) e das vibrações intramoleculares (modelo de Einstein). Aplicamos esse modelo ao composto $(\text{NH}_4)_2\text{FeF}_5\text{H}_2\text{O}$, medindo o fator f e o deslocamento Doppler de 2ª ordem no intervalo de temperatura entre 78 e 340 K. A partir desses dados pode-se determinar os momentos (+2) e (-2) do espectro de frequências vibracionais $g(\omega)$ que pode ser representado por uma superposição dos modos acústicos e ópticos. Os resultados numéricos são discutidos em comparação com dados publicados de calor específico e espectroscopia vibracional.

(1) C.S.M. Partiti, A. Piccini and H. R. Rechenberg, *Solid St. Commun.* 56, 687 (1985).

**Estudo da relaxação spin-rede nas amostras
policristalinas comercial e recristalizada da
arsenolita**

JOÃO GIL DOS SANTOS, SAID R. RABBANI

Universidade de São Paulo

As medidas do tempo de relaxação spin-rede em função da temperatura $T_1(T)$, foram realizadas em amostras policristalinas comercial e recristalizada, respectivamente, na faixa de 80 a 400K. Os resultados obtidos foram analisados segundo modelo elaborado por Woessner e Gutowsky da teoria de Bayer. O tempo de relaxação spin-rede está relacionado com a interação dos núcleos com a rede, tendo apresentado uma forte dependência com a temperatura, como era previsto na teoria de Bayer. Esta dependência pode ser explicada levando em consideração as librações moleculares. A relaxação quadrupolar nuclear spin-rede, está baseada nas contribuições das oscilações torcionais e nas probabilidades de transições. Utilizamos uma expressão para ajustar os dados experimentais de T_1 das amostras em discussão, onde obtivemos os valores do tempo de vida média τ_0 do nível torcional da molécula bem como g que é o coeficiente térmico da frequência média dos modos torcionais e que depende da vibração da rede.

**RMN DE ^1H EN MADERA DE PINO Y
DETERMINACION DE LA DISTRIBUCION
DEL AGUA DURANTE EL SECADO.**

ALEJANDRO P. BUSSANDRI, MARIANO J. ZURIAGA

*FAMAF - UNC, Ciudad Universitaria, 5000 Córdoba,
Argentina*

La madera es un sistema heterogéneo de importancia biológica e industrial. La mayoría de sus propiedades físicas dependen del contenido de humedad (MC) y

la presencia de agua influencia además el comportamiento de bases para pinturas, preservantes, selladores, etc. Esto muestra la importancia del estudio de la distribución del agua en maderas de importancia comercial. En este trabajo se utilizó la RMN de protones para estudiar madera de Pino Elliotis durante el secado. Se ha determinado la relación entre la densidad de protones del agua y de la madera y se muestran las ventajas de este método para la determinación del MC. Experimentos de espín-eco con la secuencia de CPGM muestran una relajación multiexponencial caracterizada por al menos tres tiempos de relajación T_2 . Con la ayuda de datos anatómicos, estos tiempos de relajación han sido asignados al agua en las paredes de las celdas, en los lumenes de la madera tardía y en los lumenes de la madera temprana. Esta distribución de T_2 se ha interpretado en base a modelos de difusión en los lumen de la madera.

Mediciones realizadas en el LANAIS de RMN. Trabajo parcialmente financiado por SECYTUNC y CONICOR.

VIBRAÇÕES ANARMÔNICAS E O DESLOCAMENTO DA LINHA RAMAN COM A TEMPERATURA

CHRISTOVAM MENDONÇA

Depto. Física, UFSCar

SAID R. RABBANI, HIRAM B. PASCOAL, HERNÁN
CERVANTES R

Instituto de Física, USP

Os desvios em frequência e os alargamentos das linhas Raman observados com o aumento da temperatura são calculados explicitamente em função do termo de quarta potência no potencial do movimento vibratório, tratado como perturbação. A presença deste termo altera o espectro vibracional de modo que as linhas espectrais apresentam alargamento inhomogêneo com frequência média e largura dependentes da temperatura. A expressão deduzida para a frequência média revela (a) que o efeito da anarmonicidade está presente mesmo para $T = 0$, e (b) o desvio varia quase linearmente em altas temperaturas. A fórmula ajusta-se muito bem aos espectros Raman do cloro e do benzeno sólidos, obtendo-se valores consistentes para os parâmetros extraídos por regressão. Este resultado encontra aplicação no cálculo dos efeitos térmicos sobre a frequência da ressonância de quadrupolo nuclear (RQN).

SEMICONDUCTORES

Workshop: Crescimento Epitaxial de Semicondutores no Brasil (SEM) - 07/06/95

MBE GROWTH AND CHARACTERIZATION OF III-V RELATED HETEROSTRUCTURES AT THE PHYSICS INSTITUTE, SÃO PAULO UNIVERSITY.

JOSÉ ROBERTO LEITE
 IFUSP

The status of current activities in the New Semiconductor Materials Laboratory (LNMS) on growth and characterization of III-V related heterostructures is briefly reviewed. *AlGaAs/GaAs* and *InGaAs/GaAs* derived heterostructures have been currently grown in our GEN-II Molecular Beam Epitaxy (MBE) equipment and used for both, basic and applied research. In this presentation we focus on our investigations about epitaxial structures containing single and multiple (superlattices) delta-doped layers. Delta-doping in bulk *GaAs* and in *AlGaAs/GaAs* quantum wells (QWs) has been investigated by using photoluminescence (PL), photoluminescence excitation (PLE), photorefectance, Raman spectroscopy, Hall effect and other transport techniques. Recently, our studies have been extended to *InGaAs/GaAs* quantum wells with doping in the barriers and in the wells.¹ Self-consistent electronic structure calculations have been carried out within the formalism of the local density functional theory and the results used to analyse the data and guide the experiments.² The highlights of our investigations on the delta-doped structures include the observations of quantum-confined optical transitions, the evidence of two-dimensional to three-dimensional transition for the electron gas, the plateau-behavior for the conductivity along the direction, perpendicular to the layers, etc.

References 1. A. Marti Ceschin, A.A. Quivy, J.A.N.T. Soares, R. Enderlein, A. Tabata, L.M.R. Scolfaro, E.C.F. da Silva, J.R. Leite, J.B.B. Oliveira, and E.A. Meneses, *Superlattices and Microstructures* **15**, 333 (1994).

2. L.M.R. Scolfaro, D. Beliaev, R. Enderlein, and J.R. Leite, *Phys. Rev.* **B50**, 8699 (1994).

3. R. Enderlein, L.M.R. Scolfaro, and J.R. Leite, *Phys. Rev.* **B50**, 18312 (1994).

CRESCIMENTO EPITAXIAL DE SEMICONDUCTORES III-V NO CETUC PUC-RIO

BORIS YAVICH, PATRÍCIA LUSTOZA DE SOUZA, JEAN PIERRE VON DER WEID
 Centro de Estudos em Telecomunicações Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

Os projetos em andamento no CETUC PUC-Rio estão principalmente voltados para o crescimento de estruturas para aplicação em dispositivos de modulação óptica. Estão sendo desenvolvidas estruturas à base de *InAlAs* e *InGaAlAs*, para trabalharem na faixa de $1,55\mu\text{m}$, que utilizam o efeito Stark confinado para modular por eletroabsorção a intensidade da luz em guias ópticos. Nesses materiais o *band-offset* da banda de condução é relativamente maior se comparado com outros semicondutores III-V, possibilitando um melhor confinamento para os elétrons. Estruturas à base de *AlGaAs/GaAs* estão sendo crescidas para aplicação em moduladores de λ na faixa de $1,3$ e $1,55\mu\text{m}$ com base no efeito combinado de modulação de índice de refração e modos de emissão de superfície. Fora da área de dispositivos optoeletrônicos, estão sendo crescidas e caracterizadas amostras de *InP* com uma camada ou uma superrede de dopagem planar de Si. Esse projeto deverá ser estendido para amostras de *InGaAs* e outras ligas ternárias. Além disso, estamos fornecendo amostras de *InP* para estudos de efeitos de radiação de alta energia nas propriedades optoeletrônicas dessas amostras. Os resultados dos diferentes projetos serão apresentados e discutidos.

HIGHLIGHTS AND SELECTED ASPECTS OF THE DEVELOPMENT OF MOLECULAR BEAM EPITAXY: PERSPECTIVE AND FUTURE DIRECTIONS

PIERRE BASMAJI

IFSC-USP, Cx.P. 369 CEP 13560-970, São Carlos-SP

The technique of MBE is potentially superior to conventional epitaxial technics in the growth of very abrupt heterojunctions and artificial layer semiconductor structures with nanometer dimensions. This progress of technology gave rise to exploit the conception of band gap engineering.

Between 1989-1993, the research activities of MBE group at São Carlos was devoted to the growth of structure based on 2DEG, with quantum confinement and microscopic structuring (interfaces, dopant concentration, structure of a surface characterized by RHEED). Recently (1993-1995) we have been interested in the investigation of basic phenomenas, associated with devices of reduced dimensionality (wire, dot ...). In addition, quantum wire and box structures self-organized on high-index GaAs (n11)A and (n11)B are of particular interest.

In this communication, we will present a challenge for growth studies on vicinal and high index surface and transport properties of low dimension structures.

MBE EM BELO HORIZONTE - O GRUPO DE SEMICONDUTORES

ALFREDO GONTIJO DE OLIVEIRA

UFMG

O grupo de Física de Semicondutores em Belo Horizonte iniciou suas atividades em 1984 com a aquisição de um equipamento de Epitaxia por Feixe Molecular (MBE) e instalação do Laboratório de Epitaxia. O grupo cresceu e se consolidou a partir deste Laboratório, com a re-orientação de atividades de pesquisas por parte de alguns docentes do Departamento de Física e sistematicamente pela contratação de novos pesquisadores. Inicialmente foi exigido o grau de doutor e atualmente já estamos contratando a nível de pós-doutorado. O grupo é hoje constituído de 14 professores doutores (2 teóricos) vinculados à instituição, atuando em crescimento; preparação e caracterização de amostras; e estudos de fenômenos fundamentais. Atualmente, estamos iniciando atividades em dispositivos em micro- e opto-eletrônica quântica. Os pesquisadores atuam nos Laboratórios de Epitaxia, Processamento e Fabricação de Dispositivos, Transporte Elétrico e Óptico. Nossas pesquisas têm sido genericamente direcionadas para o estudo de cristais de materiais semicondutores compostos do tipo III-V. Nosso objetivo é a preparação de estruturas contendo heterojunções, poços quânticos, super-redes e uma ampla diversidade de perfis de dopagem. Em nosso Laboratório de Epitaxia temos nos dedicado ao estudo dos sistemas AlGaAs e InGaAs, em amostras que podem ser dopadas do tipo n ou do tipo p utilizando silício e berílio, respectivamente. Como exemplo de estruturas preparadas e já estudadas citamos: a) super-redes composicionais de AlGaAs; b) estruturas com dopagens moduladas; c) estruturas com dopagem planar; d) poços quânticos múltiplos; e) interfaces metal-semicondutor; f) estruturas com camadas altamente dopadas; g) estruturas pseudomórficas. Até o momento já foram preparadas no Laboratório de Epitaxia cerca de 400 amostras. Recentemente recebemos complementos para o sistema de MBE, que nos permitirão a confecção de estruturas mais complexas com a deposição de camadas isolantes, metálicas e semicondutoras. Agora dispomos de um sistema versátil, automatizado e competitivo.

EPITAXIA POR FEIXE QUÍMICO (CBE) NO IFGW

MAURO MONTEIRO GARCIA DE CARVALHO

IFGW - LPD - UNICAMP

Um sistema de epitaxia por feixe químico (Chemical Beam Epitaxy) foi instalado no IFGW-UNICAMP. Vários materiais e estruturas têm sido obtidos desde então tais como: InP, GaAs, InGaAs, InGaP, poços quânticos, etc. Neste trabalho discutiremos as razões que nos levaram à escolha do sistema CBE, bem como o problemas relacionados com sua instalação, operação e manutenção. Apresentaremos também um resumo dos resultados mais significativos por nós obtidos até o momento.

Bulk Properties, Quantum Wires and Tunneling (SEM) - 07/06/95

CRESCIMENTO EPITAXIAL DE COMPOSTOS SEMICONDUCTORES IV-VI SOBRE SILÍCIO(111)

C. BOSCHETTI, P. H. O. RAPPL, E. ABRAMOF, I. N. BANDEIRA
 LAS - INPE
 P. MOTISUKE
 IF - UNICAMP

O crescimento epitaxial de compostos semicondutores de gap estreito sobre silício tem sua principal aplicação na fabricação de detectores para o infravermelho termal integrados monoliticamente ao substrato de Si. No entanto, devido às diferenças nas constantes de rede e nos coeficientes de expansão térmica dos materiais envolvidos faz-se necessária a utilização de camadas intermediárias (buffer layers) de fluoretos II-a entre o silício e os compostos IV-VI. Neste trabalho utiliza-se um método de crescimento para a liga semicondutora $Pb_{1-x}Sn_xTe$ sobre Si, denominado Hot Wall Epitaxy - HWE. O sistema de crescimento HWE, projetado e construído no INPE, é capaz também de crescer epitaxialmente, sem quebra de vácuo, camadas intermediárias de CaF_2 e BaF_2 . As camadas epitaxiais são caracterizadas estruturalmente através de difração de raios-x normal e de alta resolução e, eletricamente, através de medidas de efeito hall dependente com a temperatura. A partir destas camadas foram construídos detectores de infravermelho de PbTe ($\lambda=6\mu m$) tanto de junção p-n como de barreira Schottky, com figuras de mérito comparáveis aos limites teóricos.

UTILIZAÇÃO DE TÉCNICAS DE ESPALHAMENTO RAMAN E REFLETIVIDADE MODULADA NA CARACTERIZAÇÃO DE MATERIAIS II-VI CRESCIDOS POR MBE

A. ABDALA-RIBEIRO, M. A. ARAÚJO SILVA, F. CERDEIRA

Instituto de Física "Gleb Wataghin", UNICAMP

ISAAC HERNANDES-CALDERON

CIMVESTAV-México DF, México

O. BRAFMAN*

Instituto de Física "Gleb Wataghin", UNICAMP

OSWALDO DE MELO

Facultad de Física de la Universidad de la Habana, Cuba

Utilizamos técnicas de Espalhamento Raman e refletividade modulada para caracterizar estruturalmente amostras de materiais II-VI crescidos por MBE sobre substratos de GaAs(100). As amostras consistem de: (i) Uma camada buffer de ZnSe(i) de $1,06 \mu m$ de espessura (amostra A); (ii) Uma camada de ZnSe(n) de

$1,97 \mu m$ de espessura, crescida sobre o buffer anterior (amostra B) e, (iii) Um poço quântico duplo de 50 \AA de $Cd_{0,25}Zn_{0,75}Se$ separados por uma barreira de 20 \AA de ZnSe. O espectro Raman das amostras está dominado pelos picos originados dos phonons LO das camadas de ZnSe e do substrato de GaAs. A aparição de um pico devido ao phonon TO do ZnSe, normalmente proibido em retroespalhamento de uma superfície (100), indica uma degradação da qualidade cristalina da amostra. Utilizando este critério verificamos que a qualidade cristalina aumenta na progressão A,B e C das nossas amostras, sendo o poço duplo (C) aquela de melhor cristalinidade. Os espectros de refletividade modulada na região das transições ópticas E_0 mostram evidências de confinamento quântico e acoplamento entre os estados ligados em cada poço para a amostra C. Neste sentido as medidas confirmam a qualidade cristalina da amostra, assim como permitem estimar a largura média dos poços e a rugosidade de pequena escala presente na interface CdZnSe/ZnSe.

* endereço permanente: Technion, Haifa, Israel

Dinâmica Ultrarápida do Spectral Hole-Burning em Vidros Dopados com Quantum-Dots de CdTe.

RICARDO ENRIQUE MAROTTI
 UNICAMP

SÉRGIO TSUDA

AT&T Bell Laboratories Holmdel

CARLOS H. DE BRITO CRUZ
 UNICAMP

Neste trabalho estudam-se os resultados de espectroscopia diferencial de transmissão resolvida em tempos de femtossegundos para vidros dopados com quantum-dots de CdTe. Os dados experimentais obtidos no nosso laboratório, mediante a técnica de excitação e prova, apresentam uma alteração da absorção da amostra em toda a região do espectro do prova ($\approx 200 \text{ meV}$ no visível). Uma característica deste "bleaching" é o deslocamento para o infravermelho, em relação à excitação, ao aumentar o atraso relativo do pulso de prova respeito ao de bombeio, nos primeiros instantes após a excitação. De acordo com as condições do experimento, isto poderia indicar uma relaxação ultra-rápida intrabanda dos portadores em cada ponto quântico. Com o fim de verificar esta afirmação modelamos a evolução dos espectros diferenciais de transmissão. Para isto supusemos que devido ao confinamento quântico cada ponto quântico consta de estados discretos para elétrons e para buracos, estando as transições ópticas correspondentes alargadas inhomogeneamente pela distribuição de tamanhos deles em cada amostra. Por meio de equações de taxa estuda-se a evolução das populações destes estados e a sua influência no espectro de absorção.

**SUBBANDS, EXCHANGE AND
CORRELATION EFFECTS ON
COLLECTIVE EXCITATIONS IN
PARABOLIC QUANTUM WELL WIRES**

ANTONIO NEWTON BORGES

*Universidade Federal de Goiás e Universidade Católica de
Goiás, CEP 74901-970 - Goiânia - GO - BRASIL*

OSCAR HIPÓLITO

*Dep. Física e Ciência dos Materiais - IFQSC - USP
C.P. 369*

13560-970 - SÃO CARLOS - SP - BRASIL

SALVIANO A. LEÃO

*Dep. Física e Ciência dos Materiais - IFSC - USP, C.P.
369, 13560-970 - SÃO CARLOS - SP - BRASIL*

The plasmon collective excitations in quasi-one-dimensional quantum-well wires are calculated in the case of many occupied subbands by using the self-consistent-field approximation theory proposed by Singwi, Tosi, Land and Sjölander (STLS). Quantities such as the effective potential, structure factor, pair-correlation function and the dispersion relations are presented in graphical form as a function of the energy differences between subbands and the electronic density. The results from the random-phase approximation (RPA) are also presented for comparison and sizable deviation from STLS is found. We find that exchange and correlation effects may be quantitatively significant for quasi-one-dimensional electron gas with parabolic confinement potential. In the case that more than one subband is occupied, we find an additional plasmon like intersubband modes.

**FOTOLUMINISCÊNCIA BAIXO
CONDIÇÕES DE EXCITAÇÃO DE
ESTADO ESTACIONÁRIO, TEMPO DE
VIDA RADIOATIVO, QUASI NÍVEIS DE
FERMI E DENSIDADE DE PORTADORES
EN FIOS QUÂNTICOS DE GaAs-(Ga,Al)As**

SERVIO TULLIO PÉREZ MERCHANCANO, LUIZ

OLIVEIRA

UNICAMP

Neste trabalho, é feito o cálculo da densidade de para elétrons e buracos, quasi níveis de Fermi e tempo de recombinação elétron-buraco para fios quânticos (QWW's) de GaAs-(Ga,Al)As em condições de equilíbrio. Este cálculo é feito como função da intensidade do laser, temperatura, raio do fio e a distribuição de aceitadores no fio. Aqui consideramos a recombinação radiativa de elétrons com buracos livres e com buracos ligados em aceitadores. Nestes cálculos não tem parâmetros livres e estão em concordância no regime de intensidade intermediária do laser a $T = 300$ K, 155 K e 2 K com os resultados obtidos por Oliveira e M. de Dios-Leyva (Phys. Rev. B 48, 15092 (1993)), que obtiveram a dependência da intensidade do laser e a densidade de portadores em poços

quânticos (QW'S) de GaAs-(Ga,Al)As baixo condições de estado estacionário e CW para a fotoluminescência (PL) por meio de um cálculo mecânico quântico.

**CÁLCULO AUTOCONSISTENTE DE
PROPRIEDADES ELETRÔNICAS E DE
TRANSPORTE DE FIOS QUÂNTICOS**

SALVIANO A. LEÃO

*Departamento de Física e Ciência dos Materiais, Instituto
de Física e Química de São Carlos, Universidade de São
Paulo*

MARCOS H. DEGANI

*Departamento de Física e Ciência dos Materiais, Instituto
de Física e Química de São Carlos, Universidade de São
Paulo,*

O modelo que estamos estudando é constituído por um gás de elétrons bidimensional, formado na interface de uma camada de $Al_{1-x}Ga_xAs$ com uma camada de GaAs, sobre o qual temos uma estrutura periódica de "gates". Aplicando-se uma voltagem negativa sobre os "gates" teremos a formação de fios quânticos nas regiões entre os "gates". Em nosso modelo teórico estamos considerando que temos uma distribuição residual de impurezas aceitadoras distribuídas uniformemente pelo sistema e que as impurezas doadoras também estão distribuídas uniformemente em uma camada da ordem de 300 Å. Usamos a aproximação devido a Hartree, a qual considera a função de onda do sistema como o produto das funções de onda de um corpo. Nesta aproximação, as funções de onda satisfazem a equação de Schrodinger de um corpo, na presença de um potencial efetivo, interpretado como um potencial médio devido a todas as outras partículas, o qual é obtido resolvendo-se a equação de Poisson. Usamos a aproximação de massa efetiva e desprezamos os efeitos de não parabolicidade. O nosso modelo autoconsistente, consiste em resolvermos as equações bidimensionais de Schrodinger e Poisson acoplada. Para resolvermos a equação de Schrodinger usamos a técnica do "Split Operator". Exploramos o fato do sistema ser periódico em uma direção para facilitar a simulação, já que esta periodicidade nos permite usar o algoritmo da "Fast Fourier Transform". Este modelo nos permite estudar outros sistemas unidimensionais com outros potenciais de confinamento, e ainda com outras formas geométricas, como por exemplo fios quânticos cilíndricos, retangulares, etc. Estamos investigando a influência de alguns parâmetros, tais como a densidade de doadores, temperatura, largura entre os "gates", largura dos gates, potencial aplicado aos "gates", etc, nas propriedades eletrônicas e de transporte deste sistema.

**EPITAXIAL GROWTH OF GaN ON
Si-TERMINATED SiC(100): A TOTAL
ENERGY STUDY**

L. K. TELES, L. M. R. SCOLFARO, R. ENDERLEIN,
J. R. LEITE

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

A. JOSIEK

Université de Bordeaux I

D. SCHIKORA

Optoelektronik, Universität - GH Paderborn

Recently, GaN, commonly known in its wurtzite structure, has been successfully grown in the cubic form on various substrates, among them on SiC for which the lattice mismatch is lower than 4%. We have performed self-consistent tight-binding total energy calculations to study the deposition of a few layers of GaN on Si-terminated SiC(100). To do this, the slab method has been used. The semi-infinite SiC substrate and the deposited layers were represented as a 2×2 SiC supercell of 9-layers plus a few layers containing Ga and N atoms. We calculated the total energy of a number of such structures with different Ga/N composition and different surface reconstructions. For each structure, the first (surface) layer has been completely relaxed in order to minimize the total energy. It comes out that the first deposited layer is preferentially N, exhibiting 2×1 or $c(2 \times 2)$ reconstruction (provided that N is available for growth). A certain intermixing with half the underlying Si layer would decrease slightly the total energy. If 2 layers are deposited, these should be 2 N ones. Then, in the most stable structure, the first (surface) layer is N showing 1×1 relaxation, the second Si (from the substrate) and the third N again (the fourth layer, which we did not include in the intermixing, being C from the SiC substrate). After this, the growth will continue with alternative deposition of Ga and N layers. If the N layer just above the C layer is frozen then the N surfaces exhibit 1×1 relaxation, and the Ga surfaces 2×1 or $c(2 \times 2)$ reconstruction (symmetric dimers). On the other hand, if the N atoms above the C layer are allowed to "go outside", the Si layer would "come back" on the C layer and GaN would grow on the Si layer starting with a N layer. In this case, the N surfaces show 2×1 or $c(2 \times 2)$ reconstruction with symmetric dimers and full dangling bonds, and the Ga surfaces 2×1 , 2×2 or $c(2 \times 2)$ symmetry with asymmetric dimer and half full and half empty dangling bonds. The formation of π bonds on these Ga surfaces is energetically not favorable, since the buckling of the dimers lowers the energy level of the full dangling bonds.

**PROPRIEDADES ELETRÔNICAS E
ESTRUTURAIS DO NITROGÊNIO EM
GERMÂNIO AMORFO**

PEDRO PAULO DE MELLO VENEZUELA, ADALBERTO
FAZZIO

Instituto de Física da USP

Neste trabalho estudamos as propriedades eletrônicas e estruturais de uma das impurezas mais importantes na dopagem de germânio amorfo (a-Ge), o Nitrogênio. Para o estudo de um material desordenado é necessário, em um estágio inicial, que se tenha um modelo confiável para a estrutura atômica deste material. Para a determinação deste modelo utilizamos um processo de Monte Carlo no ensemble NPT onde as interações entre os átomos são feitas através dos potenciais interatômicos desenvolvidos por Tersoff. A partir daí determinamos a estrutura eletrônica do material através de métodos convencionais de mecânica quântica. Utilizamos a Teoria do Funcional Densidade na Aproximação da Densidade Local (LDA) além de pseudopotenciais de primeiros princípios. Para determinar as estruturas modelo para o a-Ge, partimos de uma temperatura acima do ponto de fusão e diminuímos a temperatura gradualmente até a temperatura ambiente. Após este procedimento incluímos o átomo de N na célula e determinamos através do cálculo a LDA estrutura eletrônica e configuracional deste defeito.

**EFEITOS DE INTERFACES NAS
RESSONÂNCIAS DE CAMPO ELÉTRICO
INTENSO EM BARREIRAS SIMPLES
GaAs/Al_xGa_{1-x}As NÃO-ABRUPTAS**

M. CONSUELO A. LIMA

UFMA

GIL A. FARIAS, VALDER N. FREIRE

UFC

Ressonâncias produzidas por campos elétricos intensos ocorrem no coeficiente de transmissão de uma barreira simples GaAs/Al_xGa_{1-x}As não-abrupta como consequência dos auto-estados de um pseudo poço quântico triangular formado pelo campo elétrico aplicado. Neste trabalho, a influência de interfaces não-abruptas nestas ressonâncias é estudada. O potencial e a massa efetiva dos portadores na interface é obtida com base na hipótese de uma variação linear da fração molar de alumínio nesta região. Resultados numéricos são obtidos pela solução da equação de Schroedinger que possui um operador energia cinética dependente da posição. A existência de interfaces não-abruptas faz decrescer fortemente o número de ressonâncias. As ressonâncias são consideravelmente suavizadas quando larguras interfaciais tão pequenas quanto dois parâmetros de rede do GaAs são consideradas. Várias ressonâncias no coeficiente de transmissão de uma barreira de 200 Å com altura de 240 meV podem mesmo desaparecer se larguras interfaciais de quatro parâmetros de rede do GaAs são consideradas. Demonstra-se que efeitos de interfaces são mais importantes para buracos pesados do que para elétrons como consequência da maior massa do buraco.

**SÃO HETERO-INTERFACES
SEMICONDUCTORAS ABRUPTAS
ABSOLUTAMENTE NECESSÁRIAS?**

JOÃO MILTON PEREIRA JÚNIOR, GIL DE AQUINO
FARIAS, VALDER NOGUEIRA FREIRE
Universidade Federal do Ceará

Resultados experimentais recentes mostram que interfaces de hetero-estruturas semicondutoras são não-abruptas, e suas larguras se estendem pelo menos por dois parâmetros da rede cristalina nos melhores casos. No entanto, um estudo da influência do tipo de interface nas propriedades de hetero-estruturas abruptas ainda não foi realizado. Através da generalização do modelo de Freire *et al.* [Superlattices and Microstructures 1, 17 (1992)], obtêm-se neste trabalho os potenciais e as massas interfaciais dos portadores associadas a cinco padrões distintos de variação da fração molar de alumínio em hetero-estruturas de GaAs/Al_xGa_{1-x}As representativos dos que possivelmente são obtidos por diferentes técnicas de crescimento. Eles são utilizados para o cálculo de propriedades de transmissão em barreiras simples e duplas, e níveis de energia em poços GaAs/Al_xGa_{1-x}As com interfaces não-abruptas, todas caracterizadas por um dos cinco padrões interfaciais. A partir do cálculo numérico das propriedades de transmissão e dos níveis de energia, é possível concluir que, dependendo do tipo de interface, hetero-estruturas não-abruptas podem apresentar propriedades semelhantes aos das hetero-estruturas abruptas, mesmo para larguras interfaciais da ordem de quatro parâmetros da rede cristalina.

**Dupla Barreira Em Um Anel Mesoscópico:
Efeito Bohm-Aharonov Chaveado Por
Tunelamento Ressonante.**

JOSÉ WEBERSZPIL, ENRIQUE V. ANDA
UFF

Calculamos a corrente balística em um anel mesoscópico ligado a dois contatos, como função do fluxo magnético externo atravessando o anel, e do nível de Fermi. O sistema é representado por um Hamiltoniano de ligações fortes e foi tratado via o formalismo das funções de Green de não equilíbrio (formalismo de Keldysh) usando a técnica da renormalização no espaço real. Numa segunda etapa incluiu-se uma heteroestrutura de dupla barreira em um dos ramos do anel. Observou-se para o primeiro sistema, o efeito Bohm-Aharonov, manifestado como oscilações da condutância balística em função do campo magnético. Para o segundo sistema observou-se o fenômeno do tunelamento ressonante e o chaveamento das oscilações da corrente como função do fluxo magnético e do potencial de porta aplicado no poço entre as barreiras.

**RELAXAÇÃO DE DIPOLOS INDUZIDA
POR LUZ EM Al_xGa_{1-x}As DO TIPO n**

LIGIA DE OLIVEIRA, LUIS VICENTE DE ANDRADE
SCALVI
Depto. Física, UNESP-Bauru
MAXIMO SIU LI

DFCM - Instituto de Física de São Carlos, USP

Experimentos de Corrente de Despolarização Termicamente Estimulada (CDTE) em conjunção com luz monocromática são aplicados pela primeira vez para Al_xGa_{1-x}As. Evidências de que dipolos elétricos estão presentes nestas ligas foram obtidas anteriormente tanto para amostra de gap direto como indireto^{1,2}. Apresentamos aqui resultados da relaxação das bandas de CDTE induzida por luz e o comportamento é completamente distinto dependendo do comprimento de onda. Linhas do laser de Ar⁺ (488 nm) ou Kr⁺ (647 nm) destroem completamente as bandas de CDTE obtidas no escuro. Como consequência disso, as bandas podem ser associadas com a presença de dipolos do tipo DX⁻-d⁺. Iluminação com luz de energia limite para a fotoionização do centro DX, ≈0.8 eV, leva a um surpreendente deslocamento do pico de corrente. Tal resultado sugere um modelo no qual os dipolos advindos da presença de vacâncias de As carregadas negativamente são também importantes no processo de polarização e relaxação dipolar. Apoio CNPq, FAPESP.
[1] - L.V.A. Scalvi, L. Oliveira, E. Minami, M. Siu Li, Appl. Phys. Lett. 63, 2658 (1993)
[2] - L.V.A. Scalvi, L. Oliveira, M. Siu Li, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 325, 285 (1994)

**Resonant tunneling on double-barrier
heterostructures: impurity effects**

ANDREIA DE FARIA NOGUEIRA, ANDRÉA LATGÉ
*Departamento de Física, Universidade Federal Fluminense,
Niterói-RJ*

The resonant tunneling phenomenon in GaAs-GaAlAs double-barrier single-quantum well heterostructures is studied with use of a simple one-orbital tight binding Hamiltonian and by applying the non-equilibrium Keldysh Green's function formalism. The effects of an isolated impurity at the well (in the case of a one- and three-dimensional treatment) and a layer of impurities (in the three-dimensional case) on electronic and transport properties are investigated. Local and total density of states for systems with different geometrical characteristics (width and length of the barriers) and distinct impurity distributions are calculated and the mean features are compared to the results of a non-doped system. Concerning to transport properties, the effects of impurity states on the current - voltage characteristic curve are derived and the results evidenciate the possibility of intentional changing on the response of double-barrier heterostructures to electric applied

fields. Recent experimental data of *GaAs-GaAlAs* resonant tunneling diode reported sharp peaks in the low temperature characteristic curve and were attributed to resonant tunneling through bound states of single donor atoms at the heterostructures.

Fabrication and Characterization of Si Dioxide/Microcrystalline-Silicon/Si Dioxide Tunneling Diodes

JONDER MORAIS
IFGW - Unicamp

AMANDA M. BOWHILL, RAPHAEL TSU
University of North Carolina at Charlotte

We report progress in the development of silicon resonant tunneling diodes- multilevel logic devices exploiting quantum effects and integrable with current silicon processing technology. The quantum confinement is provided by silicon microcrystallites surrounded by amorphous silicon dioxide double barriers. An ultra-high vacuum silicon thermal evaporation system is constructed for the purpose of controlling the microcrystalline silicon particle size. The quantum confinement effects are demonstrated by the electrical and optical properties of the tunneling diodes produced. Financial support : CAPES, CNPq, ARO and ONR.

Superlattices and Small Quantum Systems (SEM) - 08/06/95

Spectroscopy of Atomic-scale roughness in the ultrathin-layer *GaAs/AlAs* superlattices

YURI A. PUSEP, SEBASTIÃO WILLIAM DA SILVA,
JOSÉ CLAUDIO GALZERANI
UFSCar - Depto. de Física, C.P. 676, 13565-905, São Carlos

DIMITRII I. LUBYSHEV, PIERRE BASMAJI
IFQSC-USP, 13560-970, São Carlos

A new interpretation of the Raman spectra of *GaAs/AlAs* ultrathin-layer superlattices based on the microscopic analysis of the optical vibrational modes has been reported in this paper. Due to the difference between normal and inverted interfaces caused by the different segregation of Ga and Al atoms, the confined optical modes lose their symmetry with respect to the central plane of the layer to which they belong and therefore can no longer be considered as even or odd ones. All the optical vibrational modes, independently of their quantum index, are now active in Raman scattering. In this case the macroscopic polarization of the corresponding mode is responsible for the intensity of the Raman scattering while the selection rules which are valid for SL with ideal interfaces can no longer be applied.

CONFINEMENT AND STRAIN EFFECTS ON ZNSE/ZNSETE SUPERLATTICES

DELANO VALDIVINO SANTOS BATISTA, MARIA JOSÉ SANTOS POMPEU BRASIL
UNICAMP
MARIA C. TAMARGO
City College of New York

Wide band-gap II-VI heterostructures are of major technological and scientific interest because of the possibility of fabricating optical devices acting on the blue-green region. We investigated the optical properties of these heterostructures, specifically ZnSe / ZnSe_{1-x}Te_x strained superlattices grown by molecular beam epitaxy. Our set of samples comprises different compositions for the ternary layer, including the binary ZnTe. We present the results of photoluminescence as a function of the temperature and the excitation energy. We discuss the origin of the observed emissions and the effective confinement of the carriers based on the results of a simple model for our heterostructures. We also present the results of Raman scattering measurements. We observed a significant increase of second-order related peaks when the thickness of the individual layers approach the critical thickness. We discuss the vibrational excitations of the superlattices considering confinement and strain effects.

BAND STRUCTURE OF p- δ -DOPING STRUCTURES IN GaAs

G. M. SIPAHI, R. ENDERLEIN, L. M. R. SCOLFARO,
J. R. LEITE
Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Single and multiple δ -doping structures from various III-V compound semiconductors are now available, both of n- and p-type. The scope of the present paper is to report on self-consistent band structure calculations for p-type δ -doping structures in GaAs, including superlattices and isolated quantum-wells. Our method is based on the 4x4 Kohn-Luttinger Hamiltonian as the kinetic energy operator of the holes. We use plane waves for the representation of the total Hamiltonian because they are its natural basis set. The hole-hole interaction is taken into account self-consistently. For the exchange-correlation we take the matrix form suggested by Combescot and Nozières, but with the parametrization according to Perdew and Zunger. The self-consistent charge density calculation includes a k-summation upon the first Brillouin Zone. Due to the metallic character of our system, this cannot be done by using special points only, the k-sum has to be taken rigorously. This increases the computation time appreciably. The approximate analytical treatment of the k-sum in [1] introduces an uncontrollable error which we avoid.

As a result of our calculations we present miniband and subband dispersions, charge and potential profile, wave functions and Fermi level positions for a variety of p- δ -doping structures. From these results one notices pronounced differences between the electronic structure of p- and n- δ -doping systems. The depth of the wells are much smaller in the p- δ -doping case, because of the heavier masses of holes which result in a stronger localization and more effective screening of the ionized acceptors. The higher density of states, which is also due to the heavier hole masses, is responsible for the partial filling of the two lowest subbands only.

[1] Reboredo, F. A. and Proetto, C. R., Phys. Rev. B 47, 4655 (1993)

ANISOTROPIA NA REFLETIVIDADE MODULADA NOS PONTOS CRÍTICOS E_0 E E_1 EM SUPERREDES DE FIOS QUÂNTICOS DE GaAs/AlAs.

IVALDO RIBEIRO, FERNANDO CERDEIRA
*Instituto de Física "Gleb Wataghin", UNICAMP,
 13083-970 Campinas, SP, Brasil*
 ANDRÉS CANTARERO
*Departamento de Física Aplicada, Universidade de
 Valência, Burjassot, E-46100 Valência, Espanha*

Realizamos experiências de refletividade modulada com luz polarizada em uma série de quatro superredes de fios quânticos de GaAs/AlAs. As amostras foram crescidas por MBE sobre substratos de GaAs (311)A e o processo epitaxial foi tal que as interfaces cresceram corrugadas. Comparando-se os espectros de cada amostra obtidos com luz de prova polarizada perpendicular e paralelamente aos fios, observa-se claramente uma anisotropia nas intensidades relativas das transições de buracos pesado, leve e split-off. Esta anisotropia acentua-se à medida que o período das superredes diminui. Na região das transições ópticas relacionadas com os pontos críticos E_1 e $E_1 + \Delta_1$ um comportamento semelhante é verificado, seguindo a mesma tendência com a diminuição do período das amostras. Tais anisotropias, não sendo encontradas em estruturas não-corrugadas crescidas na direção (311), sugerem que a presença de fios quânticos nas amostras é devida à corrugação, característica que se torna mais clara à medida que o período das superredes diminui.

INTERFERÊNCIA QUÂNTICA ENTRE MODOS VIBRACIONAIS E EXCITAÇÕES ELETRÔNICAS EM SUPER REDES δ DOPADAS

MARIA JOSÉ VALENZUELA BELL
IFGW - UNICAMP
 LUIS ANTÔNIO DE OLIVEIRA NUNES, LIDÉRIO IORIATTI JR

Instituto de Física de São Carlos - DFI - USP

Em super redes obtidas pela incorporação abrupta e periódica de dopantes do tipo n (Si) em GaAs, a estrutura eletrônica 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 energia com a linha discreta associada ao fônon LO do material hospedeiro. A interação de Fröhlich entre essas excitações dá origem a modos acoplados, ou seja, fônons LO vestidos por um contínuo de excitações eletrônicas. Excitações desse tipo foram por nós previstas existir e posteriormente verificadas experimentalmente através de espectroscopia Raman ressonante na geometria de retro-espalhamento. Neste caso, a excitação acoplada é manifestada através de bandas fortemente assimétricas do tipo Fano, resultantes da interferência quântica entre as amplitudes de espalhamento raman eletrônico e aquelas associadas ao mecanismo Raman vibracional. Formas de linha do espalhamento Raman foram investigadas em circunstâncias onde a amplitude Raman do contínuo eletrônico é mantida fixa, enquanto que a amplitude Raman associada ao mecanismo vibracional é continuamente variada através da simples rotação da amostra em relação à polarização da luz incidente e espalhada. A correlação entre teoria e experimento tem se mostrado boa considerando a não existência de parâmetros ajustáveis associados aos cálculos teóricos. A recente observação experimental da anti-ressonância que caracteriza a ressonância de Fano é mais uma evidência da validade da teoria.

Light Emission in Si-Interface Adsorbed Gas Superlattices

JONDER MORAIS
IFGW - Unicamp
 RAPHAEL TSU

University of North Carolina at Charlotte

We present experimental results of a new type of heterostructure called Si-IAG superlattices (Si-Interface Gas Adsorbed Superlattices), consisting of alternated layers of deposited silicon and monolayers of adsorbed gases (oxygen and hydrogen). Raman Scattering (RS) and Photoluminescence (PL) measurements are used in this paper to investigate the quantum confinement effects on the Sinanoparticles and correlate with the luminescence observed. We find that the Si Raman peak presents a red shift and a broadening for samples that show strong light emission. This emission is in the range of 1.7 eV to 2.3 eV and we also observe that the hydrogen passivation plays a very important role in the light emission.

Financial support : CAPES, CNPq, ARO and ONR.

Dominant role of correlation in the optical emission from small Si particles.

R. J. BAIERLE, M. J. CALDAS, C. W. RODRIGUES
IFUSP

E. MOLINARI, S. OSSICINI
Univ. di Modena - Itália

Room temperature visible luminescence in porous silicon shows a large blue shift as compared to the weak emission of bulk Si, which has been interpreted as due to quantum confinement. While crystallites seem to be favored over wires in the debate on the dimensionality of the confined region, the discussion on their size is still open and involves both theory and experiment: a direct measure of the crystallite size is not easily available, and theoretical results relating the Si particle size to the expected optical transitions show a very large spread. Recent observations indicate that the luminescent structures may be considerably smaller than most of the earlier theoretical predictions for crystallites.

We calculate the structural and optical properties of small hydrogenated Si clusters, containing from 5 to 44 Si atoms. Our approach is designed to treat consistently small molecules and bulk crystals, as it incorporates correlation (which depends critically on size) through a Configuration Interaction scheme. We adopt the Hartree-Fock method in the self-consistent Neglect of Differential Orbital (NDO) approximation. Specifically, we adopt the MNDO-AM1 hamiltonian (Modified NDO) when studying geometries, and the INDO hamiltonian (Intermediate NDO) for optical spectra. Both methods are thoroughly reparametrized for Si. To do that, we developed a Bloch-periodic version of MNDO, in the case of INDO we simulate the bulk crystal by large clusters terminated with Si pseudoatoms.

We find that, when correlation is properly included, even small clusters of ~ 50 Si atoms can be active in the visible range ($h\nu \sim 1.6 - 1.9$ eV). In agreement with previous theoretical work, this activity is associated with the "crystalline" silicon in the core of the cluster, thus confirming the role of quantum confinement as generating the visible emission.

Níveis de Energia em Pontos Quânticos de Semicondutores

C. R. M. DE OLIVEIRA, A. M. DE PAULA, L. C. BARBOSA, C. L. CESAR

Unicamp

Efeitos de confinamento em pontos quânticos de semicondutores tem sido objeto de vários estudos teóricos e experimentais. A maioria dos resultados experimentais foram obtidos em amostras de nanocristais em vidros dopados com semicondutores II-VI, especialmente CdTe, CdSe e CdS. Espectros de absorção óptica, fotoluminescência e fotoluminescência de excitação mostram picos característicos devido aos níveis de energia confinados. Os primeiros estudos teóricos

descrevem estes níveis de energia usando teorias simples de aproximação de massa efetiva. Neste trabalho apresentamos cálculos de níveis de energia e transições ópticas em pontos quânticos usando o modelo de função envelope modificada de Vahala e Sercel [K. J. Vahala e P. C. Sercel, Phys. Rev. Lett. 65, 239 (1990)] baseado na aproximação $k \cdot p$ de Kane. Esses resultados descrevem muito bem os resultados experimentais de fotoluminescência de excitação em nanocristais de CdTe [C. R. M. de Oliveira *et al.*, Appl. Phys. Lett. 66, 439 (1995)]. O modelo simples de aproximação de massa efetiva considerando uma partícula em um potencial esférico infinito não explica todas as transições ópticas observadas. Transições proibidas seriam necessárias para descrever completamente os espectros.

Quantum Wells and Interfaces (SEM) - 08/06/95

THE IMPACT OF INTERFACES IN Ge/Si QUANTUM WELLS ON PHONON AND ELECTRON CONFINEMENT AND ON THE RESONANT RAMAN SPECTRUM

M. A. ARAÚJO SILVA[†], O. BRAFMAN[‡], F. CERDEIRA

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

R. MANOR

Physics Department and Solid State Institute, Technion, Haifa, 32000, Israel

J. C. BEAN

AT&T Bell Laboratories, Murray Hill, New Jersey, 07974, USA

We report the progressive shift in frequency and dramatic broadening of the Ge-Ge Raman line in the Ge₅Si₅/Si multiple quantum wells as the laser photon energy is varied beyond the previously observed resonance value. This phenomenon is shown to depend on the large-scale roughness (terracing) of the interfaces. This is established by a systematic study of the various lines in the Raman spectrum of these structures. First, the dependence of the lineshape of the Ge-Si line on the multiplicity of the quantum wells in each structure suggests terracing and also indicates that these terraces size distribution in the direction of growth becomes wider as the number of QW's increases. Next, the dependence of the lineshape and position of the Ge-Ge line on this multiplicity, studied at photon energies below resonance, establish that these vibrations do not penetrate into the Si barriers. With these facts in mind, the behavior of the Ge-Ge vibration

around resonance can be understood. The terraces define a distribution in well-widths which, in turn, determine the confinement of electronic states and thereby of the resonant energies. Varying the laser photon energy, wells of different widths enter into resonance selectively enhancing the contributions from the phonons confined within those wells. Thus, as laser frequency increases lower frequency LO-phonon contributions are enhanced, which explains both the shift and broadening of the LO-phonon line as the laser photon energy increases.

†On leave from Dep. de Física, UFCE, 60445-760, Fortaleza, Ceará, Brazil. ‡On leave from Physics Department and Solid State Institute, Technion, Haifa, 32000, Israel.

Photoluminescence line shape analysis of $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}/\text{GaAs}$ δ -doped quantum wells

A. TABATA, A. MARTI CESCHIN, L. M. R. SCOLFARO, A. A. QUIVY, E. C. F. DA SILVA, R. ENDERLEIN, J. R. LEITE

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 20216, 01498 São Paulo, S.P. Brazil

J. B. B. DE OLIVEIRA, E. LAURETO, E. A. MENESES

Instituto de Física, Universidade de Campinas, Caixa Postal 6165, 13081 Campinas, S.P. Brazil.

We have performed low temperature photoluminescence experiments in 60 Å and 100 Å $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$ δ -doped quantum wells (δ -QW) with different doping levels, in order to study the optical properties of this particular selective doped heterostructure. Due to hole localization mechanism, optical transitions involving electrons from the bottom of the first conduction subband up to the Fermi level with photogenerated holes have been clearly observed. To better understand the radiative recombination mechanisms behind our experimental luminescence spectra, a rigorous theoretical line shape analysis was done. We have to take into account in our calculations, momentum conserving transitions between extended electron and hole states, momentum non-conserving transitions between extended states as well as momentum-conserving transitions to localized hole states. Normally the low energy side of a PL spectrum is associated to the quality/abruptness of the interface and/or impurity on the well. We will discuss, this broadening in terms of degradation of the interface by the introduction of the δ -doping and/or by the introduction of other kinds of broadening mechanisms, especially impurity scattering. To better understand these broadenings we have studied asymmetric δ -QW, it means, the δ -doping is placed nearer one of the interfaces than the other. This, just to break the symmetry of the problem and lift some selection rules.

EFEITOS DE NÃO-PARABOLICIDADE NAS TAXAS DE TRANSIÇÃO DEVIDO A FÔNONS CONFINADOS EM POÇOS QUÂNTICOS

AUGUSTO M. ALCALDE, GERALD WEBER

Unicamp

Calculamos taxas de transição intrasub-banda e intersub-banda em poços quânticos de GaAs-AlGaAs devido a emissão de fônons confinados levando em consideração o efeito de não-parabolicidade das bandas de condução. Partimos de uma dispersão do tipo $E = (\hbar^2 k^2 / 2m^*) (1 - \gamma k^2)$ e obtemos uma nova expressão para as taxas de transição. Utilizamos um modelo simples proposto por Nag e Mukhopadhyay [Phys. Stat. Sol. (b), **175**, 103 (1993)], que permite deixar as integrais de superposição inalteradas quando comparados com o caso parabólico. Para a descrição dos fônons confinados utilizamos o *slab model* corrigido [Weber, Phys. Rev. B, **46**, 16171 (1992)]. As taxas de transição assim obtidas mostram um aumento para todas as transições quando comparadas com o caso de bandas parabólicas. O efeito se torna mais pronunciado à medida que estados mais altos em energia são envolvidos. Nossos resultados indicam que os efeitos de não-parabolicidade são importantes até mesmo para poços quânticos de GaAs-AlGaAs e para processos envolvendo estados mais altos como no caso de processos de captura.

ANÁLISE DE TENSÕES EM $\text{CaF}_2/\text{Si}(111)$ POR DIFRAÇÃO DE RAIO-X DE ALTA RESOLUÇÃO

E. ABRAMOF, P. H. O. RAPPL, C. BOSCHETTI, I. N. BANDEIRA

LAS - INPE

P. MOTISUKE, M. A. HAYASHI, L. P. CARDOSO
IF - UNICAMP

Fluoretos II-a (como BaF_2 e CaF_2) têm sido usados como camadas "buffer" entre compostos IV-VI e substrato de silício visando a fabricação de sensores infravermelhos integrados monoliticamente ao Si. Com o objetivo de otimizar o crescimento desta estrutura, as propriedades das tensões e deformações no sistema CaF_2/Si devem ser bem entendidas. Para tanto camadas de CaF_2 foram evaporadas sobre $\text{Si}(111)$ a partir de uma célula de efusão com cadinhos de grafite em uma câmara de vácuo (10^{-7} mbar). Medidas de difração de raio-x foram feitas usando um difratômetro de dois cristais (monocromador de GaAs e radiação $\text{CuK}\alpha$) com uma resolução final de 17 arcos de segundo. Fazendo-se uma varredura ω , o pico de Bragg $\text{CaF}_2(333)$ aparece como um ombro perto do pico

Si(333). Este resultado não pode ser explicado com um simples modelo de crescimento pseudomórfico visto que neste caso uma deformação compressiva no plano do CaF_2 é esperada devido à sua maior constante de rede (5.46\AA) em relação a do Si (5.43\AA). A deformação de estiramento no plano da camada de CaF_2 só pode ser explicada se a diferença nos coeficientes de expansão térmica entre o CaF_2 ($19.2 \times 10^{-6} K^{-1}$) e o Si ($2.6 \times 10^{-6} K^{-1}$) forem considerados. No modelo proposto supõe-se que a camada de CaF_2 está completamente relaxada na temperatura de crescimento através da formação de defeitos na interface. Durante o resfriamento para a temperatura ambiente aparece uma deformação de estiramento causada pela diferença de dilatação térmica entre os dois materiais. Assumindo não haver rearranjo atômico durante o resfriamento, a máxima deformação de estiramento é 1.7%. A relação entre a deformação perpendicular e paralela pode ser calculada pela teoria elástica para cristais cúbicos na direção (111) assumindo distorção tetragonal. Para ajustar a posição do pico medido de CaF_2 (333) é necessário um grau de relaxação de 75% da deformação térmica durante o resfriamento.

Photoreflectance investigations of semiconductor device structures

J. A. N. T. SOARES, R. ENDERLEIN, J. R. LEITE
LNMS - Laboratório de Novos Materiais Semicondutores.
Instituto de Física da Universidade de São Paulo.
M. SAITO

LME - Laboratório de Microeletrônica. Escola Politécnica
de Engenharia da Universidade de São Paulo.

Photoreflectance (PR) spectroscopy represents a powerful tool for the investigation of the electronic states and other characteristic properties of semiconductor heterostructures. The application of PR to heterostructure devices has been of limited use so far, due to the difficulties to understand their PR spectra. Within each layer of the heterostructure, weak spatial inhomogeneities of optical constants occur because of the built-in electric fields. Previous approaches for calculating optical reflectance spectra from inhomogeneous heterostructures, which were entirely based on the matrix method, are known to be subject to considerable numerical instabilities, and are too time consuming to be used on line. In a recent paper [1] the authors developed an approach that treats the two kinds of inhomogeneities by different methods, the weak intra-layer inhomogeneities by means of a generalization of the perturbation method developed by Aspnes and Froya for an infinite half space, and the strong inter-layer inhomogeneities by means of the matrix method. Because only one matrix is necessary per layer in our approach, the calculation time is drastically reduced, when compared to previous treatments. This allows us to calculate precise reflectance spectra also for complex

heterostructures. In the present work, the method is applied to GaAs-MESFET structures. Simultaneously, the PR spectra from these structures are measured, using a standard PR setup. By comparing the calculated and experimental spectra, we determine characteristic parameters of the device structures. Owing to its fastness and accuracy, the method can be used as a fitting procedure for on line use.

References

- [1] R. Enderlein, D. Beliaev, J.A.N.T. Soares, L.M.R. Scolfaro, A.M. Ceschin, A.A. Quivy, and J.R. Leite - *Supperlatt. and Microst.*, **15**(3), 339 - 1994.

REDUÇÃO DA ENERGIA ELÁSTICA EM INTERFACES GaAs/InAs ATRAVÉS DA INCLUSÃO DE Te ENTRE OS MATERIAIS: CÁLCULO DE ENERGIA TOTAL.

ROBERTO HIROKI MIWA, ARMANDO CORBANI
FERRAZ
USP
WAGNER N. RODRIGUES, HÉLIO CHACHAM
UFMG

Realizamos, baseados em cálculos de primeiros princípios, dentro do método de dinâmica molecular de Car e Parrinello, um estudo das propriedades estruturais e eletrônicas da interface GaAs/InAs com a inclusão de uma monocamada de Te, na interface. Cálculos baseados dentro da aproximação LDA. Os resultados indicam que a formação de uma interface com meia monocamada ($x_{Te}=0.5$) é energeticamente mais favoráveis que a de uma monocamada ($x_{Te}=1.0$) ou mesmo que a interface com ausência de Te ($x_{Te}=0.0$). A inclusão de Te induz à uma redução da energia elástica devido às relaxações do Te e seus primeiros vizinhos. Esta redução da energia elástica sugere que o Te atua como uma "cola" entre as camadas de GaAs e as de InAs. Através da estrutura de faixas verificamos que o Te dá origem à um estado semi-ocupado na interface.

Quantum Wells and Superlattices (SEM) -
08/06/95

ÉXCITONS EM POÇOS QUÂNTICOS DE AlGaAs/GaAs CRESCIDOS SOBRE SUBSTRATOS (311)A E (311)B DE MAIS ALTOS ÍNDICES CRISTALOGRAFÍCOS

S. L. S. FREIRE, L. A. CURY, F. M. MATINAGA, E. C. VALADARES, M. V. BAETA MOREIRA, A. G. DE OLIVEIRA
UFMG

Poços quânticos semicondutores de AlGaAs/GaAs crescidos simultaneamente por MBE sobre substratos do tipo (311)A e (311)B, de mais altos índices cristalográficos e sobre um substrato convencional do tipo (100) são investigados por fotoluminescência. A estrutura das três amostras crescidas consiste de uma camada *buffer* de $0.8\mu\text{m}$ de GaAs não intencionalmente dopada (nid), uma superrede de 90 períodos (nid) de 22\AA de GaAs e 34\AA de $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$, uma camada (nid) de 1000\AA de $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$, uma camada (nid) de 50\AA de GaAs (poço quântico), uma camada espaçadora (nid) de 200\AA de $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$, uma camada de $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ de 500\AA dopada com Si ($N_{\text{Si}}=2.0 \times 10^{18}\text{cm}^{-3}$) e uma camada tampão de 65\AA . Embora o Si produza apenas camadas epitaxiais dopadas do tipo-n em estruturas crescidas sobre substratos (100), foi demonstrado que em condições idênticas de crescimento o Si se incorpora preferencialmente como aceitador em camadas crescidas sobre substratos (311)A e como doador em camadas crescidas sobre substratos (311)B. O crescimento sobre substratos (311)A possibilita assim a obtenção de estruturas dopadas do tipo-p sem nenhum esforço adicional. Independente do tipo de dopagem, as amostras estudadas apresentaram um mesmo comportamento linear da amplitude dos picos de luminescência em função da potência do laser, demonstrando o forte caráter excitônico das emissões. A energia de ativação térmica e sua correspondência com a energia de ligação dos éxcitons é inferida das curvas de intensidade dos picos de luminescência versus o inverso da temperatura (T), na faixa de $30\text{K} < T < 80\text{K}$.

ESTABILIDADE E ESTRUTURA ELETRÔNICA EM SUPER-REDES (III-V)_n/(IV₂)_n.

DOUGLAS CASAGRANDE, ARMANDO CORBANI
FERRAZ
IFUSP

Estudos teóricos de relaxação atômica e estados eletrônicos foram realizados para super-redes (SRs) ultrafinas com período $n \leq 3$ para os compostos $(\text{GaP})_n/(\text{Ge}_2)_n$, $(\text{GaP})_n/(\text{Si}_2)_n$, $(\text{InP})_n/(\text{Ge}_2)_n$ e $(\text{InP})_n/(\text{Si}_2)_n$ nas direções de crescimento [001] e [110]. Os cálculos foram realizados no formalismo do espaço dos momentos utilizando pseudo-potenciais ab-initio com aproximação local (LDA) para o termo de exchange e correlação. O método utilizado para a relaxação das estruturas é baseado na teoria do Funcional Densidade acoplado à Dinâmica Molecular no esquema proposto por Car e Parrinello. Os resultados obtidos para a entalpia mostram que as estruturas estudadas são instáveis em relação à separação de fase de seus materiais puros. O valor observado de entalpia vai no sentido da metaestabilidade com o aumento do período n do número de camadas de cada

composto, sugerindo que a densidade de ligações não-octais da interface é um dos fatores dominantes na determinação da estabilidade das estruturas. A estrutura de faixas de energia das SRs é investigada apresentando uma tendência semimetálica para a direção de crescimento [001] enquanto na direção [110] é observada uma tendência semicondutora provavelmente devido à não polarização da interface nesta direção proporcionada por uma transferência de carga mais eficiente entre as ligações não-octais.

ENERGIA DE LIGAÇÃO DE ÉXCITONS EM POÇOS QUÂNTICOS DE AlGaAs/GaAs

P. L. GASTELOIS, L. A. CURY, E. C. VALADARES,
M. V. BAETA MOREIRA, A. G. DE OLIVEIRA
UFMG

A dependência do sinal de fotoluminescência com a potência do laser, temperatura e campo magnético, é investigada para um sistema de poço quântico isolado do tipo AlGaAs/GaAs. O caráter excitônico das recombinações elétron-buraco é identificado pela linearidade da curva de intensidade do sinal versus a potência do laser. A redução do sinal de fotoluminescência com o aumento da temperatura, em nossa amostra, apresenta um comportamento similar ao observado para as transições de éxcitons ligados a centros doadores rasos em materiais *bulk*. O modelo que descreve a intensidade do sinal de fotoluminescência no caso de materiais *bulk*, é usado para explicar nossos resultados e permite inferir a energia de ligação de éxcitons em nosso caso de um poço quântico isolado. Medidas preliminares de magneto-fotoluminescência são apresentadas e interpretadas de forma qualitativa.

Cálculo da Forma de Linha de Absorção em Transições Intersubbanda de Poços Quânticos de HgCdTe

C. R. M. DE OLIVEIRA, A. M. DE PAULA, C. L.
CESAR
Unicamp
G. E. MARQUES
UFSCar

Os primeiros estudos de transição intersubbanda foram obtidos por West e Eglash [Appl. Phys. Lett. 46, 1156 (1985)] através de medidas de absorção óptica em poços quânticos de GaAs/AlGaAs dopados. Eles mostraram que a força do oscilador para transições da primeira para a segunda subbanda é da ordem de 12.2, e que este resultado concorda com as estimativas teóricas baseadas em aproximação de massa efetiva. Medidas de absorção intersubbanda fotoinduzida em poços

quânticos de GaAs/AlGaAs não dopados mostraram um aumento na força do oscilador quando comparado com os poços dopados. Este aumento foi atribuído a efeitos excitônicos [M. Olszakier *et al.*, Phys. Rev. Lett. **62**, 2997 (1989)]. Obtivemos resultados experimentais de absorção intersubbanda fotoinduzida em poços quânticos múltiplos de HgCdTe não dopados que mostram uma linha de absorção com um alargamento assimétrico para baixas energias. Estes resultados estão descritos em outros trabalhos. Neste trabalho apresentamos cálculos das energias de transição utilizando o modelo completo $k \cdot p$ de Kane, e mostramos que para simular os resultados experimentais é necessário considerar massas efetivas no plano diferentes para cada subbanda. O alargamento para baixas energia não pode ser explicado através de teorias simples de aproximação de massa efetiva. Obtemos também uma concordância entre a força do oscilador calculada e os resultados experimentais, sem a necessidade de considerar efeitos excitônicos.

SELF-CONSISTENT CALCULATION OF ELECTRONIC BEHAVIOR IN A FINITE SUPERLATTICE WITH A TAMM STATE

JOSÉ EDUARDO MANZOLI

Ciência e Engenharia de Materiais - IFSC, IQSC, EESC - USP

SALVIANO LEÃO, OSCAR HIPÓLITO

IFSC - Instituto de Física de São Carlos - USP

Using self-consistent field approximations in the resolution of Schrödinger equation, by the Split Operator method, together with the Poisson equation and exchange-correlation effects we calculated eigen-energies, eigen-states (and electronic charge densities) and eigen-values for many combinations of parameters in the semiconductor heterostructure described as follows. We propose some quantum wells of GaAs (six or seven) whose width is L_1 , followed by a larger well (width L_2) in such we have a localized state (Tamm state) below the mini-band (formed by the strong coupling of the wells with departure each other by $Al_{.35}Ga_{.65}As$ barriers of width B). This structure has in both sides a doping layer of $Al_{.35}Ga_{.65}As : Si$ with width D_1 and D_2 , and donor densities n_1 and n_2 . This finite superlattice (FSL) is close enough to a Schottky contact for voltages applications (V_g). We have made calculations for many combinations of the parameters (L_1 , L_2 , B , D_1 , D_2 , n_1 , n_2 , V_g) and in this presentation we will show some of them, proving the computation domain and its utility for many studies. This is a project not closed yet where we are searching for a FSL profile to be used as a infra-red emitter by charge oscillation (Bloch oscillation) without optical pumping. We wish

to tanks the Centro Nacional de Supercomputação of UFRGS and FAPESP for the financial support.

ENERGIAS DE LIGAÇÃO DE DOADORES RASOS LIGADOS AOS VALES X EM ESTRUTURAS TIPO II DE GaAs/AlAs

GERALD WEBER, LUIZ E. OLIVEIRA

Unicamp

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 $X_{x,y}$ e X_z (onde z é a direção de crescimento) não são mais degenerados. Neste trabalho utilizamos um procedimento variacional, que se tem mostrado muito bem sucedido em poços tipo I, utilizando três parâmetros variacionais para representar adequadamente tanto o efeito de anisotropia das massas como o confinamento quântico na direção z . Supomos que os vales não interagem entre si de maneira que os vales X_x e X_y podem ser considerados degenerados e isolados do vale X_z . Isso corresponde a situação de doadores substitucionais de Si em AlAs e permite o uso de uma hamiltoniana de massa efetiva semelhante ao que é usado para poços tipo I. Encontramos energias de ligação bastante altas para algumas situações: entre 60 meV (X_z) a 85 meV ($X_{x,y}$) para camadas finas de AlAs (entre 10 Å e 30 Å). Embora haja ainda bastante incerteza na exata localização do *band-offset* em X de interfaces GaAs-AlAs, estas energias de ligação indicam a possibilidade de níveis de impurezas rasas que se localizam próximo ao *gap* de GaAs ou abaixo dos níveis confinados da camada de GaAs (em Γ) mesmo para camadas largas de GaAs.

EFEITOS DA INTERAÇÃO ELÉTRON-FONON-ÓPTICO SOBRE OS NÍVEIS DE UMA IMPUREZA DOADORA EM UM POÇO QUÂNTICO DE GaAs-AlGaAs

FRANCISCO AP. PINTO OSÓRIO

Universidade Federal de Goiás

OSCAR HIPÓLITO

Instituto de Física de São Carlos-USP

Através do cálculo variacional obtemos a energia de transição entre os níveis $1s$ e $2p+$ de uma impureza doadora hidrogenóide localizada no interior de um poço quântico de GaAs-AlGaAs, na presença de um campo magnético uniforme aplicado na direção perpendicular à interface. Incluímos nos nossos cálculos a interação elétron-fonon longitudinal óptico (LO) do bulk do GaAs, via teoria de perturbação de segunda ordem IWBPT, limitando o somatório aos três níveis

disponíveis 1s, 2p+ e 2p- segundo procedimento de Cohn-Larsen-Lax. Comparamos os resultados por nós obtidos com recentes dados experimentais de Cheng et al. (Phys. Rev. B48,17243, 1993) e encontramos boa concordância na região de energias abaixo da ressonância sem a necessidade da inclusão de outro modo de fonons nos cálculos.

CONDUTIVIDADE ELÉTRICA DE SUPER-REDES COM DOPAGEM TIPO DELTA PARALELA À DIREÇÃO DE CRESCIMENTO

S. C. P. RODRIGUES, L. M. R. SCOLFARO, R. ENDERLEIN, J. R. LEITE
Instituto de Física da USP

O transporte elétrico em super-redes ao longo da direção de crescimento tem atraído grande interesse. Fenômenos interessantes tais como localização Wannier-Stark, oscilações de Bloch, etc, tem sido observados nestes sistemas. Uma das limitações encontradas em super-redes típicas, as quais em geral envolvem dois materiais semicondutores diferentes, é que dificilmente mais do que a minibanda de mais baixa energia está populada com portadores livres à baixas temperaturas. Um tipo de super-rede onde esta limitação não existe, e que foi considerada só mais recentemente, é a super-rede formada por planos periódicos, comumente chamada "δ-doping". Nas super-redes deste tipo, geralmente várias minibandas estão preenchidas, e o número de bandas ocupadas pode ser variada através da variação do período da super-rede e/ou concentração de dopantes. A partir de resultados de cálculos autoconsistentes das equações de Schroedinger e de Poisson desses sistemas para várias concentrações de dopantes e períodos da super-rede, estudaremos quantitativamente a condutividade elétrica σ ao longo do eixo perpendicular às camadas em super-redes de GaAs com dopagem planar ("δ-doping") tipo-n. A condutividade σ será determinada utilizando-se a equação de transporte de Boltzmann, dentro da aproximação do tempo de relaxação e adotando-se um modelo "tight-binding" para as relações de dispersão, onde o centro de gravidade das minibandas e as larguras das mesmas foram extraídas dos cálculos numéricos autoconsistentes. Mostraremos neste trabalho que a condutividade σ apresenta um comportamento tipo "plateau" como função da posição do nível de Fermi e/ou concentração de dopantes.

Polaron Effects on Cyclotron Mass due to Interface and Slab Phonons in GaAs/AlGaAs Quantum Wells

G. Q. HAI, N. STUART
UFSCar

F. M. PEETERS
Univ. of Antwerp (UIA), Belgium

The effects of interface optical-phonon and confined slab LO-phonon modes on the polaron magneto-optical absorption spectrum and cyclotron resonance (CR) mass are investigated for a GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum well. The magneto-optical absorption spectrum is calculated by using the memory function technique. The cyclotron resonance frequency is determined by the peak position in the absorption spectrum. We find that the interface phonons influence the magneto-polaron resonance considerably near the optical phonon frequency for narrow wells. With increasing well width the coupling to the interface modes decreases while that to the slab modes increases. To compare the calculated cyclotron mass with experimental results, the band nonparabolicity has to be taken into account. Our calculation results are in quite good agreement with experimental measured cyclotron mass.

Raman Scattering of the Optical in (GaAs)_n(AlAs)_n Superlattices Grown on (311)A and (311)B Surface

SEBASTIÃO WILLIAM DA SILVA, YURI A. PUSEP,
JOSÉ CLAUDIO GALZERANI
UFSCar - Depto. de Física, C.P. 676, 13565-905, São Carlos

DIMITRI I. LUBYSHEV, PIERRE BASMAJI
IFQSC-USP, 13560-970, São Carlos

In this paper we present the Raman spectra of confined optical phonon in (GaAs)_n(AlAs)_n superlattices (SL's) grown by Molecular Beam Epitaxy on (311)A and (311)B surfaces.

The comparison between these two kinds of surfaces made it possible to investigate the corrugation of (311)A interfaces, which is not expected for (311)B interfaces.

The (311)A and (311)B SL's were grown simultaneously and together with a reference SL grown (100) GaAs substrate. The confined optical modes measured in the reference (100) SL's were used to determine the actual thickness of layers in samples grown along the [311] direction.

The thickness of layers in (311) SL's were chosen so that in the case of corrugated interfaces the optical phonons should be localized in narrow and broad parts of the layers giving splitted Raman lines. Our study presents no such a splitting neither in the (311)A nor in (311)B SL's. Thus we have to conclude that no any evidence of corrugation of (311)A surface has been found in samples under investigation.

MEDIDAS DE FOTOLUMINESCÊNCIA EM POÇOS QUÂNTICOS DE AlGaAs/ InGaAs/ GaAs COM DOPAGEM MODULADA

MARCELO LUÍS FRANCISCO ABBADE, FERNANDO IIKAWA, MARIA JOSÉ DOS SANTOS POMPEU BRASIL,

JOSÉ ANTÔNIO BRUM, PETER SCHULZ
 UNICAMP
 G. BORGHS
 IMEC, Leuven - Bélgica

Neste trabalho, utilizamos a técnica de fotoluminescência (PL) para estudar a distribuição de carga de um gás bi-dimensional de elétrons em um poço quântico de AlGaAs/ InGaAs/ GaAs com dopagem modulada. Nos espectros de foto-luminescência observamos a presença de dois picos intensos, para temperaturas baixas ($T=2K$), e um terceiro pico adicional, 8 meV abaixo do pico de mais alta energia, para temperaturas elevadas. Com o intuito de identificarmos a origem destes picos, fizemos o cálculo auto-consistente para determinarmos as energias de transição envolvendo os elétrons e os buracos confinados no poço quântico. Encontramos os estados localizados no poço de InGaAs e notamos também que os estados confinados na região de dopagem planar se estendem para a camada do poço de InGaAs. A comparação entre estes resultados teóricos preliminares e os dados de foto-luminescência indica que os picos de mais baixa e mais alta energias podem ser atribuídos às transições envolvendo os estados fundamental e excitado do elétron no poço de InGaAs. O pico intermediário pode ser atribuído à transição envolvendo um estado da dopagem planar. A intensidade relativa deste terceiro pico comparada às de outras transições também está de acordo com os resultados teóricos. Quanto à posição em energia dos picos, notamos a concordância entre os resultados experimentais e teóricos apenas se considerarmos as posições relativas entre os picos. É possível que esses resultados sejam melhorados se introduzirmos correções nos valores nominais dos parâmetros de crescimento. Cálculos neste sentido estão ainda em andamento.

Raman spectroscopy of plasmon anisotropy in heavily doped GaAs/AlAs superlattices

M. T. O. SILVA, YURI A. PUSEP, JOSÉ CLAUDIO GALZERANI

UFSCar - Depto. de Física, C.P. 676, 13565-905, São Carlos

N. T. MOSHEGOV, A. I. TOROPOV

Institute of Semiconductor Physics, 630090 Novosibirsk, Russia

In the present paper we apply Raman spectroscopy to the investigation of plasma electron excitations polarized normal and parallel to the layers in the doped GaAs/AlAs SL's. It was obtained that both vertical (superlattice) plasmon and the in-plane plasmon contribute to Raman scattering. The role of the different conduction band electron states has been investigated as well.

Two types of SL's were studied - those with thin barriers penetrating by the electrons and those with

quantum wells isolated by thick enough barriers. The first type was realized with the $(GaAs)_{17}(AlAs)_2$ SL's (where the subscripts denote the thicknesses of corresponding layers expressed in monolayers); as the second type $(GaAs)_5(AlAs)_5$ SL's were studied.

The experimental results were found in good agreement with the calculations made in the envelope-function approximation which took into account the Γ and X electron conduction band states. In accordance with these calculations we observed the conducting behavior of the doped $(GaAs)_{17}(AlAs)_2$ SL's where electrons move in the lowest Γ miniband and the isolating behavior of the doped $(GaAs)_5(AlAs)_5$ SL's where the narrow lowest X_L miniband was completely filled at any doping in the samples under investigation.

EFEITO DE CAMPOS MAGNÉTICOS IN-PLANE NAS SUB-BANDAS DE ENERGIA DE POÇOS QUÂNTICOS TIPO GaAs/GaAlAs

EDUARDO KOJY TAKAHASHI, ANTÔNIO TADEU LINO
 Universidade Federal de Uberlândia

LUÍSA MARIA RIBEIRO SCOLFARO, JOSÉ ROBERTO LEITE

Universidade de São Paulo

Neste trabalho estudamos um poço quântico formado por GaAs/GaAlAs com uma dopagem delta de silício em seu centro e submetido a campos magnéticos paralelos às interfaces. Para isso, resolvemos as equações de Schroedinger e de Poisson de forma autoconsistente para várias concentrações nominais de doadores e larguras de poços quânticos variando de 100 a 600 angstroms e campos magnéticos até 20 T. O efeito do campo magnético na dispersão da energia $E(k)$ é produzir uma assimetria no potencial e deslocamentos dos mínimos das sub-bandas com relação a $k=0$ em sentidos contrários para elétrons e buracos.

Studies of the radiative recombination processes in Be- δ doped GaAs structures

A. LEVINE, A. QUIVY, E. C. F. DA SILVA

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, C. Postal 20516, 01452-990, São Paulo, Brasil

I. F. L. DIAZ, E. LAURETO

Departamento de Física da Universidade de Londrina, C. Postal 6001, 86051 Londrina, Paraná, Brasil

E. A. MENESES, J. B. OLIVEIRA

Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas, C. Postal 6165, 13081-970, Campinas, São Paulo, Brasil

A δ -doping carried out with acceptors dopants will lead to a local A-shaped bending of the top of the valence band as well as of the bottom of the conduction band. In the A-shaped groove of the valence band, discrete

hole energy levels will exist. The potential confining the holes is repulsive for the electrons which ones will spatially be repelled from the region of the δ -doped layer. Consequently, holes and excited electrons will be spatially separated, the spatial overlap between their wave functions will be poor and the probability for radiative recombination will be low. Besides the low probability for radiative recombination, in principle, it should be possible, with photoluminescence measurements, to observe radiative recombination processes involving conduction band electrons and confined holes in the δ -doping structures. In this work recombination processes in Be δ -doped layers in GaAs grown by molecular beam epitaxy (MBE) with increasing hole concentration were investigated by photoluminescence spectroscopy as a function of the temperature. Strong radiative emissions below the GaAs energy gap were observed. The results are discussed.

Sample parameters of degenerate semiconductor superlattices

L. C. D. GONCALVES, A. B. HENRIQUES

Instituto de Física, USP

P. L. DE SOUZA, B. YAVICH

Centro de Estudos em Telecomunicações, PUC-RJ

The optical and transport properties of a degenerate semiconductor SL are drastically dependent on the sample parameters (superlattice period d , density of carries n_s and the thickness of the dopant layers Δ). Therefore, the knowledge of the parameters of a given sample is a pre-requisite for an investigation of its physical properties. The accurate determination of the parameters of a superlattice (SL) sample is a difficult task to be attained by conventional non-destructive methods. Due to the presence of transport by several minibands with widely varying mobilities the Hall effect experiment leads to parameters which are only a very rough estimate of the sample carrier density and mobility. We study the possibility of determining the sample parameters of a degenerate superlattice from the sample Shubnikov-de Haas (SdH) spectra. We demonstrate that under certain conditions it is possible to extract d , n_s and Δ from the spectral analysis of the SdH curves. The reliability of the procedure proposed is studied by comparing the sample parameters with those obtained from the mobility spectrum and CV measurements on InP:Si superlattices.

Depopulação da segunda sub-banda de um PQA através da aplica(c)ão de um campo magnético planar.

ADEMIR RICART ALVES

Universidade Federal de Viçosa

PAULO SERGIO SOARES GUIMARÃES, ALAOR
SILVÉRIO CHAVES, MARCUS VINICIUS BAETA
MOREIRA

Universidade Federal de Minas Gerais

Estruturas MDS com mais de uma sub-banda ocupada foram pouco investigadas. Por não apresentarem altas mobilidades, essas estruturas têm sido escassamente fabricadas. Uma alternativa para o estudo desse tipo de sistema é o poço quântico assimétrico (PQA), pois uma MDS nada mais é do que um PQA de largura muito grande. Teoricamente, prevê-se que a ação de um campo magnético planar (paralelo à interface) sobre essas estruturas tende a depopular as sub-bandas mais elevadas. Visando à verificação desse efeito, medimos a magnetoresistência sob campo magnético planar de duas amostras tipo n-AlGaAs//InGaAs/GaAs (PQA) de concentrações iguais a $5 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ e $2 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$. Constatamos que apenas a amostra de concentração mais elevada apresenta magnetoresistência negativa. Esse resultado está de acordo com a tese do "esvaziamento", pois a magnetoresistência negativa pode estar associada com a supressão do espalhamento inter-sub-banda. A variação da magnetoresistência dessa amostra com a temperatura reforça a nossa idéia pois à medida em que a temperatura aumenta é necessária uma maior intensidade de campo planar para que a magnetoresistência se torne positiva (esvaziamento completo da segunda sub-banda). Provavelmente, isto se deve ao alargamento térmico das bandas de energia. Espectros de fotoluminescência também indicam que estamos no caminho certo, pois eles registram a ocupação de duas sub-bandas apenas nessa amostra.

Tunneling (SEM) - 09/06/95

BISTABILITY AND CHAOS IN A DBHS SASER

SERGIO S. MAKLER, DIANA E. TUYAROT, ENRIQUE V. ANDA

*Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense,
Niterói - RJ, Brasil*

MIKHAIL I. VASILEVSKIY

*Faculty of Applied Physics, N. Novgorod University,
Nizhni Novgorod, 603600 Russia*

In previous works¹ we proposed a device capable to generate ultra high frequency coherent sound. It was called SASER by analogy to laser. The device consists of a double barrier heterostructure (DBHS) tailored so as to permit phonons to resonate with the electronic system. The condition for resonance is fulfilled when the energy difference between the first and second resonant peaks of the electronic DOS in the well matches the LO phonon frequency. 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 photoelectronic systems (analogous to optoelectronics).

We established kinetic equations for the number of electrons in each level and the number of LO phonons in the well, as well as for the number of secondary TA phonons which results from the LO phonon decay due to anharmonicity. Coefficients of the equations which describe the tunneling processes have to be obtained in a self-consistent way taking into account the effects of space charge inside the well and the accumulation and depletion layers in the emitter and collector, respectively. The steady solution of the system is analyzed and the conditions for "SASER action" are discussed. The characteristic curve shows the well known bistability at the end of each peak. Besides, at the beginning of the SASER emission this curve shows a chaotic behaviour.

References

- 1 S.S.Makler, E.V.Anda, H.M. Pastawski and R.G. Barrera, *XII SLAFES*, Pichidangui - Chile Nov. 1992. S.S.Makler, E.V.Anda, H.M. Pastawski and R.G. Barrera, *Braz. J. Phys.* **24**(1), 330 (1994). M.I. Vasilevskiy, S.S. Makler, D.E. Tuyarot and E.V.Anda, *AFA '94*, p. 128, 79a. RNF, Villa Giardino, Cordoba - Argentina.

EFEITO TUNEL 1D-0D EM NANOESTRUTURAS DE DUPLA BARREIRA

Y. GALVÃO GOBATO, J. M. BERROIR, Y. GULDNER
Ecole Normale Supérieure, Paris, France

Quando reduzimos as dimensões laterais de heteroestruturas semicondutoras de dupla barreira temos o aparecimento de um confinamento lateral permitindo a observação do efeito tunel entre um emissor 1D (contato com confinamento lateral) e "quantum box" (poço quântico com confinamento lateral). Com o objetivo de estudar esse efeito realizamos o cálculo do perfil de potencial de banda de condução de diodos de dupla barreira de dimensões laterais nanométricas ($< 500\text{nm}$). O perfil de potencial é obtido pela resolução da equação de Poisson em coordenadas cilíndricas usando a aproximação de Thomas-Fermi para densidade eletrônica nos contatos e considerando o "pinning" do nível de Fermi na superfície. Determinamos também os coeficientes de transmissão e a corrente tunel coerente em função da tensão aplicada para temperatura $T=0\text{K}$ e comparamos com resultados experimentais publicados na literatura.

COULOMB BLOCKADE AND BISTABILITY OF PERSISTENT CURRENTS IN MESOSCOPIC RINGS

ENRIQUE V. ANDA

UFF

G. CHIAPPE

Univ. de Buenos Aires

We study a mesoscopic ring threaded by a magnetic flux, focuses in the inhomogeneous case, although some results corresponding to the homogeneous one are also discussed. We show that transport in these systems can be assimilated to a resonant tunneling phenomenology. Coulomb blockade and multistability processes are demonstrated to be present in persistent currents flowing across imperfect conducting loops. These properties are functions of the magnetic flux crossing the ring which in this case plays the role that the external applied potential fulfills in the standard mesoscopic heterostructures. For the case of a double barrier structure constructed on the ring we demonstrate that the device is strictly speaking a resonant tunneling structure as a function of the magnetic flux and the gate potential. For this system there is a Kondo effect that is studied as a function of temperature.

TUNELAMENTO RESSONANTE EM POÇOS DUPLOS ASSIMÉTRICOS NA PRESENÇA DE CAMPOS ELÉTRICO E MAGNÉTICO CRUZADOS.

MÁRCIO ADRIANO RODRIGUES SOUZA

IFSC - USP

VALMIR ANTONIO CHITTA

DF - UFSCar

MARCOS HENRIQUE DEGANI

IFSC - USP

Devido à possibilidade de aplicação a dispositivos eletrônicos de alta velocidade e aos aspectos básicos relacionados à Mecânica Quântica o tunelamento de elétrons em hetero-estruturas semicondutoras tem sido estudado tanto experimental como teoricamente[1]. Nós investigamos a influência do campo elétrico paralelo (direção de crescimento) e do campo magnético perpendicular sobre o tunelamento eletrônico em um sistema composto por dois poços quânticos acoplados; $Al_{0.35}Ga_{0.65}As-100\text{Å} / GaAs-60\text{Å} / Al_{0.35}Ga_{0.65}As-50\text{Å}$. A equação de Schrödinger foi resolvida numericamente usando-se o método "Split-Operator" na aproximação de massa efetiva. Os parâmetros do sistema (massas efetivas no poço e na barreira bem como o "band-offset") foram considerados dependentes da temperatura. Calculamos a relação de dispersão $\epsilon_n(k_x, k_y = 0)$ para vários valores de campos elétricos e magnéticos, determinando o campo magnético ressonante para diferentes campos elétricos. A dinâmica desse sistema também foi considerada, onde fizemos

a evolução de um pacote de ondas na condição de ressonância para determinarmos o tempo de tunelamento. É feita ainda uma comparação com resultados experimentais[2] e teoria de perturbação em primeira ordem.

References

- [1] M. G. W. Alexander, M. Nido, W. W. Rühle, Phys. Rev. B, v.41, n.17, p.12295 (1990); V. Berger, N. Vodjdani, B. Vinter, E. Costard, E. Böckenhoff, Appl. Phys. Lett., v.60, n.15, p.1869;
- [2] A. P. Heberle, M. Oestreich, S. Haacke, W. W. Rühle, J. C. Maan, K. Köhler, Phys. Rev. Lett., v.72, n.10, p.1522 (1994).

Departamento de Física, PUC-Rio

We investigate the effect of differences between the quantum well and the electrode carrier effective masses on the current-voltage characteristics of double-barrier interband tunneling structures under an applied magnetic field parallel to the current. The system is described by a two-band tight-binding Hamiltonian that incorporates electron and light-hole interaction and the current is calculated using the Keldysh non-equilibrium Green function diagrammatic technique. The formalism is applied to InAs/AlSb/GaSb double-barrier structures considering either the InAs or the GaSb as the quantum well. The behavior of the I-V characteristics as a function of the magnetic field strength is strongly influenced by the mass differences and opposite curvatures of the conduction and the valence bands. The features we obtain are quite different weather the well is constituted by InAs or GaSb. They are both also different from the more traditional magneto-tunneling results for GaAs/AlGaAs, where the electrodes and the quantum well electronic masses are equal. The behavior of the I-V characteristics with the applied magnetic field is in good qualitative agreement with available experimental data.

**EFFECTS OF CARRIER MASS
DIFFERENCES ON THE I-V
CHARACTERISTICS OF RESONANT
INTERBAND TUNNELING STRUCTURES
IN PRESENCE OF PARALLEL MAGNETIC
FIELD**

MARIA AUGUSTA MARTINS DAVIDOVICH

SUPERCONDUTIVIDADE

Supercondutividade I (SUC) - 07/06/95

Determinação da Concentração de Prata em Compósitos Supercondutores-Metal

C. G. GAMEIRO, M. V. BARBOSA, J. MARCILIO FERREIRA, J. ALBINO AGUIAR
Departamento de Física-UFPE

Compósitos supercondutor-metal foram produzidos pelo revestimento com prata de grãos obtidos após pulverização de amostras cerâmicas supercondutoras $H0Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ preparadas por reação sólida. Os grãos prateados foram em seguida compactados, sinterizados e os compósitos assim obtidos foram submetidos a tratamento térmico em atmosfera de oxigênio a fim de restaurar suas propriedades supercondutoras. Nesta comunicação descrevemos dois procedimentos utilizados na determinação da concentração de prata nestes compósitos. O primeiro baseado no método de Volhard e o segundo em gravimetria, ambos utilizando processos químicos envolvendo titulações. Os resultados obtidos para as concentrações de prata em nossos compósitos serão apresentados e analisados.

Efeito dos Parâmetros de Preparação nas Propriedades Supercondutoras de

$YBa_2[(CuO)_{0.99}(MS)_{0.01}]_3O_{4-\delta}$, $M = Ni, Fe$
M. VIRGÍNIA BARBOSA, ANDRÉA B. LEITE, J. MARCILIO FERREIRA, J. ALBINO AGUIAR
Departamento de Física-UFPE

Cerâmicas supercondutoras do tipo $YBa_2[(CuO)_{0.99}(MS)_{0.01}]_3O_{4-\delta}$ com $M = Ni$ ou Fe , foram sintetizadas por reação sólida dos óxidos e sais constituintes sob diferentes tratamentos térmicos. Para amostras com $M = Ni$, foi feito um estudo das propriedades supercondutoras em função da atmosfera de sinterização e de recozimento. Quando sinterizadas e recozidas em atmosfera inerte (N_2) não é observado comportamento supercondutor. Entretanto ao realizar-se um novo recozimento em atmosfera oxidante (O_2) suas propriedades supercondutoras são recuperadas. Para amostras com $M = Fe$, foi feito um estudo do efeito do tempo e da temperatura de recozimento na transição diamagnética. As amostras foram inicialmente sinterizadas a $900^\circ C$ e recozidas a $600^\circ C$ por 12h em atmosfera de oxigênio. Medidas de susceptibilidade ac mostram que a amostra é supercondutora com uma transição diamagnética estreita e apresenta um bom volume supercondutor. Foram feitos novos recozimentos a temperatura entre $350^\circ C$ e $600^\circ C$ e para diversos tempos de oxigenação. Resultados revelam que um recozimento a $450^\circ C$ por 64h leva a um aumento

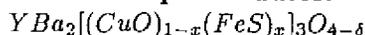
no volume supercondutor e a um acréscimo de $200\mu g$ na sua massa.

PREPARAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE AMOSTRAS TEXTURIZADAS DE $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ COM DIFERENTES DOPAGENS DE BISMUTO, PELO MÉTODO GEL-CITRATO

FERNANDO MANUEL ARAÚJO MOREIRA, RICARDO MAGNANI, WILSON AIRES ORTIZ
Grupo de Supercondutividade e Magnetismo-Departamento de Física-UFSCar
EDSON LEITE, ELSON LONGO
Departamento de Química-UFSCar

O processamento de um grande número de cerâmicas supercondutoras de alta temperatura crítica (HTSC), particularmente aquelas para aplicações em dispositivos elétricos e magnéticos, tem mostrado a necessidade de pós homogêneos com tamanho de partícula controlado. Neste sentido, o processo gel-citrato oferece, em comparação com outras técnicas, um grande número de vantagens. Os HTSC do tipo $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ são reconhecidos como materiais com enorme potencial para aplicações em tecnologia, em função do possível uso em temperaturas superiores a do nitrogênio líquido. Entretanto, para estas aplicações são necessárias densidades de corrente crítica de 10^4 a $10^6 A/cm^2$. Esta propriedade é fortemente dependente da microestrutura do material, em razão da sua grande anisotropia e do seu pequeno comprimento de coerência. Neste sentido, os processos de sinterização clássica das cerâmicas têm-se mostrado ineficientes, sendo substituídos por aqueles que permitem obter cerâmicas texturizadas. Tais processos permitem obter valores para a densidade de corrente crítica de $3.5 \times 10^4 A/cm^2$ a campo nulo, até $2.6 \times 10^4 A/cm^2$ em 7 T. Com os pós obtidos pelo processo gel-citrato, foram preparadas amostras de $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ com diferentes dopagens de Bismuto, do tipo policristal sinterizado e policristal texturizado. A caracterização estrutural foi realizada via difração de raios-x (XRD) e microscopia eletrônica de varredura (SEM). A caracterização magnética foi realizada através da determinação da suscetibilidade magnética AC, como função da temperatura ($77 \leq T \leq 120$) K, do campo externo ($0 \leq H_{DC} \leq 520$) Oe e do campo de excitação ($0 \leq h_{AC} \leq 22$) Oe. Este trabalho é parcialmente financiado por FAPESP e CNPq.

Determinação dos Estados de Oxidação do Fe em Cerâmicas Supercondutoras do tipo



M. VIRGÍNIA BARBOSA, ANDRÉA B. LEITE, J.

MARCILIO FERREIRA, J. ALBINO AGUIAR

Departamento de Física-UFPE

PAULA C. A. SÁ, A. C. PAVÃO

Departamento de Química Fundamental-UFPE

O comportamento supercondutor dos óxidos supercondutores de alta temperatura de transição (T_c) do tipo $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ é drasticamente afetado pela concentração de oxigênio existente e pela substituição do Cu por outros metais de transição da série 3d. Geralmente a determinação da concentração de oxigênio é realizada só através da técnica de iodometria. No entanto, para as amostras dopadas com FeS este método não é satisfatório, devido à existência de dois estados de oxidação para o íon ferro. Para viabilizar esta determinação usamos análise espectrofotométrica para encontrar o estado de oxidação e a concentração dos íons Fe^{2+} e Fe^{3+} em cerâmicas do tipo $YBa_2[(CuO)_{1-x}(FeS)_x]_3O_{4-\delta}$ com x variando de 0,01 a 0,5 e, em seguida utilizamos a iodometria para encontrar a concentração real de oxigênio da amostra.

Propriedades Supercondutoras de Filmes Finos de Nb Produzidos por Sputtering

A. L. V. ROLIM, P. M. L. PALMA, E. F. S.

JÚNIOR, J. ALBINO AGUIAR

Departamento de Física-UFPE

As temperaturas de transição diamagnética e de irreversibilidade (T_R) de filmes finos de Nb, depositados por *magnetron sputtering* em substratos dielétricos e com espessura entre 30 e 500nm, foram medidas através de susceptibilidade ac e magnetização dc utilizando-se um magnetômetro de SQUID, para intensidades de campo magnético de até 0,25T. O diagrama de fase campo magnético-temperatura (H-T) para amostras de diversas espessuras apresentam propriedades que são atribuídas ao efeito de mudança de dimensionalidade do sistema. A qualidade dos filmes foi analisada através da medida da resistividade superficial. É também estudada a dependência da taxa de deposição em função da potência da fonte DC ou RF (0-500W) e da pressão do plasma de Ar.

Properties of polycrystalline $Nd_{1.85}Ce_{0.15}CuO_{4-y}$ prepared under different conditions*

R. F. JARDIM

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, CP 20516, 01452-970, São Paulo, Brazil

E. A. EARLY

NIST, Gaithersburg, MD 20899, USA

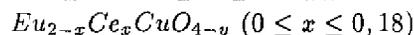
M. B. MAPLE

Department of Physics, University of California, San

Diego, La Jolla, CA 92093, USA

Polycrystalline samples of the electron-doped high- T_c superconductor $Nd_{1.85}Ce_{0.15}CuO_{4-y}$ were prepared with different starting materials, sintering temperatures, reducing atmospheres, and cooling rates after reduction. Observations of the microstructure and measurements of X-ray powder diffraction, electrical resistivity, and magnetic susceptibility indicate the important effects that cationic (Ce) and anionic (O) distributions have upon the properties of this compound. A double resistive superconducting transition, attributed to small superconducting islands within grains and coupling between these islands, is an intrinsic property of this compound. Samples sintered below the eutectic are composed of small grains, are porous, and have an additional phase. An inhomogeneous cationic distribution results, even when an intermediate oxide $NdCeO_{3.5}$ is used as a starting material in order to promote the diffusion of Ce into the matrix, as indicated by a large and semiconducting electrical resistivity, a broad resistive transition, and a small diamagnetic susceptibility. For these samples, the oxygen distribution has a pronounced effect on the resistive transition, with a more non-equilibrium distribution resulting in higher transition temperatures. On the other hand, samples sintered above the eutectic temperature, and therefore with a liquid phase present, have larger grains and are dense. Their properties are relatively insensitive to the oxygen distribution, which is inhomogeneous across the entire sample, while the Ce distribution is more uniform, as indicated by a small and nearly metallic electrical resistivity, a sharper resistive transition, and a larger diamagnetic susceptibility. In addition, those samples prepared with the intermediate oxide have higher transition temperatures. Implications of the granularity of electron-doped compounds on the small diamagnetic contribution and also the absence of the peak in the specific heat at the superconducting transition are briefly discussed. * Work supported by the Brazilian Agency FAPESP under Grant No. PD-EXT 91/2743-0 and the DOE (USA) under Grant DE-FG03-86ER-4530.

EFEITOS DA ATMOSFERA DE TRATAMENTO TÉRMICO EM



PAULO ATSUSHI SUZUKI

FAENQUIL

RENATO DE FIGUEIREDO JARDIM

IFUSP

Os efeitos das diferentes atmosferas no tratamento térmico das amostras de $Eu_{2-x}Ce_xCuO_{4-y}$ ($0 \leq x \leq 0,18$) foram sistematicamente investigados. Os resultados de análise térmica ($20^\circ C < T < 1400^\circ C$) das amostras preparadas a $970^\circ C$, em ar, mostraram uma variação na massa da ordem de 0,5% em função da temperatura. Tal variação, que é reversível com a queda de

temperatura, foi associada à variação de oxigênio na estrutura T' . Medidas de difração de raios-X do produto da análise térmica mostraram que em um tratamento térmico a alta temperatura ($T > 1200^\circ\text{C}$) a fase é preservada quando a atmosfera de tratamento é oxidante. Em um tratamento térmico em atmosfera inerte ocorre a decomposição da fase predominante. Nas amostras tratadas a baixas temperaturas (950°C), a fase é preservada com tratamentos térmicos em diferentes atmosferas. Por outro lado, as medidas de resistividade elétrica mostraram que as amostras tratadas a 950°C em atmosfera oxidante apresentam caráter semicondutor, com valores da resistividade da ordem de $10^2 \Omega \cdot \text{cm}$. Um tratamento térmico adicional a 1020°C em atmosfera inerte e resfriamento rápido decresce a resistividade a valores da ordem de 1 a $10 \Omega \cdot \text{cm}$. São apresentadas correlações entre os resultados de resistividade e o teor de oxigênio na estrutura após os tratamentos térmicos em diferentes atmosferas.

(Suporte financeiro: CAPES e FAPESP, sob contrato nº 93/4204-4)

**MAGNETISM, SUPERCONDUCTIVITY
AND PAIR-BREAKING EFFECTS IN
 RNi_2B_2C ($R = Lu, Tm, Er, Ho, Dy, Tb, Gd$) and
 $(Y, Gd)Ni_2B_2C$**

M. EL MASSALAMI, E. M. BAGGIO-SAITOVITCH
CBPF

The main features of the transport, magnetic and superconducting properties of the new quaternary intermetallic compounds RNi_2B_2C ($R = Lu, Tm, Er, Ho, Dy, Tb, Gd$) are reviewed. Their phase diagram (characteristic temperatures versus effective ionic-radii) showed that the long range ordering temperatures as well as the gradual degradation of superconductivity can be successfully scaled to the de Gennes factor, $(g - 1)^2 J(J + 1)$. It is pointed out that such features as the unique reentrant behavior of $HoNi_2B_2C$ and the abrupt quenching of superconductivity for R lighter than Ho are most probably unaccountable within this scaling scheme. Rather, these features and, in general, their low-T magnetic and transport properties as well as the main features of the magnetic pair-breaking are related to the structure of their low-T magnetic ground state. A thorough discussion on the formation and on the field- and thermal-stability of such magnetic ground states are given and illustrated by considering the low-T H-T phase diagram of $HoNi_2B_2C$. Finally, a brief discussion is given on the alloying influences on the physical properties of the $(Y, Gd)Ni_2B_2C$ series.

Workshop: Teoria da Supercondutividade: Status Atual e Tendências (SUC) - 07/06/95

**IRREVERSIBILIDADE VERSUS DERRETIMENTO DA REDE DE VÓRTICES EM
SUPERCONDUTORES DO TIPO II**

MAURO MELCHIADES DORIA
UFF

O estado misto dos supercondutores do tipo II com alto valor de κ , a constante de Ginzburg-Landau, possui duas regiões distintas no diagrama ($H - T$) campo aplicado, H versus temperatura, T . Um delas corresponde a um estado reversível, dissipativo, onde as linhas de vórtices podem se locomover no interior do supercondutor e portanto é frequentemente interpretada como um estado líquido. A outra é um verdadeiro estado supercondutor, no sentido de resistividade nula, onde os processos são irreversíveis pois os vórtices encontram-se ancorados correspondendo a uma fase sólida. A existência dessas duas regiões foi observada num amplo espectro de materiais, possuindo os mais variados valores de temperatura crítica, composição química e estrutura cristalográfica, essa podendo ser isotrópica, anisotrópica ou em camadas, como nos compostos cerâmicos de alta temperatura crítica T_c . A existência dessas duas regiões distintas parece ser uma consequência natural de um mecanismo intrínseco de ancoramento, causado pelo pequeno comprimento de coerência do estado supercondutor. Desde a determinação da linha que as separa, por A. Müller e colaboradores, através de medidas de susceptibilidade magnética, tem ocorrido na literatura um grande debate sobre o verdadeiro significado dessas duas regiões e sobre a natureza da transição entre elas. Para baixas temperaturas e altos valores de campo aplicado essas regiões podem se subdividir em várias sub-regiões e portanto vamos considerar aqui o diagrama $H - T$ na vizinhança de T_c . Uma revisão dos dados experimentais relativos ao fenômeno será feita e algumas das propostas teóricas para o seu entendimento, tais como o derretimento termodinâmico da rede de vórtices, transição tipo vidro de spin, propriedades de escala serão discutidas.

PROPRIEDADES ELÁSTICAS DA REDE DE VÓRTICES PARA SUPERCONDUTORES ANISOTRÓPICOS.

EDSON SARDELLA
UNICAMP

As propriedades elásticas da rede de vórtices tem sido de fundamental importância para o entendimento de muitas propriedades físicas dos novos supercondutores tais como seu derretimento em um estado líquido e flutuações na magnetização. Uma revisão da teoria de elasticidade não-local para supercondutores com simetria uniaxial e várias aplicações desta teoria são apresentadas. O número de constantes elásticas desta rede para materiais anisotrópicos é dramaticamente aumentado e mostra-se como determinar todos os módulos elásticos. A estabilidade da rede de vórtices devido a deformações de *cisalhamento* e *entortamento* (*tilt*) é investigada. Além disso, os efeitos de flutuações da rede de vórtices no diagrama de fase, a assim chamada linha de *irreversibilidade* ou *derretimento*, são estudados. Os efeitos de flutuações na magnetização são também analisados.

Mecanismos de Supercondutividade de Alto T_c

RAIMUNDO R. DOS SANTOS
Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense

A identificação do mecanismo responsável pela supercondutividade de alto T_c nos materiais à base de óxidos de cobre continua uma questão aberta e controversa. A supercondutividade aparece quando buracos são injetados nos planos de CuO_2 , por exemplo, ao se substituir La por Sr ($\text{La}_{2-x}\text{SrCuO}_4$), ou por deficiência de O, como em $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$; existem também materiais em que os transportadores são elétrons. Neste trabalho faremos inicialmente uma revisão das principais evidências experimentais – desvios do efeito isotópico, a proximidade de fortes flutuações antiferromagnéticas, o pequeno comprimento de coerência dos pares, e comportamentos não-convencionais do estado normal –, que apontam para um mecanismo de interação atrativa entre elétrons que não seja aquele mediado por fônons, como na teoria BCS. Discutiremos também a resistividade altamente anisotrópica e o (quase-)antiferromagnetismo dos planos de CuO_2 , que levaram a sugestões de que o mecanismo tivesse origem nas propriedades magnéticas associadas aos planos. Isto tem recebido o reforço de medidas recentes, compatíveis com um *gap* supercondutor anisotrópico e com nós na superfície de Fermi – onda-*d* –, um comportamento oposto ao dos supercondutores tradicionais – onda-*s*. Em seguida, faremos uma revisão de diversas teorias propostas para explicar o emparelhamento, seus sucessos e suas falhas.

Painéis I (SUC) – 07/06/95

O Torque Intrínscio Máximo e o Parâmetro de Massa

ISAÍAS GONZAGA DE OLIVEIRA
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Utilizando a teoria de London anisotrópica obtemos uma expressão geral para a energia do sistema de vórtices considerando a energia de interação e a auto-energia da linha. Neste trabalho mostraremos um método experimental independente para a determinação do parâmetro de massa, γ . Esta quantidade é usualmente estimada através da razão entre as medidas do campo magnético superior e inferior, H_{c2} e H_{c1} . Kogan mostrou que um torque devido apenas a anisotropia

de massa poderia ser observado nos supercondutores de altas temperaturas. Desde então varias pessoas vem medindo este torque. Vários espectros mostrados por D.E. Farrel e outros mostraram uma característica, o máximo destes torques variam muito pouco com as condições impostas pelo experimento, dentro da faixa de reversibilidade. No limite de densidade de vórtices elevada obtemos uma expressão analítica para a energia livre total do sistema, isto é, a energia de interação e a auto-energia da linha. Deste modo, extraímos a expressão para o torque intrínscio. Como o que nos chama a atenção é este comportamento do máximo, buscamos o ângulo maximizante θ_{max} . E dentro destas condições encontramos um valor de θ_{max} que é somente função de γ .

ESTUDO DA SOLUBILIDADE DO Pr NO

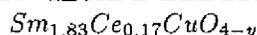
CARLOS ALBERTO MOREIRA DOS SANTOS

Departamento de Engenharia de Materiais - FAENQUIL

SÉRGIO MOEHLECKE, IRIS LINARES TORRIANI

Instituto de Física - UNICAMP

O sistema Bi-Sr-Ca-Cu-O (Bi2212) dopado com Itrio (Y) ou Lantanídeos (LN), tem sido objeto de recentes trabalhos no intuito de esclarecer os mecanismos da transição metal isolante (MIT) e de destruição da supercondutividade. Os resultados observados para uma variedade de dopagens, tem mostrado um comportamento similar, no que diz respeito a ocorrência da MIT, onde o aumento da dopagem de Y ou LN no sitio de Ca^{+2} causa a localização de elétrons no estado normal e o composto passa do estado metálico para isolante. Com respeito a destruição da supercondutividade, tem sido observado que o aumento da quantidade de Y ou LN reduz sistematicamente a temperatura de transição supercondutora. Tal observação tem sido atribuída a mecanismos de "magnetic pair breaking" ou "hole filling". Especial atenção tem sido dada ao sistema $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Cu}_2\text{O}_{8+y}$, particularmente no que diz respeito à determinação do limite de solubilidade do Pr. Resultados reportados recentemente na literatura demonstraram a existência de solubilidade completa no caso do Gd, Er e Y, entretanto, no caso do Pr, existem várias controvérsias a respeito de sua solubilidade. Neste trabalho, são apresentados resultados de difratometria de raios-x, DTA/TGA e microscopia ótica. A análise dos resultados parecem indicar a existência de um limite de solubilidade do Pr no Bi2212.

EFEITO DA Prensagem SOBRE A RESISTIVIDADE ELÉTRICA DE

MARIA JOSÉ RAMOS SANDIM, PAULO ATSUSHI

SUZUKI

FAENQUIL

RENATO DE FIGUEIREDO JARDIM

IFUSP

Amostras policristalinas de $\text{Sm}_{1,83}\text{Ce}_{0,17}\text{CuO}_{4-y}$ foram preparadas pelo método sol-gel e seus pós submetidos a diferentes prensagens: 250, 374, 500 e 624 MPa. Em seguida, as amostras foram submetidas ao mesmo tratamento térmico em atmosfera inerte à 1070°C por 20 horas. Medidas de resistividade elétrica como função da temperatura a campo magnético nulo foram realizadas para diferentes correntes de excitação. Foram observadas as seguintes temperaturas de transição supercondutora (T_c) para as amostras em ordem crescente de prensagem: 16,5K, 16,9K, 17,6K e 18,2K respectivamente. As transições supercondutoras observadas apresentaram um alargamento que é menos pronunciado nas amostras submetidas às pressões maiores. Estas

também apresentaram uma maior sensibilidade à corrente de excitação. Observou-se também uma acentuada queda da resistividade elétrica no estado normal com o aumento da pressão. Os resultados obtidos são discutidos em termos da morfologia das amostras, que envolve o tamanho de grãos, número de primeiros vizinhos, etc. (Suporte financeiro: CAPES e FAPESP, sob contrato n° 93/4204-4)

FASE COM CALIBRE INVARIANTE NA DEFINIÇÃO DA ODLRO PARA SUPERCONDUTORES TIPO II

JAIRO ROA ROJAS

UFRGS

HUGO NICOLÁS NAZARENO

CIFMC - UnB

Tanto HPS como E.H. Brandt encontraram que as flutuações de fase destróem a ODLRO na fase mista de supercondutores tipo II para dimensionalidades menores que 4. Eles utilizaram, na definição da ODLRO com calibre invariante, uma quantidade com calibre não invariante qual é a fase do parâmetro de ordem. Com essa definição da ODLRO as flutuações nas componentes transversais da velocidade do super fluido são responsáveis pela destruição da ODLRO, mas com uma ODLRO assim definida, pode-se mostrar que a ODLRO seria destruída para qualquer dimensionalidade e não apenas para $d < 4$. Considerando a desordem como uma perturbação fraca, definimos neste trabalho uma ODLRO com calibre invariante e uma fase do parâmetro de ordem também com calibre invariante, com os quais mostramos que a destruição da ODLRO deve-se as flutuações nas componentes longitudinais da velocidade do super fluido e que esta destruição acontece para dimensionalidades menores que 4 na fase mista.

Apoio: COLCIENCIAS - CNPq

PRODUÇÃO DE COMPOSTOS LnNiO_3 E $\text{Ln}_{1-x}\text{Ce}_x\text{NiO}_3$ ($\text{Ln} = \text{La}, \text{Nd}$) ATRAVÉS DE PRECURSORES SOL-GEL

M. T. ESCOTE, R. F. JARDIM

IFUSP

P. A. SUZUKI

FAENQUIL

Amostras policristalinas de LnNiO_3 e $\text{Ln}_{1-x}\text{Ce}_x\text{NiO}_3$ ($\text{Ln} = \text{La}, \text{Nd}$; $x = 0.1$) foram produzidas através de precursores Sol-Gel e caracterizadas por difração de raios-x. Estas amostras foram tratadas termicamente em temperaturas entre 300°C e 950°C em atmosfera de oxigênio e ao ar. Os resultados de difração de raios-x revelam que o composto LaNiO_3 é composto de duas fases cristalográficas diferentes: uma fase cúbica e uma outra romboédrica. A substituição de La por

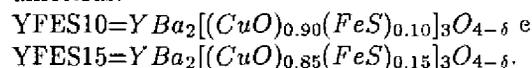
Ce nestes compostos estabiliza a fase romboédrica nas amostras tratadas em 950°C . Entretanto os resultados de difração de raios-x revelam que a difusão do Ce na matriz LaNiO_3 é muito pequena. Os resultados de difração de raios-x nas amostras de NdNiO_3 tratadas a 650°C em oxigênio revelam a presença de uma fase ortorrômbica. Um estudo da transição metal- isolante nestes compostos encerra o presente trabalho.

ESPECTROSCOPIA MÖSSBAUER DE DERIVADOS DE CUPRATOS SUPERCONDUCTORES DOPADOS COM FERRO

ANGEL BUSTAMANTE DOMINGUEZ, ROSA BERNSTEIN SCORZELLI, ELISA BAGGIO SAITOVITCH
CBPF

ALBINO DE AGUIAR, JOSÉ FERREIRA
UFPE

Compostos derivados do sistema Y-Ba-Cu-O, com sulfeto de ferro (FeS) incorporado á estrutura, foram recentemente sintetizados apresentando um comportamento supercondutor com T_c decrescendo com a concentração de FeS. Reportamos resultados obtidos por espectroscopia Mössbauer e difração de raios-x nas amostras:



A análise de raios-x mostrou que a estrutura é ortorrômbica e que os parametros de rede são similares aos do sistema Y-Ba-Cu-O. Os espectros Mössbauer á temperatura ambiente (TA) da amostra YFES10 apresentam 4 diferentes espécies de ferro, denominadas A, B, C, (típicas dos compostos não dopados) e D correspondentes a ferro em diferentes configurações locais. Similarmente, a amostra YFES15 exhibe os mesmos 4 dubletes e um desdobramento magnético que pode ser devido a aglomerados de ferro. Algumas dessas espécies também são observadas em compostos com oxianions do tipo sulfato e fosfato incorporados á estrutura. As diferentes espécies de Fe são correlacionadas com a substituição de FeS nos sitios de Cu e com as configurações de oxigênio.

PLASMA INICIADO POR ABLAÇÃO A LASER

ALVARO J. DAMIÃO, LUIZ C. M. LAVRAS, NICOLAU A. S. RODRIGUES, ROBERTO M. ANAZAWA
IEAv - CTA

SERGIO MOEHLECKE
IFGW - Unicamp

A deposição de filmes finos supercondutores, através da ablação a laser, tem trazido resultados relevantes na obtenção de altas temperaturas de transição (H_c). Existe uma grande variedade de lasers e de arranjos experimentais utilizados, mas os experimentos descritos na lit-

eratura não conseguem esclarecer por que até a simples alterações no posicionamento do substrato conduzem ou não à obtenção de filmes de H_c . Este trabalho registra fotograficamente a emissão de luz do plasma, iniciado por um sistema de evaporação a laser, durante a deposição de filmes finos cerâmicos. O plasma estava submetido a uma diferença de potencial de 3 KV. Foram registrados os mais variados passos do processo e os efeitos observados no plasma. O sistema é constituído de um laser de CO_2 - TEA, 0,5 J/pulso, focalizado em amostras de YBCO, CaCuO_2 e SrBaCuO_2 . Foram registrados fenômenos como o Regime Auto Regulado, distorções no formato do plasma causados pela emissão de aglomerados de partículas, dentre outros. A conclusão obtida é que a rotação do alvo é fundamental à obtenção de filmes de boa qualidade.

Electronic Structure of the Quaternary Superconductor $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$ and of $\text{Y}(\text{Ni}_{1-x}\text{M}_x)_2\text{B}_2\text{C}$ (M=Fe, Co, Ru)

ZENG ZHI, E. M. B. SAITOVITCH, DIANA GUENZBURGER
CBPF

D. E. ELLIS

Dep. of Phys., Northwestern Univ. USA

The Ni-based quaternary intermetallic borocarbide superconductor $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$ and transition-metal (TM) substituted $\text{Y}(\text{Ni}_{1-x}\text{M}_x)_2\text{B}_2\text{C}$ (M=Fe, Co, Ru) are analyzed using density functional embedded-cluster electronic structure calculations employing the Discrete Variational method. Clusters with 75 atoms are considered. Highly conductive TM planes, whose states predominate near the Fermi level, are stabilized by covalent bonding to B. Mixed ionic/covalent bonding character of the Y-C-B sub-lattices couples the TM to the Y 4d states, thus giving highly anisotropic transport and superconducting properties. Substitution of Ni by Fe, Co or Ru induces changes in the distribution and composition of states near the Fermi level; these are related to the variation in T_c observed experimentally for the different transition metals[1]. Partial densities of states, charge density distributions and bond orders are examined to elucidate the bonding structure and the interplay between covalent, ionic and metallic interactions in the pure and substituted compounds. Magnetic properties are also explored by performing spin-polarized calculations. Hyperfine interaction parameters are calculated at the Fe site for clusters representing $\text{Y}(\text{Ni}_{1-x}\text{Fe}_x)_2\text{B}_2\text{C}$ and compared with experimental results obtained by Mössbauer spectroscopy in the case of $x \leq 0.1$.

1. S.L. Bud'ko, M. El Massalami, M.B. Fontes, J. Mondragon, W. Vanoni, B. Giordanengo and E. M. Baggio-Saitovitch, to be published in Physica C.

**IN SEARCH FOR FAVORABLE
PREPARATION ROUTES OF THE
QUATERNARY INTERMETALLICS
RNi₂B₂C (R=Y, RARE EARTH)**

MOHAMMED EL MASSALAMI, BORIS GIORDANENGO,
ELISA MARIA BAGGIO-SAITOVICH

CBPF

MARCELO AZEVEDO NEVES, MÁXIMO FERREIRA DA
SILVEIRA

UFRJ

The new boro-carbide compounds (RNi₂B₂C, R=Y, rare earth) are promising intermetallic BCS-type superconductors. Although they showed, as yet, much lower T_c relative to the cuprate-HTc superconductors, however, they raise the expectation of possible optimization and do offer fertile research areas wherein exciting physical features can be investigated with new physico-chemical boundary conditions. One of the possible area for optimization of the physical properties of these systems is to search for favorable preparation routes. For that purposes, we have employed a wide range of thermal, optical, structural and physical characterization techniques. Here we show our preliminary results obtained from X-ray powder diffraction, differential thermal analysis, polarized optical microscopy, energy dispersive X-ray fluorescence, transport and magnetic studies on the quaternary intermetallic GdNi₂B₂C compound, as a typical example of the whole series. It is emphasized that (i) the inertness of the atmosphere used, (ii) the annealing temperature chosen and (iii) the appropriate starting stoichiometries are crucial to the degree of phase purity and consequently to the optimization of their physical properties.

**PAIR-BREAKING AND MAGNETIC
ORDERING IN THE
PSEUDO-QUATERNARY INTERMETALLIC
SERIES (Y, Gd)Ni₂B₂C**

M. EL MASSALAMI, S. L. BUD'KO, B.
GIORDANENGO, M. B. FONTES, J. C. MONDRAGON,
E. M. BAGGIO-SAITOVITCH

CBPF

A. SULPICE

CRTBT (France)

The alloying influences on the characteristic features of the superconducting and the magnetic properties of the solid-solution pseudo-quaternary intermetallic series (Gd_xY_{1-x})Ni₂B₂C (0 < x < 1) were studied in a wider temperatures and fields ranges (1.2K < T < 300K and H ≤ 80 kOe). For x < 0.25, T_c is degraded linearly with x as expected from Abrikosov-Gor'kov theory. For x > 0.25 no superconductivity is being observed. Magnetization and magnetoresistivity measurements on x = 0.22 show that the magnetic saturation is not attained for field as high as 80kOe implying that even for such a low Gd concentration, antiferromag-

netic couplings are quite strong. On the other hand, the magnetic dilution in the Heisenberg antiferromagnet GdNi₂B₂C causes a linear depression of the magnetic ordering temperatures as expected from Molecular Field Theory. The abrupt quench of superconductivity for x > 0.25 and the coexistence of superconductivity with the long range antiferromagnetic order for 0.1 < x < 0.25 are discussed.

**INTERGRANULAR CHARACTERISTICS
OF A MELT-TEXTURED YBCO SAMPLE
STUDIED BY AC SUSCEPTOMETRY**

FERNANDO MANUEL ARAÚJO MOREIRA, WILSON
AIRES ORTIZ

*Grupo de Supercondutividade e magnetismo-Departamento
de Física-UFSCar*

OSCAR FERREIRA DE LIMA

Instituto de Física Gleb Wataghin-UNICAMP

AC susceptibility measurements of granular superconductors as a function of the AC magnetic field amplitude in a fixed temperature, typically show two plateaus and two peaks in the real and imaginary parts, respectively. The first plateau is associated with the total shielding of the sample, $\chi = -1$, i.e., complete Meissner-Ochsenfeld effect. Between the first and second plateaus the magnetic flux penetrates the grain boundaries, generally a weakly-coupled superconducting material. After the second plateau the flux penetrates into the bulk of the grains when the AC magnetic field reaches the H_{c1} value of the bulk material. In this communication we show that besides grain boundaries, other type of uniform defect structure, like twin boundaries, can also produce a clear intergranular behavior in the complex susceptibility data. We have studied a melt-textured YBCO sample where extremely small intergranular volume fractions can be identified. We will

discuss these data, with values for the average critical current density and other parameters, obtained through a critical state model.

**DISTRIBUIÇÃO DE ACOPLAMENTOS
INTERGRANULARES EM POLICRISTAIS
DE YBa₂Cu₃O_{7-δ} DO TIPO SINTERIZADO E
TEXTURIZADO**

FERNANDO MANUEL ARAÚJO MOREIRA, WILSON
AIRES ORTIZ

*Grupo de Supercondutividade e Magnetismo-Departamento
de Física-UFSCar*

OSCAR FERREIRA DE LIMA

Instituto de Física Gleb Wataghin-UNICAMP

Nos supercondutores de alta temperatura crítica os efeitos derivados da granularidade são bastante realçados produzindo uma distribuição de correntes críticas nas regiões intergranulares. Esta situação é

particularmente relevante em amostras policristalinas, onde é maior a fração de regiões intergranulares. Determinamos para duas amostras de $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, uma policristalina texturizada e a outra policristalina sinterizada, as características da distribuição de correntes críticas intergranulares. Os dados foram obtidos a partir de medidas das componentes real e imaginária da suscetibilidade magnética AC, para $77 \leq T \leq 92.5$ K, $0 \leq H_{DC} \leq 520$ Oe, e para $0.124 \leq h_{AC} \leq 22$ Oe. Quantificamos as regiões de shielding completo, penetração de correntes inter e intragrão, picos de dissipação, etc, em função de H_{DC} , h_{AC} e T .

Este trabalho é parcialmente financiado pela FAPESP e CNPq.

ESTUDO DE FILMES SUPERCONDUTORES SOBRE SUBSTRATOS CERÂMICOS

CLÁUDIO LUIZ CARVALHO
UNESP-I.SOLTEIRA

DAYSE IARA DOS SANTOS, ELISABETE A. A. RUBO
UNESP-BAURU

MICHEL ANDRÉ AEGERTER
IFSC-USP

Os materiais supercondutores de alta temperatura crítica tem recebido nos últimos anos, especial atenção para a fabricação de filmes onde estes visam aplicações tecnológicas principalmente na área de eletrônica. Neste trabalho apresentamos alguns resultados do estudo de filmes espessos supercondutores utilizando o sistema BPSCCO $Bi_{1.6}Pb_{0.4}Sr_{2.0}Ca_{2.0}Cu_{3.0}O_{10}$ que tem sua temperatura crítica em torno de 110K. Medidas de resistividade elétrica, microscopia eletrônica de varredura (SEM), análise por energia dispersiva de raios-X (EDX) e difratometria de raios-X (XRD) foram utilizadas no estudo desses filmes.

INTERGRANULAR CHARACTERISTICS OF $La_{2-x}Sr_xCu_{1-y}Ni_yO_4$ SAMPLES STUDIED BY AC SUSCEPTOMETRY

PAULO NORONHA LISBOA FILHO, FERNANDO
MANUEL ARAÚJO MOREIRA, WILSON AIRES ORTIZ
Grupo de Supercondutividade e Magnetismo-Departamento
de Física-UFSCar

EDSON LEITE, ELSON LONGO
Departamento de Química-UFSCar

AC susceptibility measurements of granular superconductors as a function of the AC magnetic field amplitude in a fixed temperature, typically show two plateaus and two peaks in the real and imaginary parts, respectively. The first plateau is associated with the total shielding of the sample, $\chi' = -1$, i.e., complete Meissner-Ochsenfeld effect. Between the first and second plateau the magnetic flux penetrates the grain boundaries, generally a weakly-coupled superconduct-

ing material. After the second plateau the flux penetrates of the grain core as the AC magnetic field reaches the H_{c1} value of the bulk material. We have studied several samples of the system $La_{2-x}Sr_xCu_{1-y}Ni_yO_4$ by AC susceptibility, and applied a critical state model to obtain the theoretical fit of these experimental data. The critical current density value as a function of the composition, was then determined.

THERMAL-ELECTRIC INSTABILITY AND SWITCHING OVER EFFECT IN BULK YBaCuO BRIDGE UNDER THE ACTION OF STRONG TRANSPORT CURRENT

VLADIMIR N. MORGON

Centro de Engenharia de Materiais, Faculdade de
Engenharia Química de Lorena, Physical Department,
Kharkov State University, Ukraine

R. F. JARDIM, V. BINDILATTI, C. C. BECERRA
Instituto de Física, Universidade de São Paulo, CP20516,
CEP 1489, São Paulo, Brasil

D. RODRIGUES JR

Centro de Engenharia de Materiais, Faculdade de
Engenharia Química de Lorena, CEP 12600, Lorena, SP,
Brasil

A. V. BONDARENKO

Physical Department, Kharkov State University, 4 Svobody
Sq., Kharkov, 310077, Ukraine

A. V-SIVAKOV

Kharkov Institute for Low Temperature & Engineering, 47
Lenina av, Kharkov, 310164, Ukraine

The dynamic transition from superconductive state and back into superconductive state in to normal state the bulk crystal YBaCuO bridges with twins induced by a strong transport current has been investigated. The current-voltage characteristics (CVC), the temperature and magnetic field dependencies of resistance (resistive transition - RT) in regime of fixed direct current near by T_c were studied in detail. It was observed sharp superconductive transition of switching over effect, nonlinear-jumplike CVC and hysteresis. The CVC and RT characteristics can be explained by the thermal bistability phenomena at strong Joule self-heating of bridges [1], in particular, with the presence of internal local inhomogeneities in superconductors[2]. The system behavior looks like type I nonequilibrium phase transition where the current density is an external parameter. We obtained electrical characteristics of bridges which could be used as nonlinear elements for cryogenic electronics.

1. I. A. VI. Gurevich, R. G. Mints, Rev. of Mod. Phys., 59, 941 (1987)

2. A. I. Bezuglyj, V. A. Shklovskij, J. of Low Temp. Phys., 57, 227 (1984)

FABRICAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DE FIO SUPERCONDUTOR MULTIFILAMENTAR DE (Nb,Ta)₃Sn PARA APLICAÇÃO EM SISTEMA DE MAGNETO-HIDRODINÂMICA (MHD).

DURVAL RODRIGUES JUNIOR

Centro de Engenharia de Materiais, Faculdade de Engenharia Química de Lorena

O desenvolvimento de fios supercondutores de alto desempenho capazes de transportar altas correntes críticas I_c em campos magnéticos entre 5 e 12 tesla tem sido o grande alvo dos fabricantes internacionais. Em particular, para o projeto MHD sendo desenvolvido pelo CEMAR-FAENQUIL, a corrente crítica que otimiza o magneto supercondutor e a energia gerada no seu canal chega a valores de 250 A a 10 tesla, em condutor de 0.7 mm de diâmetro ($J_c = 650 A/mm^2$). Visando o desenvolvimento de um condutor de baixo custo com estas características e que seja fabricado através de uma tecnologia compatível com a montagem e tratamento dos magnetos supercondutores do canal MHD, foi fabricado um fio supercondutor através do método de Sn interno em tubo de Nb7.5%pTa. O condutor fabricado possui diâmetro de 0.81 mm, 271 filamentos de Nb7.5%pTa de tamanho médio de 30 μm e razão Cu/ñ Cu de 2.3. Nos tratamentos térmicos de reação procurou-se pré-difundir o Sn na liga NbTa a 200 °C e posteriormente fazer-se a reação em temperaturas entre 670 °C e 730 °C com tempos entre 25 e 150 horas. A caracterização supercondutora foi feita através de medidas de I_c versus campo magnético aplicado no intervalo de 5 a 20 T, medidas de temperatura crítica T_c e razão de resistividade residual (RRR). Além disso, foram feitos estudos de difusão do Sn e reação da fase Nb₃Sn durante os tratamentos térmicos. O fio produzido transportou correntes críticas acima dos valores comercialmente disponíveis nos campos magnéticos de interesse. Estes valores de I_c estão dentro dos intervalos pretendidos para a otimização do canal de MHD.

ESTUDO DA FORMAÇÃO DA FASE SUPERCONDUTORA $Sr_{1-x}La_xCuO_2$ EM ALTAS PRESSÕES E BAIXO TEMPO DE SINTERIZAÇÃO.

ANTONIO JEFFERSON DA SILVA MACHADO

Centro de Engenharia de Materiais, Faculdade de Engenharia Química de Lorena

SÉRGIO MOEHLECKE

Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas

Os compostos supercondutores infinite-layer dos sistemas $ACuO_2$ ($A = Sr, Ba, Ca$) apresentam alta temperatura de transição supercondutora, bem como estrutura cristalina simples, com infinitos planos de CuO_2 intercalados por ions de metais alcalinos terrosos. Recentemente foi descoberto que o composto

$Sr_{1-x}La_xCuO_2$ ($x \sim 0.1$), apresenta supercondutividade com temperatura de transição de aproximadamente 42K, de estrutura cristalina tetragonal com parâmetros de rede $a=3,95 \text{ \AA}$ e $c=3,409 \text{ \AA}$. Muito embora a estrutura destes materiais seja muito simples, estes apresentam uma série de problemas de produção, seja por sinterização sobre pressão, seja por preparação de filmes finos (todos processos fora do equilíbrio), o que estimula um estudo mais minucioso na produção destes sistemas. Neste trabalho mostraremos que o composto de estequiometria $Sr_{0,9}La_{0,1}CuO_2$, preparado sobre pressão de 15Kbar, 980 °C e 15 minutos, apresenta supercondutividade filamentar. Para tanto serão mostrados resultados de Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV), resistividade e magnetização por SQUID, que demonstrarão que o volume da fase supercondutora é muito pequena, apresentando apenas transição resistiva.

EFEITO DE FOCALIZAÇÃO EM REFLEXÕES MÚLTIPLAS DE ANDREEV

LUIZ AMÉRICO ALVES PEREIRA, ROBERTO NICOLSKY

Instituto de Física, U. F. R. J.

O presente trabalho estuda as interfaces entre supercondutores e metais normais (ou seja não supercondutores na temperatura considerada), do ponto de vista dos processos de espalhamento de quase-partículas de eletron em buraco e vice-versa, denominado espalhamento, ou reflexão, de Andreev, como é mais conhecido [1]. Nesse trabalho apresenta-se uma simulação computacional para o efeito de focalização de quase-partículas em um dispositivo que consiste em um cristal de metal normal com o depósito de uma camada de um material supercondutor [2]. As quase-partículas são injetadas no metal normal através de um contato de ponta também supercondutor, com uma dada área de contato. Na presença de um campo magnético apenas uma fração das quase-partículas refletidas na camada supercondutora atinge o contato de ponta coletor. Esta fração depende dos ângulos das velocidades de Fermi no metal normal e do valor do campo magnético aplicado. Sendo o coletor um supercondutor, as quase-partículas, por sua vez, sofrerão novas reflexões de Andreev. O valor do excesso de corrente (corrente devida às reflexões de Andreev) calculado, dependerá do valor do campo magnético aplicado e da probabilidade efetiva de ocorrência das reflexões de Andreev. Para o caso ideal essa probabilidade pode ser considerada igual à unidade, para energias de quase-partículas menores do que o potencial de pares, e zero para energias maiores. Na presença de potenciais espalhadores convencionais, a probabilidade da reflexão de Andreev passa a ser menor do que um. Em particular é feita a simulação para interfaces com diferentes velocidades de Fermi,

situação típica para supercondutores de óxido metálico com altas temperaturas críticas.

[1]-R. Kümmel, U. Günsenheimer, R. Nicolisky Phys. Rev. B 42, 3992 (1990)

[2]- P. A. M. Benistant, A. P. Gelder, H. van Kempen and P. Wyder, Phys. Rev. B 32, 3351 (1985)

SUPERCONDUCTIVITY FROM A GLOBAL ELECTROMAGNETISM

RENATO MELCHIADES DORIA, LEONARDO FOGEL
Universidade Católica de Petrópolis

A new aspect for the electromagnetic phenomena is derived through a so-called Global Electromagnetism. It is a gauge model which embraces different fields rotating under a same gauge group. It develops instructions for a global organization. There is a global action which develops a collective dynamics with coupled equations. Physics becomes described with global coefficients parametrizing field equations and with global conservation laws. The notion of environment is obtained. It is characterized by collective variables. A dynamics with puntiform and collective electromagnetic variables appear. The associated London equations are studied. They contain global parameters and fields with puntiform (as in the Maxwell case) and with environmental structures (from a global gauge theory). A treatment based on classical concepts of electromagnetism and mechanics is followed. Approximations of types as static, weak field and background are also considered. Thus a new origin for the first and second London equations based on the assumption of an environmental gauge theory is derived. The penetration depth and coherence length are expressed.

SUPERCONDUCTIVITY FROM SELFINTERACTING PHOTONS

ALEXANDRE GOMES MOSCOSO, CLAUDIA MAYER,
FLAVIO IMBERT DOMINGOS, RENATO DORIA
Universidade Católica de Petrópolis - UCP

Abelian Global Gauge Theories are proposed that accommodate a family of independent gauge potentials transforming under a single $U(1)$ symmetry. One of its phenomenological consequences is selfinteracting photons. Three and four-vertices are obtained without breaking gauge invariance. It creates a new argument for studying light nature. The properties of electromagnetic waves, diffraction, interference, emission of waves by accelerated charges, etc go beyond the laws deduced from Maxwell equations. The Meissner effect is discussed under this effect of selfinteracting photons. The corresponding differential equations are obtained. Physical field configurations are explicitly presented and the connection to superconductivity is established through the natural appearance of the Meissner effect. The penetration length in a hollow cylinder whose axis is parallel to

the magnetic flux density is explicitly calculated. The superconducting transition can also be treated using photons selfinteracting.

Supercondutividade II (SUC) - 08/06/95

$Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ CRYSTAL INTERCALATED WITH C_{60} : A MICRO - RAMAN STUDY

S. SATHAIAN, R. A. ZÂNGARO, M. T. T. PACHECO
Laboratório de Lasers e Opto-Eletrônica, UNIVAP, São José dos Campos, SP, Brasil.

L. S. GRIGORYAN, K. YAKUSHI

Department of Solid State Chemistry, IMS Okasaki, Japan.

H. C. JOSHI, H. D. BIST

Department of Physics and Centre for Laser Technology, I.I.T. Kanpur - 208016, India.

The initial $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ (Bi - 2212) single crystal (host) has been well characterized and the T_c found from magnetic measurements is around 90K. Intercalation has been carried out by keeping both Bi - 2212 and C_{60} (guest) samples in an evacuated and sealed quartz tube inside a preheated furnace at 753K. From the detailed micro-Raman analysis, a clear spectroscopic evidence for the intercalation process has been obtained. Drastic changes due to intercalation have been observed in the peak frequencies and relative intensities of the vibrational modes of the guest (at 708, 493, 270 and 1468 cm^{-1}) as well as the (ν_{Cu-O} ν_{Bi-O}) modes corresponding to oxygen atoms in CuO and BiO planes of host species. Appearance of new features around 310 cm^{-1} (ν_{Cu-O}), 480, 522, 570 & 1443 cm^{-1} ; red shift in ν_{Bi-O} ; and large red shift ($\sim 60\text{ cm}^{-1}$) & splitting ($652, 669\text{ cm}^{-1}$) in the mode at 708 cm^{-1} ; and anomalous intensity distributions of the modes at 270, 493, 652, 669 and 1468 cm^{-1} have been attributed to (a) the formation of semiconducting islands in the host environment; (b) the charge transfer and resonance effects and (c) the symmetry reduction in the guest sublattice due to intercalation process. The results have been corroborated with the previous studies on other C_{60} derivatives and Bi - 2212 intercalated compounds.

AC SUSCEPTIBILITY OF HIGH TEMPERATURE SUPERCONDUCTORS

LUIS GHIVELDER, ILDEMAN ABREGO CASTILLO

Instituto de Física - UFRJ

PAULO PUREUR

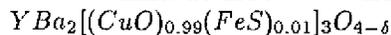
Instituto de Física - UFRGS

OSVALDO FREDERICO SCHILLING

Departamento de Física - UFSC

We report on measurements of the real and imaginary parts of the AC susceptibility, χ' and χ'' , in various superconducting systems. Results in ceramic samples of pure YBaCuO and YBaCuO-Ag composites allow a clear distinction between inter- and intra-granular transition, and probe the strength of intra-granular shielding in the superconducting materials. Cooling the samples in large superimposed DC fields, data of χ' and χ'' at fixed temperatures as a function of AC field can be described with an effective medium theory. A modified Bean critical state model is used to fit the results at low temperatures, where inter-granular contribution dominates, and a more complex set of equations is used to fit the data at higher temperatures, where intra-granular contribution has to be considered. Preliminary measurements on deoxygenated YBaCuO single crystal at different orientations and on polycrystalline BiSrCaCuO(2223) will also be presented.

Estudo da Linha de Irreversibilidade em



L. R. E. CABRAL, A. S. RAMOS, J. ALBINO AGUIAR
Departamento de Física-UFPE

O estudo do diagrama de fase campo magnético - temperatura ($H - T$) de materiais supercondutores é de grande interesse para o entendimento da dinâmica de vórtices nestes sistemas. O estudo deste diagrama $H - T$ em supercondutores de alta temperatura de transição tem revelado resultados intrigantes. Observou-se, primeiramente em cerâmicas de $LaSrCuO$ [1], a existência de uma linha de irreversibilidade e do decaimento logarítmico da magnetização remanente, estimulando o estudo destas propriedades também em outros supercondutores. Para explicar a origem destes fenômenos, são mais aceitas as seguintes interpretações: a existência de um estado vítreo supercondutor [1,7,8]; o modelo convencional de "engatinamento de fluxo" (*flux-creep*) [2,3] e a fusão das linhas de fluxo [4,5,6]. Neste trabalho apresentamos medidas de susceptibilidade *ac* e magnetização *dc* para campos magnéticos externos de até 5,0T em amostras de $YBa_2[(CuO)_{0.99}(FeS)_{0.01}]_3O_{4-\delta}$. A partir destes dados, é construído um diagrama $H - T$ e é feita uma comparação com os modelos teóricos e com dados de experimentos, obtidos em $XBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ para diferentes valores de δ [7] e $X = Y, Eu$ e Gd [8], com o objetivo de observar os efeitos das impurezas e defeitos na linha de irreversibilidade da amostra. Foram observados diferentes comportamentos do campo de irreversibilidade (H_r), no diagrama $H - T$, em função do campo aplicado. Para campos menores que 0.1T, a dependência de H_r com a temperatura é muito mais suave que a observada para valores de campo mais altos. Isto revela a possibilidade de existência de modelos teóricos distintos em diferentes valores de campo magnético.

[1] K.A. Müller, M. Takashige and J.G. Bednorz, Phys.

Rev. Lett. 58, 1143 (1987).

[2] Y. Yeshurun and A.P. Malozemoff, Phys. Rev. Lett. 60, 2202 (1988).

[3] Y. Xu and M. Suenaga, Phys. Rev. B 43, 5516 (1991).

[4] M. Suenaga, A.K. Ghosh, Youwen Xu, and D.O. Welch, Phys. Rev. Lett. 66, 1777 (1991).

[5] Matthew F. Schmidt, N.E. Israeloff, and A.M. Goldman, Phys. Rev. Lett. 70, 2162 (1993).

[6] E.H. Brandt, Phys. Rev. Lett. 63, 1106 (1989).

[7] P. Rodrigues, Jr., J. Schaf, and P. Pureur, Phys. Rev. B49, 15292 (1994).

[8] J. Schaf, P. Pureur, and J.V. Kunzler, Phys. Rev. B 40, 6948 (1989).

LINHA DE IRREVERSIBILIDADE MAGNÉTICA EM Bi(Pb)-2223

ALCIONE ROBERTO JURELO, JACOB SCHAF, PAULO
PUREUR
UFRGS

No presente trabalho realizamos um estudo sistemático da irreversibilidade magnética numa amostra de $Bi_{1.6}Pb_{0.4}Sr_2Ca_2Cu_3O_y$ em função da temperatura e do campo magnético aplicado. A amostra apresenta a fase $Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_y$ quase pura, porém, contém traços de $Bi_2Sr_2Ca_1Cu_2O_y$. Os resultados mostram dois limites de irreversibilidade no plano $H \times T$, irreversibilidade fraca e, em uma temperatura mais baixa, uma irreversibilidade forte, ambas revelando uma forte dependência com o campo. A irreversibilidade magnética ZFC-FCC se origina dos mecanismos de bloqueio dos fluxons quantizados e constitui-se num parâmetro decisivo na seleção de materiais para aplicações tecnológicas, uma vez que a capacidade de transporte de correntes elétricas depende fundamentalmente da estabilidade da rede de fluxons. Acima da linha de irreversibilidade a corrente crítica é essencialmente nula. O $Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_y$, por apresentar um T_c de 110 K, poderia parecer um bom candidato para fins de transmissão de corrente elétrica. Porém, o fato das linhas de irreversibilidade correrem rapidamente para temperaturas da ordem de 70 K com o crescimento do campo ($H = 500$ Oe) mostra que intrinsecamente a capacidade de transporte deste material é inferior à do $Y_1Ba_2Cu_3O_7$, por exemplo, cujo T_c é 93 K mas cuja linha de irreversibilidade cai pouco com o campo.

Relevance of Thermal and Quantum Fluctuations to the Irreversibility Line in a Melt-Textured YBCO Sample

O. F. DE LIMA, R. DE ANDRADE JR
Instituto de Física "Gleb Wataghin", Unicamp, 13083-970,
Campinas, SP, Brasil

The irreversibility line for a melt-textured $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (YBCO) sample was

determined in two orientations of the field H relative to the sample \hat{c} axis. In both orientations we obtain good fits using a melting equation with quantum correction to describe the Abrikosov lattice melting. The angular scaling rule for uniaxially anisotropic materials is verified, giving additional support for the melting hypothesis. The scaling analysis based on a fluctuation theory for 3D systems was applied to our magnetization data allowing the determination of the mean field critical temperature. Our results are similar to those found in the literature for very clean untwinned samples. We suggest that the Abrikosov lattice melting is weakly affected by quenched disorder, at least in the relatively low fields ($H \leq 50$ kOe) and high temperatures ($T/T_c > 0.8$) probed in this work.

This work was partially supported by FAPESP and CNPq.

SURFACE SUPERCONDUCTIVITY ON PURIFIED TANTALUM

MARCOS DE ABREU AVILA, OSCAR FERREIRA DE LIMA

Instituto de Física - UNICAMP

Surface Superconductivity is a basic phenomenon known since the early 60's, when authors such as D. Saint-James, P. de Gennes and H. J. Fink showed its manifestation within a surface layer of order $\xi(T)$, on samples with $\kappa > 0.42$. The surface critical field H_{C3} is strongly dependent on the angle θ between the sample surface and the applied field H , such that $H_{C3}(\theta = 0) = 1.695H_{C2}$ and $H_{C3}(\theta = \pi/2) = H_{C2}$. More recently (1992), O. F. de Lima found the temperature dependence of the surface magnetization, and derived an expression which describes the behavior of $h(T) = H_{C3}(T)/H_{C2}(T)$ with temperature, taking into account the limited sensitivity of any measuring instrument. In this work, we present the application of these theories to experiments on a purified Tantalum foil ($T_C = 4.4K$), of dimensions $2 \times 2 \times 0.025$ mm, using a SQUID magnetometer. $M \times T$ and $M \times H$ curves were taken with the main sample surface both parallel and perpendicular to the applied field H . Our results show a good fit of $h(T)$ data to the theoretical expression, as well as the presence of all relevant features associated with surface superconductivity. We wish to thank the financial support of FAPESP and CNPq.

FLUTUAÇÕES NA SUPERCONDUTIVIDADE EM FILMES FINOS DE NbN

MARCOS KAN MOORI, PAULO PUREUR, WIDO S. SCHREINER
UFRGS

As flutuações termodinâmicas são de difícil observação em sistemas convencionais (aqueles com baixa T_c). No entanto, sistemas com baixa dimensionalidade como filmes finos facilitam tal observação. A escolha do Nitreto de Níbio deve-se às suas interessantes propriedades (alta temperatura crítica, excelente combinação das características $\vec{J}_c - \vec{H}$ e natureza refratária) tornando-o de grande utilidade em junções SIS, SQUIDS, etc. Na primeira parte do trabalho estudou-se a preparação dos filmes de NbN utilizando Magnetron Sputtering de visando determinar os parâmetros que permitiam a obtenção de amostra com boas características. A seguir, realizaram-se medidas da resistividade em função da temperatura. A partir dos resultados obtidos passou-se, então, ao estudo das flutuações termodinâmicas da condutividade na transição normal-supercondutor dos filmes escolhidos. Tal estudo envolveu a determinação da condutividade normal, das flutuações, dos expoentes críticos e das temperaturas críticas.

Diamagnetic response of granular electron-doped superconductors*

R. F. JARDIM

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

E. A. EARLY

NIST; Bldg. 220, Rm. A-305; Gaithersburg, MD 20899, USA

M. B. MAPLE

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

D. STROUD

Department of Physics, The Ohio State University, Columbus, OH, USA

A systematic study on microstructural, transport, and magnetic properties of polycrystalline electron-doped superconductors $Ln_{2-x}Ce_xCuO_{4-y}$ ($Ln = Nd$ or Sm) reveals features of granular behavior. An insignificant diamagnetic contribution just below the critical temperature T_{ci} associated with the superconducting phase is observed for all samples studied. We also found that this feature has no counterpart in transport properties where a meaningful drop in electrical resistivity measurements at T_{ci} is always observed. The combined results suggest that grains with average size as large as $5 \mu m$ are comprised of small superconducting regions or islands coupled together by Josephson junctions, a characteristic of a granular system. The islands have a superconducting transition at the critical temperature T_{ci} and Josephson coupling completes the transition at a lower temperature T_{cj} . Particularly due to both small number and size of these superconducting regions and the divergence of the penetration depth at T_{ci} , significant diamagnetic contribution is only observed at temperatures below T_{cj} , where long range ordering devel-

ops. These features are mirrored on the behavior of the superconducting fraction which reveals a drastic decrease in applied magnetic fields as low as 10 Oe. Also, the magnetic dependence of the irreversibility temperature T_r follows an $H = H_0[1 - T_{irr}(H)/T_{ci}(0)]^m$ relationship with $m \approx 1.5$ ($H \leq 2$ kOe) for samples with different T_{ci}/T_{cj} ratio. These observations strongly suggest that the diamagnetic response of these polycrystalline electron-doped superconductors can be understood within a superconducting glass scenario.

* Work supported by the Brazilian Agency FAPESP under Grant No. 93/4204-4 and the DOE (USA) under

Grant DE-FG03-86ER-4530.

Workshop: Novos Materiais Supercondutores: Status Atual e Tendências (SUC) - 08/06/95

Materiais Supercondutores: Um Panorama Geral

O. F. DE LIMA

Instituto de Física Gleb Wataghin, Unicamp, 13083-970, Campinas, SP

Desde 1911 milhares de materiais supercondutores foram descobertos. Nos últimos oito anos o estudo de várias famílias de cupratos de alta temperatura crítica ($T_c \sim 100K$) tem dominado a área. A ocorrência de planos de CuO_2 , em estruturas fortemente anisotrópicas, é geralmente correlacionada com os altos valores de T_c e com a origem microscópica da supercondutividade. A nível fenomenológico os novos materiais de alta T_c têm um comportamento similar aos supercondutores do tipo II convencionais. Apresentam o estado de rede de vórtices, cuja dinâmica é bem descrita pela teoria de Ginzburg-Landau e onde os efeitos de flutuações térmicas e quânticas não podem ser desprezados. Nesta comunicação serão revisados alguns dos principais tópicos da pesquisa recente com os supercondutores de alta T_c , tais como: simetria (s ou d ?) da função de onda, os diferentes estados para a rede de vórtices, o diagrama H vs. T , aplicações. Exemplos da literatura para vários materiais serão apresentados e discutidos.

Produção de Óxidos Supercondutores Através de Precursores Diferentes†

R. F. JARDIM

Instituto de Física - Universidade de São Paulo - SP

Uma discussão abrangente dos métodos alternativos para a produção de amostras de óxidos supercondutores de alta temperatura crítica é apresentada. Estes métodos tem sido amplamente utilizados em substituição ao método convencional que consiste na mistura de óxidos simples e conseqüente reação de difusão no estado sólido. Destaque especial será dado aos chamados métodos químicos como a coprecipitação e sol-gel. Estes métodos são particularmente interessantes pois resultam em precursores com distribuição catiônica homogênea a nível atômico e a distribuição do tamanho de partículas pode ser convenientemente controlada na sua homogeneidade e grandeza. Adicionalmente, menores temperaturas e intervalos de tempo de sinterização são necessários para que os precursores sejam transformados nos óxidos desejados quando comparados com o método convencional. Resultados de difração de raios-X e das propriedades macroscópicas como resistividade elétrica e susceptibilidade magnética obtidos em amostras produzidas através de métodos químicos são comparados com aqueles obtidos em amostras feitas pelo método convencional. Finalmente, abordamos a produção de monocristais e filmes finos dos óxidos supercondutores de alta temperatura crítica.

† Trabalho financiado pela FAPESP (Processo No. 93/4204-4) e CNPq (Processos Nos. 304647/90-0 e 400896/93-1).

THE INFLUENCE OF THE STRUCTURAL-CHEMICAL PERTURBATIONS ON THE SUPERCONDUCTING PROPERTIES OF THE CRUPRATE HT_c COMPOUNDS AND THE QUATERNARY INTERMETALLIC BORO-CARBIDES: AN EXPERIMENTAL APPROACH

MOHAMMED EL MASSALAMI

CBPF - Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

The influence on the superconducting features of the above mentioned compounds when subjected to structural and chemical perturbations due chemical doping will be briefly sketched. These influences will be illustrated by considering three typical examples: (i) The $(L,R)_2(Cu,M)O_{4-\delta}$, (ii) $RBa_2(Cu,M)_3O_{7-\delta}$ and (iii) $R(Ni,M)_2B_2C$; where R = rare earth or Y ion; M = transition metal ion. Some examples of typical macroscopic and microscopic measuring techniques for probing the substitutional influences on the superconducting will be given. The criteria for optimizing the chemical substitution influences (such as ionic size matching, isoelectronic similarity etc...) will be discussed. For illustration purposes, we consider two limiting cases of substitutional studies: (i) magnetic doping. The low substitutional limit will be considered in terms of the Abrikosov-Gorkov model while the high-substitutional limit will be considered in terms of the influence of the prevailing magnetic ground state on the superconducting features. (ii) Non-magnetic doping. For this case two situations are considered. The case where structural phase transformation takes place and the other where the original structure is preserved and furthermore, the rigid band model is applicable. In the later, the substitutional influence is discussed in terms of its structural electronic influence on the electronic density of state.

Painéis II (SUC) - 08/06/95

PRODUÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE ÓXIDOS SUPERCONDUTORES

$Pr_{1.85}Ce_{0.15}CuO_{4-y}$.

ANTONIO DA CONCEIÇÃO, CARLOS HENRIQUE COHENCA, RENATO DE FIGUEIREDO JARDIM
IFUSP

Amostras policristalinas de $Pr_{1.85}Ce_{0.15}CuO_{4-y}$ foram produzidas à partir de três procedimentos diferentes de preparação: 1) Mistura dos óxidos simples Pr_6O_{11} , CeO_2 e CuO , 2) Mistura dos óxidos simples Pr_6O_{11} e CuO com o óxido binário $PrCeO_2$ e 3) através de precursores Sol-Gel. As amostras foram tratadas termicamente ao ar e em temperaturas inferiores à temperatura eutética $T_e \sim 1050^\circ C$. A cinética de formação da fase desejada foi acompanhada por medidas de difração de Raios-X. Estas medidas, juntamente com a determinação dos parâmetros de rede a e c , revelaram que a difusão do Ce na matriz de Pr_2CuO_{4-y} é mais efetiva nas amostras produzidas através de precursores Sol-Gel. Após a formação da fase desejada, as amostras foram submetidas a um tratamento de redução feito em atmosfera controlada de Argônio. Medidas de susceptibilidade magnética de nas amostras reduzidas revelaram propriedades supercondutoras abaixo de $T \sim 20K$.

PROPRIEDADES FÍSICAS DO $RBa_2Cu_3O_{7-y}$ PREPARADO COM UMA MISTURA DE TERRAS RARAS.

CARLOS ALBERTO MOREIRA DOS SANTOS, ANTONIO JEFFERSON DA SILVA MACHADO, KURT STRECKER, RAUL TEIXEIRA FERNANDES

Departamento de Engenharia de Materiais - FAENQUIL

Neste trabalho, nós temos realizado um estudo sistemático de comparação das propriedades físicas do $RBa_2Cu_3O_{7-y}$ com $YBa_2Cu_3O_{7-y}$, onde R é uma mistura de óxidos de terras-raras, obtida a partir da xenotima brasileira. Os processos de preparação e os métodos de caracterização tem sido efetuados sob as mesmas condições para ambos os materiais, sendo que os métodos de caracterização incluem medidas de difratometria de raios-x, microscopia ótica e eletrônica e resistividade em função da temperatura. Os resultados de difração de raios-x para as amostras de $RBa_2Cu_3O_{7-y}$ mostram somente a presença de uma fase ortorrômbica de parâmetros de rede $a = 3,897$, $b = 3,830$ e $c = 11,720$ Å, consistente com a estrutura cristalina do $YBa_2Cu_3O_{7-y}$. No que diz respeito a temperatura de transição supercondutora, ambos apresentam T_c próximo de 90K. Os autores agradecem o suporte financeiro do CNPq.

Adaptação de um espectrômetro de E.P.R. para o estudo das propriedades dos supercondutores de alta- T_c na faixa de microonda

PASCOAL J. G. PAGLIUSA, CARLOS RETTORI, SERGIO MOEHLECKE, YAKOV KOPELEVICH
Instituto de Física - UNICAMP

É de fundamental importância o estudo do comportamento das propriedades dos supercondutores de alta-

T_C na faixa de microonda. É de se esperar que efeitos de dissipação e dispersão de microonda aconteçam na transição da fase normal-supercondutor e no estado-misto, sob a influência de campo magnético externo. Para o estudo destes fenômenos foi adaptado um espectrômetro Varian de E.P.R.. Os efeitos dissipativos podem ser atribuídos a variação do fator de qualidade da cavidade ressonante (Q), ou seja, podem ser medidos pela variação do nível de potência de microonda refletida pela cavidade onde é colocada a amostra, detectada por um cristal detector. Os efeitos dispersivos podem ser atribuídos ao deslocamento da frequência da cavidade ressonante. Assim estes efeitos podem ser medidos usando-se um controle automático de frequência (AFC), que obriga o gerador de microonda (klystron) acompanhar o deslocamento da frequência de ressonância da cavidade. A frequência da klystron é medida com um freqüencímetro HP 5352B. As medidas realizadas com uma amostra policristalina de $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_{0.8}\text{Gd}_{0.2}\text{Cu}_2\text{O}_4$ (20mg e $T_C = 86\text{K}$) apresentaram um deslocamento de frequência de 1.5MHz para a transição N-S, e deslocamentos da ordem de 100kHz quando a amostra foi submetida à variação de um campo magnético externo de 0 a 10kG. (para $T < T_C$). Apresentou-se também uma dependência com a temperatura desse efeito, para $T < T_C$. A variação do nível dc registrado pelo cristal detector foi de 400mV para a transição N-S e da ordem de 40mV para o efeito com campo magnético ($H = 0$ a 10kG e $T < T_C$). Observa-se também para o efeito com campo magnético dependência com a temperatura para $T < T_C$. Todas essas medidas serão apresentadas neste trabalho.

COMPOSIÇÃO DE FASE EM CONTORNOS DE GRÃOS, PROPRIEDADES DE TRANSPORTE E APRISIONAMENTO DE FLUXO EM FIOS SUPERCONDUTORES MULTIFILAMENTARES DE Nb_3Sn .

DURVAL RODRIGUES JUNIOR, DALTRO G. PINATTI
Centro de Engenharia de Materiais, Faculdade de Engenharia Química de Lorena

CORNELIUS L. H. THIEME, SIMON FONER
Francis Bitter National Magnet Laboratory e Plasma Fusion Center, Massachusetts Institute of Technology

As atuais aplicações de fios supercondutores exigem cada vez mais altas densidades de corrente crítica J_c em altos campos magnéticos. Estas altas correntes são obtidas, em geral, através do projeto do fio supercondutor, otimização de tratamentos térmicos, introdução de elementos tais como Ta e Ti, e melhorias no aprisionamento de fluxo pelo controle de tamanho de grão e/ou introdução de centros artificiais de aprisionamento. Basicamente, existem dois fatores que podem determinar a intensidade de aprisionamento atuando sobre a rede de linhas de fluxo no Nb_3Sn : 1) a densidade volumétrica de grãos, medida através de MET, e 2) a variação de

composição das fases perto dos contornos de grãos. No presente trabalho foi utilizada uma técnica de alta resolução espacial, a Microscopia Eletrônica de Varredura e Transmissão (MEVT, ou STEM em inglês) para determinar os perfis de concentração de elementos ao longo dos grãos supercondutores em uma variedade de fios multifilamentares de Nb_3Sn , $(\text{Nb},\text{Ta})_3\text{Sn}$ e $(\text{Nb},\text{Ti})_3\text{Sn}$. Este método permitiu a determinação de concentrações com resolução espacial melhor que 2 nm. As concentrações de Sn e Cu perto dos contornos dos grãos aumentam rapidamente dos seus valores dentro dos grãos, enquanto que o Nb mostra comportamento oposto. O Ta substitui Nb mesmo próximo dos contornos e Ti substitui Nb e Sn. Os resultados são comparados com as análises de microsonda das fases supercondutoras. Visando relacionar as distribuições de concentrações de elementos com o aprisionamento de linhas de fluxo, as propriedades de transporte foram determinadas para cada uma das amostras analisadas. Foram medidas: as densidades de corrente crítica J_c em campos magnéticos aplicados entre 2 e 23 tesla, o campo magnético crítico superior B_{c2} versus temperatura, a temperatura crítica T_c e a razão de resistividade residual (RRR).

The irreversibility line in low-kappa Nb samples

O. F. DE LIMA, R. DE ANDRADE JR, M. A. AVILA
Instituto de Física "Gleb Wataghin", Unicamp, 13083-970, Campinas, SP, Brasil

The existence of an irreversibility line (IL), that separates a magnetically irreversible from a reversible state in the $H \times T$ plane, is a very well documented experimental fact for the high T_c as well as for some low T_c superconductors. However, the physical interpretation for these lines still remains controversial in many cases. This communication presents data obtained with a SQUID magnetometer for two samples: 1) A small sphere ($r = 3\text{mm}$) of high purity Nb ($T_c \approx 9.13\text{K}$, $\kappa = \lambda/\xi \approx 1.5$), and 2) A Nb-O powder, pressed into a cylindrical shape and embedded with epoxy resin. This sample consists of a solid solution of $\sim 1.55\text{at}\% \text{O}$ with a depressed $T_c \approx 7.66\text{K}$ and $\kappa \approx 6.5$. In both cases the melting equation due to Houghthon et al. (Phys. Rev. B 40, 6763 (1989)) gave good fits for the measured IL's. However, the calculated Lindemann numbers are unrealistically small, $c_L \approx 0.0012$ for Nb and $c_L \approx 0.026$ for Nb-O. We also obtain very good fits using a power law equation of the type $B_d = C(1 - T/T_c)^n$, where the exponent "n" can be related to the pinning strength through the phenomenological expression which describes the critical current at low temperatures and fields, $J_{c0}(B, T) \approx AB_{c2}^2(T)B^{\beta-1}$, such that $n = 2\tau/(3 - 2\beta)$ (T. Matsushita et al., Appl. Phys. Lett. 56, 2039 (1990)). This latter approach is based on the thermally activated depinning of the Abrikosov lattice and seems to provide a better explanation for

our data.

This work was partially supported by FAPESP and CNPq.

**CHARACTERIZATION AND
PHOTOLUMINESCENCE STUDIES OF C_{60}
INTERCALATED $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ SINGLE
CRYSTAL**

S. SATHAIAH, R. A. ZÂNGARO, MARCOS TADEU T.
PACHECO

*Lab. de Laser e Opto-Eletrônica, Universidade do Vale do
Paraíba, São José dos Campos*

L. S. GRIGORYAN, K. YAKUSHI

Department of Solid State Chemistry, IMS Okazaki, Japan

The detailed photoluminescence (PL), SEM, STM/STS and infrared measurements on C_{60} intercalated $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ sample (Bi-2212- C_{60}) have been carried out. It has been found that the intercalation drastically changes the vibrational, electronic and structural characteristics of both the C_{60} (guest) and $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ (host) species. STM images show that the guest species are distorted but intercalated in close proximity of each other between the Bi-O layers of the host sublattice. The overall resistivity of the sample increased due to intercalation. The prominent PL band corresponding to the guest species exhibited a large blue shift (200 to 500 cm^{-1}) compared to the PL position ($13,300\text{ cm}^{-1}$) in pristine C_{60} solid. Further, the PL band became weaker (to the extent of disappearance at most of the spots on Bi-2212- C_{60}) in it's intensity; and the new prominent PL bands appeared around $11,810$ & $10,700\text{ cm}^{-1}$. Additionally, a sharp & strong PL band appeared at $16,500\text{ cm}^{-1}$ at a few selected spots on the intercalated sample. Appearance of these new strong features is very much similar to the changes observed in the PL of C_{60} in hexane solution under different excitation wavelenghts and can be related to the distortion in the molecular structure due to intercalation. The results have been corroborated with micro-Raman data on Bi-2212- C_{60} sample.

**EFEITO DO OXIGÊNIO ISOTÓPICO NOS
MODOS VIBRACIONAIS DO COMPOSTO**

$Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$

AIRTON A. MARTIN, JOSÉ ANTONIO SANJURJO
IFGW-UNICAMP

MARTIN J. G. LEE

University of Toronto -Canada

O efeito da substituição isotópico do oxigenio O^{16} por O^{18} foi estudado em monocristais de supercondutores de alta temperatura crítica $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ por espectroscopia Raman. Foi encontrado que o deslocamento isotópico relativo de todos os modos vibracionais podem ser classificados em três diferentes grupos. A ausência de um deslocamento isotópico significativo

para certos modos indica que eles correspondem a modos normais de vibração que são dominados pelo movimento de cátions (picos com frequências abaixo de 181 cm^{-1}), ou que eles envolvem a vibração de oxigênios em sítios onde a troca isotópica procede extremamente lenta (picos a 310 cm^{-1} e 661 cm^{-1}). Os resultados do deslocamento isotópico fornece forte evidência de que, contrario as identificações anteriores, os picos A_{1g} a 287 cm^{-1} e 350 cm^{-1} correspondem a modos vibracionais dos átomos de oxigênio na camada de cobre. Deslocamentos isotópicos maiores suportam a identificação do pico a 386 cm^{-1} como sendo resultado da vibração dos átomos de oxigênio ao longo do eixo a, na camada de estrôncio e do pico a 458 cm^{-1} como sendo devido a vibração dos mesmos átomos ao longo do do eixo c. Estas identificações estão em controversia com prévias sugestões de que o pico a 458 cm^{-1} corresponde ao modo vibracional dos átomos de oxigênio na camada de cobre.

**PREPARATION AND
CRISTALLOGRAPHIC
CHARACTERIZATION OF
 $La_{2-x}Sr_xCu_{1-y}Ni_yO_{4+\delta}$ SUPERCONDUCTING
SAMPLES**

PAULO NORONHA LISBOA FILHO, FERNANDO
MANUEL ARAÚJO MOREIRA, WILSON AIRES ORTIZ
Depto. de Física Universidade Federal de São Carlos

EDSON LEITE, ELSON LONGO

Depto. de Química Universidade Federal de São Carlos

Superconducting samples of $La_{2-x}Sr_xCu_{1-y}Ni_yO_{4+\delta}$ were prepared with $0 \leq x \leq 0.15$ and $0 \leq y \leq 0.05$ using the standard ceramic technique. The starting materials in stoichiometric ratios were mixed for 24 h in isopropilic alcohol and heated in a crucible of Al_2O_3 in air at $900^\circ C$ for 8 h. The resulting powder was then pressed and sintered in air at $1200^\circ C$ for 8 h. Studies of X-ray diffraction (XRD) have shown that all the samples are single phase with tetragonal structure at room temperature. The results also showed that the addition of Sr^{+2} and Ni^{+2} changed the lattice parameters of La_2CuO_4 . Besides XRD data, Scanning Electron Microscopy results will be also presented.

**ESTUDO DA ABSORÇÃO DE
RÁDIOFREQUÊNCIA EM FUNÇÃO DAS
DISTÂNCIAS INTERGRANULARES EM
PÓS SUPERCONDUTORES A ALTA
TEMPERATURA.**

FLÁVIO AMBRÓSIO CAMPOS, GEORGE CAJATY
BARBOSA BRAGA, ADERBAL CARLOS DE OLIVEIRA
Departamento de Física Universidade de Brasília.

Após o descobrimento dos supercondutores de alta temperatura, o estudo da absorção de rádio frequência tem sido de grande importância para a caracterização

dos mesmos. As amostras utilizadas são compostas de grãos supercondutores (YBaCuO) de 2 microns. Utilizaremos também pó de Alumina de 2 microns para efetuar misturas. Neste trabalho, fazendo uso de um oscilador Robinson, obteremos a curva de absorção de rádio-frequência em função da temperatura ao utilizarmos um campo de modulação muito menor que o campo crítico. Essa curva tem as seguintes características: o seu máximo ser na temperatura crítica; a largura do pico é a mesma da transição e a amplitude do sinal é independente da frequência. As curvas de susceptibilidade magnética, tanto a parte real quanto a imaginária, obtidas também em função da temperatura, servem para o estudo da transição e nos trarão informações sobre a qualidade da amostra. Além disso, encontraremos a curva de profundidade de penetração em função da temperatura. O nosso estudo tem como objetivo principal a comparação dos resultados obtidos em função da compactação dos grãos supercondutores e também em função das misturas dos grãos com a Alumina.

EFFECT OF Ni - SITE SUBSTITUTION ON SUPERCONDUCTING PROPERTIES OF

YNi_2B_2C .

S. L. BUD'KO, M. EL MASSALAMI, M. B. FONTES, W. VANONI, J. C. MONDRAGON, B. GIORDANENGO, E. M. BAGGIO-SAITOVITCH

CBPF

We report X - ray diffraction, dc resistivity and ac susceptibility measurements in the recently discovered class of intermetallic superconducting $Y(Ni_{1-x}TM_x)_2B_2C$ ($TM = Co, Fe, Ru, x \leq 0.1$) series of quaternary borocarbides with the elevated superconducting transition temperature ($T_{c,max} = 16.6$ K). The substitution causes practically linear decrease of superconducting transition temperature T_c with the decrease rate dT_c/dx depending of the number of the d electrons in the transition metal Z and, finally, the disappearance of superconductivity. The changes observed in all studied series are argued to be mainly due to the change of the density of states on the Fermi level caused by the different filling of the d - bands. Results are compared with the band structure calculations for the borocarbides. The chemical pressure effect and the effect of the decrease of the mean free path give minor contribution to the observed behavior.

ESTUDO DA ABSORÇÃO DE RÁDIO FREQÜÊNCIA E SUSCEPTIBILIDADE MAGNÉTICA EM FILMES FINOS SUPERCONDUTORES A ALTA TEMPERATURA.

GEORGE CAJATY BARBOSA BRAGA, FLÁVIO AMBRÓSIO CAMPOS, ADERBAL CARLOS DE OLIVEIRA

Departamento de Física Universidade de Brasília.

Após o descobrimento dos supercondutores de alta temperatura, o estudo da absorção de rádio frequência bem como da susceptibilidade magnética, tem sido de grande importância para a caracterização dos mesmos. As amostras utilizadas são compostas de YBaCuO depositadas em substratos de LaAlO₃ e também de MgO. Neste trabalho, utilizando-se de um oscilador Robinson, encontraremos esses resultados com grande precisão. Obteremos a curva de absorção de rádio frequência em função da temperatura ao utilizarmos um campo de modulação muito menor que o campo crítico. Essa curva tem as seguintes características: o seu máximo ser na temperatura crítica; a largura do pico é a mesma da transição e a amplitude do sinal é independente da frequência. As curvas de susceptibilidade magnética, tanto a parte real quanto a imaginária, obtidas também em função da temperatura servem para o estudo da transição e nos trarão informações sobre a qualidade da amostra. O nosso estudo está baseado na comparação dos resultados obtidos em função da espessura das amostras bem como dos diferentes substratos.

DIFFERENT Pr³⁺ ENVIRONMENTS IN Pr_{1.85}Ce_{0.15}CuO₄: A RAMAN CRYSTAL-FIELD EXCITATION STUDY

J. A. SANJURJO, G. B. MARTINS, P. G. PAGLIUSO, E. GRANADO, I. TORRIANI, C. RETTORI

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

S. OSEROFF

San Diego State University, San Diego, California

Z. FISK

Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico

Crystal-field (CF) studies in high-temperature superconductors (HTS's) are extremely interesting, particularly for Ln₂CuO₄ (Ln = La, Pr, Nd) compounds, in which superconductivity is induced by a doping process. In the La-based compounds a divalent dopant (Sr²⁺ or Ba²⁺) oxidizes the CuO₂ planes, leaving holes as supercurrent carriers. In contrast, doping of the Nd and Pr-based compounds with tetravalent Ce or Th reduces the CuO₂ planes, giving rise to electron carriers. The effective charge in the CuO₂ planes, seen by the rare earth (R) via the CF electrical potential, may be strongly affected by the doping process, and experiments sensitive to CF effects should detect the induced changes. Results of inelastic neutron-scattering (INS) experiments in the electron doped compounds Ln_{2-x}Ce_xCuO₄ (Ln = Nd, Pr) and their parent compounds (x = 0) have been reported by several groups. Although there is agreement on the observed CF spectra, analysis of the data leads to different sets of CF parameters. Here we report on Raman CF excitations in the electron-doped (n-type) Pr_{1.85}Ce_{0.15}CuO₄. The Raman data

were taken between 10 K and 293 K. The samples were platelike single crystals of $\text{Pr}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_4$ having their c axis perpendicular to the large face. For comparison with the single crystal data, polycrystalline samples of $\text{Pr}_{1.85}\text{R}_{0.15}\text{CuO}_4$ ($\text{R} = \text{Ce, Th, La}$ and Y) were also studied by X-Ray diffraction. The lattice constants were calculated from the experimental data using a Rietveld profile refinement program. A tetragonal unit cell with atomic positions of the T structure (SG $I4/mmm$) was used for the calculations. CNPq.

INTERGRANULAR CRITICAL CURRENT DENSITY OF SINTERED AND MELT-TEXTURED SAMPLES OF YBCO AS DETERMINED FROM AN EXPONENTIAL CRITICAL STATE MODEL

FERNANDO MANUEL ARAÚJO MOREIRA, WILSON AIRES ORTIZ

Grupo de Supercondutividade e Magnetismo-Departamento de Física-UFSCar

OSCAR FERREIRA DE LIMA

Instituto de Física Gleb Wataghin-UNICAMP

In high- T_c superconductors, effects due to granularity are highly enhanced, producing a distribution of critical currents in the intergranular regions. In these sintered superconductors, detailed AC-susceptibility measurements, determined either as a function of temperature or AC-field amplitude, h , typically show two drops in the real component, χ' , and two corresponding peaks in the imaginary component, χ'' . These features are naturally dependent on the sample quality. In order to interpret AC-susceptibility data of high- T_c superconductor oxides, we have used a critical state model where the sample is regarded as consisting of superconducting grains with high H_{c1} embedded in a normal or weakly-coupled superconducting matrix. We obtain the intergranular critical current density from AC-susceptibility data based on an exponential critical state model which assumes $J_c(H) = J_0 \exp(-H/H_0)$. Several computer simulations of $M(h)$, $\chi'(h)$ and $\chi''(h)$ have been performed by varying the parameters of the model. The method was employed to study two $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ polycrystalline samples, one sintered and the other melt-textured. The exponential critical state model was fitted to our low-field AC-susceptibility data, producing very satisfactory results for the calculated critical current density and other parameters related to the sample quality. These results will be discussed and compared with the current literature. This work was partially supported by FAPESP and CNPq.

MAGNETIZATION AND AC SUSCEPTIBILITY CHARACTERIZATION OF $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{Cu}_{1-y}\text{Ni}_y\text{O}_4$

SUPERCONDUCTING SAMPLES

PAULO NORONHA LISBOA FILHO, FERNANDO MANUEL ARAÚJO MOREIRA, WILSON AIRES ORTIZ
Grupo de Supercondutividade e Magnetismo-Departamento de Física-UFSCar

EDSON LEITE, ELSON LONGO
Departamento de Química-UFSCar

In sintered superconductors, AC susceptibility measurements as a function of temperature or AC field amplitude, h_{AC} , typically show two drops in the real component, χ' , and two corresponding peaks in the imaginary component, χ'' . The general features of these drops and peaks are strongly dependent on the sample quality. We obtain the magnetization and AC susceptibility curves for several samples of the system $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{Cu}_{1-y}\text{Ni}_y\text{O}_4$. The experimental data were obtained as a function of the temperature ($4.2 \leq T \leq 150\text{K}$), the applied magnetic field ($0 \leq H_{DC} \leq 8\text{T}$) and the exciting magnetic field ($0 \leq h_{AC} \leq 25\text{Oe}$). The susceptibility data were obtained by using a very sensitive susceptometer, and the magnetization data were determined with a vibrating sample magnetometer. This work was partially supported by CAPES, FAPESP and CNPq.

PREPARAÇÃO DE AMOSTRAS TEXTURIZADAS DE BSCCO PELO MÉTODO DE CRISTALIZAÇÃO A PARTIR DO AMORFO. CARACTERIZAÇÃO ESTRUTURAL E MAGNÉTICA

WAGNER DE ASSIS CANGUSSU PASSOS, FERNANDO MANUEL ARAÚJO MOREIRA, WILSON AIRES ORTIZ
Grupo de Supercondutividade e Magnetismo-Departamento de Física-UFSCar

EDSON LEITE, ELSON LONGO
Departamento de Química-UFSCar

A técnica de preparação de cerâmicas supercondutoras de alta temperatura (HTSC), através do processo gel-citrato oferece, em comparação com outras técnicas, um grande número de vantagens. É muito clara a necessidade de que os pós dos óxidos supercondutores sejam o mais homogêneos e puros possível. Este processo é assim utilizado para se evitar as dificuldades experimentais e a não-homogeneidade associadas com os processos convencionais. Neste método, a homogeneidade da solução líquida é retida num gel amorfo. Na pirólise subsequente, este gel fornece diretamente o óxido procurado na estequiometria certa. Os HTCS do tipo BSCCO são reconhecidos como materiais com enorme potencial para aplicações tecnológicas em função do seu possível uso em temperaturas superiores a do nitrogênio líquido. Através do processo gel-citrato, foram preparadas amostras dos tipos policristal sinterizado e policristal texturizado. A caracterização estrutural foi realizada através de difração de raios-x (XRD)

e microscopia eletrônica de varredura (SEM). A caracterização magnética foi realizada através de suscetometria AC como função da temperatura ($77 \leq T \leq 150\text{K}$), do campo externo ($0 \leq H_{DC} \leq 520\text{Oe}$) e do campo de excitação ($0 \leq h_{AC} \leq 22\text{Oe}$).

Este trabalho é parcialmente financiado pela FAPESP, CAPES e CNPq.

CRITICAL CURRENTS, VORTEX PINNING AND DYNAMICS IN YBaCuO SINGLE CRYSTALS WITH UNIDIRECTIONAL TWINS IN HIGH MAGNETIC FIELDS

VLADIMIR N. MORGOON

Centro de Engenharia de Materiais, Faculdade de Engenharia Química de Lorena, Physical Department, Kharkov State University, Ukraine

V. BINDILATTI

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, CP20516, CEP 1489, São Paulo, Brasil

A. V. BONDARENKO

Physical Department, Kharkov State University, 4 Svobody Sq., Kharkov, 310077, Ukraine

To date there are a lot of experiments which indicate strong vortex pinning by twin boundaries (TBs) [1,2]. The vortex pinning by TBs theoretically was investigated by Blatter et al [3]. The aim of the present report is investigation of phase state and dissipation of vortex system in YBaCuO single crystals with unidirectional twins using resistivity data. We have measured resistive transitions (RT), current-voltage characteristics (CVC) and critical currents I_c as function of temperature (T) and magnetic field (B) for two single crystals having unidirectional twins oriented under 90° (SI) and 45° (SII) with respect to transport current vector $I \parallel ab$ in presence of external magnetic field $B \parallel c$ up to 10T ($T_c=92\text{K}$). We have obtained temperature dependencies of I_c and compared with our previous data in low magnetic fields [2]. Critical current measured at the same values of temperature T/T_c and magnetic field B for SII was 3 times more than for SI. Obviously, this fact is connected with twins vortex pinning. It is supposed that above T_{sh} (where T_{sh} is downturn temperature for RT) an unpinned vortex fluid exists and below T_{irr} (where T_{irr} is the irreversibility line temperature) a vortex lattice or vortex glass phase exists. (here $T_{irr} \ll T_{sh} \ll T_c$). For sample SI at $B=8\text{T}$ the temperature T_{sh} is 79K, the temperature T_{irr} is 73K. Between T_{irr} and T_{sh} it is very plausible the existence of specially inhomogeneous vortex state: solid-in the vicinity of twins and liquid - far from twin planes.

1. Steven Flesher, Wai-Kwong Kwok et al Phys. Rev. B, 42, N21, p.14448, (1993)

2. A.V. Bondarenko, M.A. Obolenskij et al, Proceed-

ings of VII International Workshop on Critical Currents in Superconductors, P1-28, Austria (January, 1994)

3. G. Blatter, J. Rhyner, V.M. Vinokur, Phys. Rev., B43, 7826, (1991) 7460 Ge

DETERMINAÇÃO DA DIFUSIVIDADE TÉRMICA DE FILME FINO SUPERCONDUTOR YBaCuO, UTILIZANDO-SE A TÉCNICA DE FOTOACÚSTICA

DRÁULIO BARROS DE ARAÚJO, ADERBAL CARLOS DE OLIVEIRA

Universidade de Brasília

Neste trabalho estudou-se amostras de filmes finos supercondutores cerâmicos YBaCuO de alta temperatura. A preocupação básica foi a determinação da difusividade térmica, através da utilização da técnica de fotoacústica, em temperatura ambiente. Tem-se o efeito fotoacústico quando uma luz pulsada, ou qualquer outra forma de irradiação eletromagnética, incide sobre a superfície de uma amostra confinada em uma câmara fechada. Nessa técnica trabalhou-se com uma célula de câmara dupla envolta por um cilindro atenuador de ruídos, iluminando-se a amostra com luz monocromática. As amostras de filme fino supercondutor cerâmico YBaCuO foram depositadas em dois tipos de substrato. O primeiro de LaAlO_3 e o segundo de LaAgO . As medidas foram realizadas em função da espessura das amostras assim como dos substratos em que elas foram depositadas. Das mesmas amostras foram determinadas, através da utilização de um espectrômetro Robinson, suas características magnéticas: susceptibilidade magnética real, susceptibilidade magnética imaginária e absorção de rádio frequência em função da temperatura.

FLUTUAÇÕES NA CONDUTIVIDADE ELÉTRICA E GRANULARIDADE MICROSCÓPICA EM Bi(Pb)-2223 E Bi(Pb)-2212.

ALCIONE ROBERTO JURELO, PAULO PUREUR, JULIO VITOR KUNZLER

UFRGS

JORGE ROSENBLATT

LABORATOIRE DE PHYSIQUE DES SOLIDES - RENNES (FRANCE)

Nesta comunicação são apresentados resultados detalhados de condutividade elétrica em amostras policristalinas dos compostos supercondutores $\text{Bi(Pb)}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10+x}$ e $\text{Bi(Pb)}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_1\text{Cu}_2\text{O}_{8+y}$. Estes sistemas apresentam temperaturas críticas de 110 K e 80 K, respectivamente. As medidas de condutivi-

dade são realizadas em função da temperatura com grande precisão experimental, de modo a permitir o estudo das contribuições relacionadas às flutuações termodinâmicas nas proximidades de T_c . O método de análise dos resultados é baseado na determinação numérica da derivada logarítmica da condutividade e permite a obtenção gráfica direta dos expoentes críticos e temperaturas críticas. Os resultados mostram de forma clara que a transição resistiva é um processo a duas etapas. Bem acima de T_c , a condutividade é dominada por flutuações da amplitude do parâmetro de ordem. Trata-se, pois, de processos intragranulares. São identificados largos regimes dominados por flutuações gaussianas de baixa dimensionalidade. Nas proximidades imediatas de T_c é inequivocamente observado, em ambos os sistemas, um regime genuinamente crítico com expoente igual a 3. Este expoente é típico de sistemas granulares e resulta de flutuações na fase do parâmetro de ordem. A observação de um tal regime acima de T_c é interpretada como resultante de granularidade em escala microscópica. Este conceito, recentemente introduzido por J. Rosenblatt, associa o comportamento tipo granular das propriedades intracristalito com as flutuações locais da temperatura crítica causadas por defeitos microscópicos, tais como vacâncias de oxigênio. Abaixo de T_c , a aproximação ao estado de resistência nula é descrita por leis de potência características dos regimes granulares. Em especial, o expoente 3 é novamente observado em largos intervalos de temperatura reduzida. Esta transição, do tipo paracoerente-coerente, resulta de um processo do tipo percolativo em que um cluster infinito é obtido por ativação térmica de junções fracas entre grãos metalúrgicos. A observação de efeitos de granularidade tanto em escala intracristalito quanto intercristalito indica uma certa natureza auto-similar da estrutura de defeitos das nossas amostras policristalinas.

Supercondutividade III (SUC) – 09/06/95

A BCS THEORY FOR AN EXTENDED 2D HUBBARD MODEL

EVANDRO VIDOR LINS DE MELLO
UFF

This work is an attempt to derive a two-dimensional BCS-like theory for high T_c superconductors using as basic objects closed spaced real hole (or electrons) pairs, with the same structure of Cooper pairs, i.e., with zero center of mass momentum. Based on earlier band structure studies, we discuss first the case of two holes de-

scribed by an extended Hubbard model with an on-site repulsion and an attractive first-neighbor potential. The Fourier transformation of such potential is used in a many-electrons BCS momenta space theory. This approach allows us to study the variation of the critical temperature upon doping and a comparison with the measured experimental phase diagram is presented.

Vertex Function of a Strongly Interacting Electron-Hole Pair Near the Fermi Surface

S. L. GARAVELLI, A. FERRAZ, J. A. HENDERSON
International Centre of Condensed Matter Physics - UnB
Y. OHMURA
Tokyo Institute of Technology

It is a well known fact that the existing high temperature cuprates superconductors have an anomalous metallic behaviour above T_c . This has led to a number of conjectures concerning the electronic nature of the normal phase of this material. The majority of these speculations seem to agree in one point at the least. They are all poor metals above T_c and both their quasiparticle and their Fermi surfaces are not so well defined as one might expect. It is therefore most likely that they don't form a Fermi liquid state in this regime. It is reasonable to expect that this anomalous behaviour is associated with a new electronic mechanism which induces the transition to the high temperature superconducting phase at $T = T_c$. For this reason it is important to consider models for strongly interacting electron which are valid beyond the Fermi liquid regime. In this work we calculate and compare all the second and third-order diagrams of the irreducible part K of the electron-hole scattering function for strongly interacting particles near the Fermi surface. We show that the exchange ladder diagrams for K are indeed the most singular diagrams up to this order of perturbation theory in the proximity of the Fermi surface. From this result emerges a new low energy scale parameter and a new effective coupling constant associated with the strongly interacting regime. The summation of exchange ladder diagrams to infinite order produces a purely imaginary pole in K . As a result the vertex function Γ diverges and the Fermi liquid becomes unstable in this strongly interacting regime.

Supercondutividade Longitudinal em Fases de Linhas de Vórtices

GILSON CARNEIRO
Instituto de Física-UFRRJ

A simetria translacional e as propriedades supercondutoras de fases de linhas de vórtices em supercondutores com estrutura em camadas, sem ancoramento, colocados em um campo magnético externo, perpendicular às camadas, são investigadas por simulações Monte Carlo

de um modelo de London na rede. Os resultados apresentados permitem elucidar se a ordem translacional e a supercondutividade longitudinal, que existem quando as linhas de vórtice formam uma rede, são destruídas simultaneamente na linha de fusão da rede, ou sequencialmente, em duas transições de fase distintas.

TRANSIÇÃO METAL-ISOLANTE EM FULLERENOS DOPADOS COM METAIS

ALCALINOS

R. MOTA, J. C. CECHIN

UFSM

S. CANUTO, A. FAZZIO

USP

Estudamos a ocorrência de caráter metálico em sistemas dopados com potássio e a não ocorrência em sistemas dopados com sódio. Um modelo Hubbard triplamente degenerado na aproximação Gutzwiller, previamente apresentado por Jian Ping Lu, é utilizado para discutir as transições metal-isolante observadas em fullerenos dopados com metais alcalinos. Os parâmetros utilizados são derivados de cálculos INDO na abordagem de "cluster" molecular.

MODOS DE PLASMA EM FILMES FINOS SUPERCONDUTORES

O. BUISSON

Centres de Recherches sur les Très Basses Températures, CNRS, France

MAURO M. DORIA

UFF

GILBERTO HOLLAUER

PUC-Rio

A propagação de modos de plasma em supercondutores de baixa dimensionalidade é estudada, pois tais modos se tri-dimensionais, possuem frequência da ordem de $10^{15} Hz$, muito superior aquela do hiato supercondutor. Tais modos foram recentemente observados (O. Buisson et al., Phys. Rev. Lett. **73**, 3153 (1994)) em um filme fino de alumínio granular, na faixa entre 100 MHz a 1 GHz. As condições especiais que permitem ao filme supercondutor, uma frequência de modos plasma muito abaixo do seu hiato supercondutor ($10^{12} Hz$) são uma densidade superficial de elétrons supercondutores, n_s , extremamente baixa ($n_s \sim 10^{17} m^{-2}$) e um substrato ($SrTiO_3$), onde o filme é crescido, com uma constante dielétrica extremamente elevada, ($\epsilon_r \approx 10^4$ para temperaturas abaixo de 4K). A maneira mais simples de analisar teoricamente os modos de plasma observados é

no contexto da teoria de London e de Pippard, aplicada a geometria do problema, ou seja, um filme supercondutor com uma certa espessura cercado por dois meios dielétricos. A partir de um tratamento das equações de Maxwell nos meios dielétrico e das equações de London e Pippard no filme supercondutor é possível deduzir a relação de dispersão observada experimentalmente, $\omega_p^2 \sim \frac{n_s(2e)^2}{m\epsilon_0\epsilon_r} k$.

DINÂMICA DE UMA RÊDE DE JUNÇÕES JOSEPHSON ANISOTRÓPICA COM $f = 1/2$ QUANTUM DE FLUXO MAGNÉTICO

ENZO GRANATO

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais

São estudadas as propriedades dinâmicas de uma rede de junções Josephson anisotrópica em um campo magnético equivalente a $f = 1/2$ quantum de fluxo. A anisotropia consiste em junções de acoplamentos desiguais em colunas alternadas da rede que diferem por um fator η . Obteve-se a dependência com a temperatura do expoente a do comportamento não linear corrente \times tensão, $V = I^a$, usando-se dinâmica de Monte Carlo. Os resultados apresentam uma dependência com a anisotropia η e com a direção da corrente aplicada. Em particular, o início do comportamento linear, $a = 1$, ocorre na transição do tipo Ising predita para esse sistema.

The Wohlleben (Paramagnetic Meissner) Effect In High-Temperature Superconductors

H. MICKLITZ

II. Physikalisches Institut, Universität zu Köln, Germany

A new quite surprising effect recently was discovered in high-temperature superconductors based on the cuprates: the diamagnetic Meissner effect (complete magnetic field repulsion) - one of the characteristic features of the superconducting state - turns out to become a paramagnetic Meissner effect if the samples are field cooled in very weak magnetic fields ($H \leq 10e$). This effect which for the first time was systematically studied at the University of Cologne under the guidance of the late Dieter Wohlleben [1] and which has been established in the meantime in many other laboratories is nowadays called the Wohlleben Effect (WE) as proposed by Sigrist and Rice [2]. Recent experimental data will be presented which show that the WE can be found not only in ceramic samples but also in small ($\approx 1\mu m$) isolated grains of Bi-2212. Transmission

electron microscopy studies of such grains show a polycrystalline microstructure on length scales smaller than $1\mu m$ [3]. Moreover, we find that the boundaries between different oriented single crystalline regions are extremely sharp. The WE usually is explained by the formation of spontaneous currents in so-called π -loops, i.e. current loops with an odd number of Josephson π -junctions. Due to the *intrinsic* nature of these spontaneous currents, it is tempting to interpret the phase shift occurring at these π -junctions as caused by a phase shift of the order parameter between different oriented

d-wave superconductors [2].

[1] W. Braunisch et. al., Phys. Rev. Lett. 68, 1908 (1992)

[2] M. Sigrist and T.M. Rice, J. Phys. Soc. Jpn. 61, 4283(1992)

[3] J.N. Knauf, J. Fischer, R. Borowski, B. Freitag, A. Freimuth, B. Büchner, H. Micklitz, V. Kataev and D.I. Khomskii, to be published.

SUPERFÍCIES E FILMES FINOS

Workshop: Síncrotron em Superfícies (SUF) –
07/06/95

Materials Science Research Utilizing Synchrotron Radiation

J. L. ERSKINE

Department of Physics, University of Texas at Austin, Austin, Texas 78712

The opportunities to apply synchrotron radiation in research on materials continue to expand as proven experimental techniques are refined and new techniques are developed. This lecture will focus on an important subset of materials which exhibit strongly correlated electron behavior (magnetic materials, high-temperature superconductors, and heavy fermion systems) in relation to plans by a group of collaborators to develop beamlines at the Center for Microstructures and Devices (CAMD), a new regional synchrotron radiation facility in Baton Rouge, Louisiana. Topics to be covered include scientific issues that can be addressed using synchrotron radiation based spin-polarized photoemission, magnetic circular dichroism, and ultra-high resolution (2 meV) angle-resolved photoemission spectroscopy. Recent technological advances and certain features of the CAMD facility lead to novel strategies for achieving new performance levels in synchrotron radiation based techniques applied to the strongly correlated materials systems that serve as a focus for this presentation. Prior work and the future scientific agenda includes studies of spin-polarized core-levels in magnetic materials, probes of magnetic quantum well states in thin film multilayers, ultra-high resolution photoemission studies of high-TC and heavy Fermion materials and magnetic thin films.

A COORDINATED STUDY OF THE PHYSICAL AND ELECTRONIC STRUCTURE OF CuPd ALLOYS USING SYNCHROTRON RADIATION

P. WEIGHTMAN

Physics Department and IRC in Surface Science - University of Liverpool

The CuPd alloy system is at the forefront of attempts to understand the physical and electronic structure of alloys from first principles and is currently a focus of controversy. A brief review will be given of the contribution that studies employing synchrotron radiation have made to our current understanding of this alloy system. In particular it will be shown how uv photoemission at the Cooper minimum together with Auger spectroscopy has revealed discrepancies between the experimental results for the d band density of states and the results of state of the art first principles calculations of the electronic structure of these alloys. EXAFS studies have given an important insight into the local physical structure of these alloys revealing local expansions around Pd impurity sites in Cu and deviations from the results of Vegard's law in concentrated alloys. It will be argued that these local expansions of the crystal structure are responsible for the discrepancies between experimental and theoretical results for the d band densities of states. Finally an account will be given of recent studies of the physical and electronic structure of the surfaces of CuPd alloys.

Band-structure and cluster-model calculations for the O 1s x-ray absorption spectrum of VO₂ in the metallic phase

MIGUEL ABBATE

Laboratorio Nacional de Luz Síncrotron, CNPq

We present and discuss band-structure and cluster-model calculations for the O 1s x-ray absorption spectrum of VO₂ in the metallic phase. The purpose of the calculations is to show that these methods provide complementary information on the x-ray absorption spectrum. First of all, the band-structure calculation describes accurately the dispersion of the bands and reproduces correctly the different features observed in the spectrum. In this method, the spectrum corresponds to the O 2p unoccupied electronic states in the conduction band. The spectrum reflects,

due to metal-oxygen hybridization, unoccupied electronic states that have also metal character. The two peaks observed at threshold correspond to $V 3d$ bands which are split by crystal field effects. The bumps at higher photon energy correspond to $V 4sp$ bands which are pushed up by stronger interactions. On the other hand, the cluster-model calculation provides additional information on multiplet splittings and many body effects in the $V 3d$ band region. In this method, the spectrum is calculated using the sudden approximation between the ground state and the excited state wavefunctions. This calculation explains the splitting of the $V 3d$ bands and the nature of the two peaks observed in the spectrum.

Física de Superfícies I (SUF) - 07/06/95

**THE EFFECT OF FINAL STATE
SCREENING CHANGES ON ALLOY
ENERGY SHIFTS**

G. G. KLEIMAN, R. LANDERS

Instituto de Física Gleb Wataghin, UNICAMP

The effect of screening of the final state in Auger and photoemission has been the subject of various studies. In particular, investigations of energetics have yielded considerable insight into the screening process, as, for example, in studies of the Auger parameter in the 3d, 4d and 5d series of transition and noble metals (see ref. [1] and references therein). It is clear that changes in the nature of the screening electrons from d- to sp-type reduces the efficacy of the screening, which affects the Auger parameter significantly. Extension of these results to analysis of XPS and Auger energy shifts in alloys produces some important differences from the form of the conventional expression, which supposes that the energy shift is linear in the ground state d- and sp-electron occupation changes (δn_s and δn_d , respectively). Basically, the form of the conventional expression is correct for alloys in which the nature of the screening electrons does not change during the screening of the final state. When, however, the screening electrons' nature changes from d- to sp- type during the screening, the corresponding energy shift remains linear in δn_s , but comes quadratic in δn_d and is sensitive to the number of ground state d-band holes. This situation holds for the Auger shift in Ni, Pd and Pt and the XPS shift in Cu, Ag and Au. Since it is now recognized that determination of alloy occupation changes requires measurement of both Auger and XPS shifts, we examine the consequences of these new expressions for the shifts of a number of alloys, especially AuPd [2]. The results are consistent with those derived independently from the transitivity of noble metal Auger shifts [3]. In all the complete solid solutions we examine the charge transfer is on the order of 0.01 electrons/atom. Furthermore, we reexamine some alloy results from the literature, among AuZn and AuMg [4]

REFERENCES

- [1] G.G. Kleiman, R. Landers, P.A.P. Nascente and S.G.C. de Castro, Phys. Rev. B 46 (1992) 4405.
[2] P.A.P. Nascente, S.G.C. de Castro, R. Landers and

G.G. Kleiman, Phys. Rev. B 43 (1991) 4659.

[3] G.G. Kleiman, R. Landers, S.G.C. de Castro and J.D. Rogers, Phys. Rev. B 44 (1991) 8529.

[4] T.D. Thomas and P. Weightman, Phys. Rev. B 33 (1986) 5406.

**COMPORTAMENTO DE UMA IMPUREZA
SUBSTITUCIONAL DE Fe NA SUPERFÍCIE
DE Pd(001)**

P. R. PEDUTO, ÂNGELA KLAUTAU, SONIA
FROTA-PESSÔA
IFUSP

No ano passado, apresentamos (Caxambu/94) um esquema computacional para o estudo de sistemas bidimensionais baseado no LMTO-ASA e no método de recorrência. Apresentamos, na época, vários testes que reproduziam recentes resultados da literatura atestando, portanto, a eficiência do esquema.

Neste trabalho, procuramos verificar a existência de momento magnético gigante na superfície de Pd(001). O problema de impurezas de Fe em Pd cristalino (*Bulk*) é clássico e tem despertado grande interesse devido a presença dos momentos gigantes. Esses momentos que são observados experimentalmente e podem ser obtidos através de cálculos teóricos (KKR-funções de Green[1] e RS-LMTO-ASA[2, 3]), aparecem porque a impureza de ferro polariza as camadas vizinhas de paládio. Essa polarização do hospedeiro é uma ordem de grandeza maior que a observada em outros metais (como o cobre, por exemplo). Nossos cálculos, também, mostram uma forte polarização nas primeiras camadas de Pd em torno da impureza na superfície. Isto indica que um momento bastante grande deve ser observado também em torno da impureza de Fe na superfície de Pd. Várias outras propriedades foram investigadas e comparadas com outros resultados da literatura.

1. A. Oswald, R. Zeller e P. H. Dederichs - Phys. Rev. Letters **56** n° 13 (1986)
2. S. Frota-Pessôa - Phys. Rev. B **46**, 14570 (1992)
3. A. Klautau - Tese de Mestrado (fase de redação) - IFUSP

REFLETIVIDADE E ABSORÇÃO DO ÉRPIO NAS BORDAS $M_{4,5}$.

F. C. VICENTIN, H. TOLENTINO

Laboratório Nacional de Luz Síncrotron

M. SACCHI

Laboratoire pour l'Utilisation du Rayonnement

Electromagnétique

O estudo das propriedades magnéticas de materiais na forma de filmes finos apresenta tanto interesse tecnológico, com aplicação em memórias, como na melhor compreensão dos fenômenos físicos envolvidos. Destacam-se neste sentido, os metais de transição e as terras raras, devido às características dos seus elétrons 3d e 4f, respectivamente. Uma maneira usual de medir-se propriedades magnéticas é por espectroscopia de absorção de raios-X (XAS), utilizando luz síncrotron como fonte, explorando-se o efeito de dicroísmo linear e circular magnético. O modo de detecção é, em geral, o de rendimento total de elétrons (TEY), onde todos os elétrons produzidos na amostra são contados, sendo esta quantidade proporcional à absorção. Neste trabalho usamos um modo de detecção alternativo: a reflexão, onde a luz incidente em ângulos rasantes é refletida pela superfície da amostra e detectada posteriormente numa matriz de fotodiodos. As amostras estudadas foram filmes de érbio (2.7, 100 e 200 Å) depositadas sobre silício. Comparamos e discutimos os espectros medidos simultaneamente no modo TEY. A partir destes dados e de cálculos teóricos de primeiros princípios pode-se determinar o índice de refração para o érbio nas bordas $M_{4,5}$ e reproduzir as curvas de refletividade para diferentes ângulos.

XPS CORE LEVEL ENERGY SHIFTS IN PALLADIUM-NOBLE METAL ALLOYS

PEDRO AUGUSTO DE PAULA NASCENTE

Departamento de Engenharia de Materiais, Universidade Federal de São Carlos

SANDRA GRAÇA CARNICERO DE CASTRO, RICHARD LANDERS, GEORGE GERSHON KLEIMAN

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

We present the results of core level energy shifts in the alloys Pd-Au, Pd-Ag, and Pd-Cu measured by X-ray photoelectron spectroscopy (XPS). The analysis depth in XPS is only 5 to 30 Å, due to the low kinetic energy (10 to 1500 eV) of the photoemitted electrons. The identification of the elements present in the solid surface is accomplished by measuring the binding energies of the photoelectron core level peaks in the spectrum. The intensities of these peaks provide information on the surface composition, and the exact peak locations indicate the chemical environment for the emitting atom. The core level binding energy shifts, also

called chemical shifts, arise from the variation of electrostatic screening felt by core electrons as valence electrons are drawn towards or away from the atom of interest. The quasi-atomic model (QAM) describes the screening charge distribution as an additional atomic valence electron, so the metal seems to behave like a structureless source of screening electrons. We show that charge transfer to the noble metal atom is very small in the case of palladium-noble metal alloys.

PROPRIEDADES ESTRUTURAIS, DINÂMICAS E TERMODINÂMICAS DAS SUPERFÍCIES SINGULARES DO FULERENO C_{60}

VIATCHESLAV IVANOVITCH ZUBOV, NIKOLAI

PAVLOVITCH TRETIKOV, JOSÉ NICODEMOS

TEIXEIRA RABELO

UFG

Investigamos as propriedades estruturais, dinâmicas e termodinâmicas das superfícies singulares do fulereno C_{60} com a rede cúbica de faces centradas, que é estável a temperaturas acima de 261.4 K [1]. Anteriormente, o método [2] foi utilizado no estudo das propriedades volumétricas desta substância [3]. O potencial intermolecular utilizado é o de Girifalco. São considerados termos anarmônicos até a quinta ordem. Calculamos a relaxação da rede e os deslocamentos quadráticos médios das moléculas perto das superfícies, as energias livres superficiais de Helmholtz e as tensões superficiais. Nas vizinhanças da superfície (001), o coeficiente de dilatação térmica da primeira distância interplanar α_1 é 1.69 - 1.83 vezes maior do que o α volumétrico, enquanto que o coeficiente para a segunda distância α_2 só supera α em 2 por cento. Na camada de cima, as amplitudes das vibrações na direção normal são 1.47 - 1.71 vezes maiores que as volumétricas, enquanto que nas demais direções a proporção é de 1.15. Na segunda camada a diferença é bem menor. O caráter da relaxação e da dinâmica perto das outras superfícies é similar. A relaxação da rede perto da superfície (011) é não monótona. A tensão superficial é negativa para todas as superfícies singulares.

Agradecimentos: CNPq.

1. P.A. Heiney, J.E. Fisher et al, Phys. Rev. Lett. 66, 2911(1991).
2. V.I. Zubov, I.V. Mamontov and N.P. Tretiakov, Int. J. Mod. Phys. B6, 197(1992).
3. V.I. Zubov, N.P. Tretiakov et al, Phys. Lett. A194, 223(1994).

**OPTICAL AND ATOMIC FORCE
MICROSCOPY STUDIES OF
RHOMBOHEDRAL DOMAINS IN C₇₀
CRYSTALS**

MARCOS DA SILVA COUTO
UFMG

M. A. VERHEIJEN, K. W. M. KOUTSTAAL, W. J.
P. VAN ENCKEVORT

University of Nijmegen - The Netherlands

On the {100} and {111} surfaces of C₇₀ crystals the phase transition of the f.c.c. structure towards the trigonal structure has been studied in-situ with the help of optical reflection microscopy. Although the domains on one single surface were not formed at the same time the domain walls of parallel, adjacent domains on both types of surfaces are connected. Extensive ex-situ studies of domain patterns on both types of surfaces have been performed using both optical and atomic force microscopy. On both types of surfaces feather-like patterns consisting of four different arrangements of domains were observed. For the {100} surfaces, basin-like structures were found too. For each of the surfaces the orientation of the domain walls and the orientation of the C₇₀ molecules within each domain could be found. An additional phase transition was observed in-situ at 303 K. The exact nature of this phase transition and the extra domain lines occurring below this temperature are still unknown.

Superfícies e Filmes Finos (SUF) - 07/06/95

**EXCITAÇÕES ELEMENTARES DE
SUPERFÍCIE EM FILME FINO**

SANDRA DE PAULA DIAS, FERNANDO ALBUQUERQUE
OLIVEIRA
ICOMP-UNB

Estudamos os modos que resultam do acoplamento entre as excitações magnéticas de grande comprimento de onda e um campo eletromagnético flutuante em um filme fino antiferromagnético. Damos uma atenção especial aos modos localizados na superfície, na ausência de campo magnético estático externo. Usamos um procedimento diagramático para construir as funções de Green para excitações em um filme partindo do resultado para um meio semi-infinito. Usamos estas funções para obter as relações de dispersão e as densidades de energia dos modos de superfície. Aplicações numéricas foram feitas para um filme fino de MnF₂.

**Controlador de temperatura para
ultra-alto-vácuo no intervalo 80-570 K**

A. DE SIERVO, A. MOCELLIN, M. ABBATE
Laboratorio Nacional de Luz Síncrotron, CNPq

Nós apresentamos um controlador de temperatura para ultra-alto-vácuo no intervalo 80-570 K, que será utilizado para controlar a temperatura de amostras em experiências de foto-emissão e foto-absorção. O controlador consta de um criostato, tipo banho de nitrogênio líquido, com um trocador de cobre no extremo para resfriar até 80 K. O porta-amostras está conectado ao trocador de calor por meio de uma haste de aço-inox com baixa condutividade térmica, e tem uma lâmpada de halogênio na parte posterior para aquecer até 570 K. Temperaturas intermediárias podem ser atingidas variando a potência na lâmpada. O controlador permite estabilizar temperaturas com uma precisão melhor que 2-3 K, sendo o tempo característico de estabilização para uma dada temperatura de aproximadamente 15 minutos.

**A "BLURRED FILM" MODEL IN
APPLICATION TO A POROUS SILICON**

GREGORY SURDUTOVICH, RITTA VITLINA

Instituto de Física de São Carlos

VITOR BARANAUSKAS

*Depart. Semicond & Photonics, Faculty of Electric
Engineering, Unicamp*

To match of the polarized light reflectometry experimental data pertaining to porous silicon samples with the theoretical findings a simple "blurred film" model is proposed. The model starts from presumption about quite an appreciable but smooth roughness of a porous silicon layer leading to the effective variance in its thickness. This approach corresponds to such a roughness when phase angles difference from the various surface regions becomes on the average more than π . Such averaging over the phase angles difference leads to the situations when reflection coefficients for *p* and *s* polarized light become independent on the thickness of film. Moreover, while the angular dependence of the *R_p*-coefficient always has a clear minima in the vicinity of the Brewster angle, coefficient *R_s* remains a monotonous one. However, in all experiments with porous silicon layer on a silicon substrate the pronounced minimums in the coefficient *R_s* at steep angles were observed. To achieve theoretical consistency with these observations we generalized our model by admission of a presence on the film's surface of a rectangular-like form facets (wells). In geometric optics approximation a reflection from such a facet is monotonously decreasing with angle and becomes zero for some critical angle. As a result, the total coefficient *R_s* acquires a minimum in the vicinity of this angle.

UM MICROSCÓPIO DE TUNELAMENTO A SER USADO NO AR, NO VÁCUO E NO HÉLIO LÍQUIDO

A. S. FERLAUTO, E. A. M. MACHADO, J. A. DE CARVALHO JR, J. K. NAUFAL JR, A. A. QUIVY
*LNMS-Laboratório de Novos Materiais Semicondutores
 Instituto de Física da Universidade de São Paulo*

Estamos construindo um microscópio de tunelamento (STM), que será destinado a trabalhar no ar, no hélio líquido e no vácuo, para estudar as amostras semicondutoras crescidas em nosso sistema epitaxial por feixe molecular (MBE). Todo o programa computacional de controle foi escrito em linguagem C++ para Windows e comporta opções de medidas de topografia, função trabalho ϕ e espectroscopia IxV, medidas em tempo real com animação; tratamento das imagens como filtragem espacial, e representações 2D, 3D e curvas de perfil. A eletrônica foi construída de um jeito modular, usando o amplificador operacional OPA 128 para a conversão corrente-voltagem, amplificadores de isolamento ISO 103, opto-acopladores para isolar os sinais analógicos e digitais ligados ao computador, um componente "sample & hold" para congelar o sinal de retroação e permitir as medidas de espectroscopia, e cabos de baixo ruído para ligar o STM à eletrônica. O sistema de varredura do STM é constituído por 2 tubos piezoelétricos concêntricos oferecendo uma compensação térmica nas três direções de deslocamento. Um parafuso diferencial é usado para a aproximação grosseira. Os testes da eletrônica, das partes mecânica e computacional estão em fase final. Este STM simples é destinado a funcionar no ar e servirá de protótipo para a segunda versão que trabalhará no vácuo e no hélio líquido, utilizando um sistema automático de aproximação baseado no efeito "slip and stick" de um bimorfo piezoelétrico.

Adsorção de Te em superfícies de GaAs e InAs

ROBERTO CLAUDINO DA SILVA, ARMANDO CORBANI FERRAZ

Instituto de Física da Universidade de São Paulo

O crescimento epitaxial de InAs em um substrato de GaAs, que tem parâmetro de rede 7% menor, é observado até o limite de 1,5 monocamadas quando surgem ilhas caracterizando uma transição 2D-3D no regime de crescimento. N. Grandjean et al em trabalho recente relataram que a adsorção de Te em [001] GaAs precedendo o crescimento de InAs pode atuar como um surfactante elevando o limite de 1,5 monocamadas possíveis para 6. No trabalho, os autores concluem que o Te permitiu uma relaxação na região de interface pela supressão das ilhas, antes observadas, basicamente devido à redução da energia de superfície pela contínua segregação da camada de Te. In e As foram rapidamente incorporados à camada logo abaixo da superfície. Com a forte redução da difusão da superfície de In a

formação de ilhas é inibida. Posteriormente, W. N. Rodrigues et al verificaram que o crescimento epitaxial de InAs sobre [001] GaAs intermediado por Te na interface, apresenta outro interessante resultado: parte do Te depositado sobre o substrato é segregado e aparece sobre o InAs depositado, porém mantendo cerca de 0,5 monocamadas na interface sugerindo a formação de um composto nessa região. Baseando nesses trabalhos, em particular no último, resolvemos estudar a adsorção de Te em GaAs e InAs, ambos orientados na direção [001], visando pesquisar os sistemas quanto à geometria e propriedades eletrônicas buscando uma compreensão da estabilidade das estruturas descritas. Para os cálculos empregamos o formalismo do pseudopotencial não-local na teoria do funcional densidade. Consideramos uma expansão em ondas planas para a energia de corte de 12Ry e no mapeamento da zona de Brillouin empregamos um conjunto de 4 pontos especiais. A pesquisa das posições de equilíbrio para as configurações em estudo é feita pela relaxação das estruturas através da Dinâmica de Car e Parrinello. A super-célula é composta de 18 átomos de GaAs (ou InAs) mais os átomos adsorvidos de Te formando 10 planos inter-atômicos, numa reconstrução 2x1 e mais 6 camadas de vácuo. Com os cálculos obtemos a configuração de equilíbrio onde podemos contabilizar o custo energético dos deslocamentos atômicos e transferências de cargas correspondendo às energias mecânica e química respectivamente, envolvidas no processo de estabilização das estruturas.

DINÂMICA MOLECULAR DE CASCATAS DE COLISÕES DE ALTA ENERGIA, UM NOVO ALGORÍTMO

CESAR R. S. DA SILVA, CLAUDIO SCHERER

Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Simulações por dinâmica molecular de cascatas de colisões geradas por impactos iônicos com energia de 0.1 a 1.0 MeV são consideradas inviáveis em computadores vetoriais normalmente disponíveis em centros acadêmicos. Isto se deve ao grande número de passos de integração necessários para descrever o fracionamento de uma grande quantidade de energia. Entretanto, a maior parte do tempo é gasta com o cálculo da força interatômica. Em nosso algoritmo utilizamos o fato de que, na maior parte dos passos, apenas um número muito reduzido de partículas sofre variações significativas nas suas posições. Para somente essas partículas é calculada a diferença entre a força na posição presente e na última posição em que a força foi calculada. Essa diferença é então adicionada à força anterior. Dessa forma, a avaliação completa da força somente é necessária no primeiro passo e, eventualmente, após a acumulação de erros numéricos devido à sucessão de subtrações e adições de valores muito próximos.

Conclui-se portanto que o presente algoritmo produz uma grande redução no tempo de CPU necessário para o cálculo da força.

DIAGRAMMATIC METHOD FOR ELEMENTARY EXCITATIONS IN THIN FILMS

FERNANDO ALBUQUERQUE DE OLIVEIRA
CIFMC-UnB

In this work we use a diagrammatic procedure to construct a Green's function for the elementary excitation in a film, starting with those of a semi-infinite medium. We end up with a very simple method which can be applied to different types of excitations. In this way, the method allows us to simplify the calculation and to point out the similarity between different excitations.

In situ Mass Detection with the Quartz Crystal Microbalance

DAVID MENDEZ SOARES
Instituto de Física Gleb Wataghin - UNICAMP

The quartz crystal microbalance, QMB, is a widely used and extremely sensitive tool for mass-change (nanograms/cm²) determinations. It is used in vacuum, air, and recently also in liquid media. But, if changes of the visco-elastic properties of the contacting medium (liquids and/or film) are not taken into account, erroneous results will normally be obtained. This problem is analyzed on the basis of the system crystal/driver impedance. A new theoretical approach of the QMB is presented. Furthermore, a new driver circuit for the QMB is described for evaluation and correction for the frequency measurements. Experimental results in different liquids and polymer films are discussed.

SPECTATOR VACANCY CONTRIBUTIONS TO THE AUGER $L_{2,3}M_{4,5}M_{4,5}$ SPECTRA OF Pd AND Rh: SATELLITES AS IMAGES OF THE MAIN SPECTRUM?

R. LANDERS, G. G. KLEIMAN, S. G. C. DE CASTRO
Instituto de Física Gleb Wataghin UNICAMP

Interpretation of the satellites of the Cu $L_{2,3}M_{4,5}M_{4,5}$ has involved considerable controversy in recent years. Reaching unambiguous conclusions is impeded by the contribution of $L_2L_3M_{4,5}$ and $L_1L_2M_{4,5}$ Coster-Kronig (CK) transitions, so that considerable experimental investigation was required before clarifying the relative roles of shake-up and CK processes in this case. The $L_{2,3}M_{4,5}M_{4,5}$ spectra of Ag, Pd, and Rh excited by bremsstrahlung also have satellite features. For Ag we have shown that the experimental measurements are consistent with an interpretation in which the satellites arise from valence band spectator vacancies in the $L_{2,3}N_{4,5} \rightarrow M_{4,5}M_{4,5}N_{4,5}$ and $L_{2,3}M_{4,5}N_{4,5} \rightarrow$

$M_{4,5}M_{4,5}N_{4,5}N_{4,5}$ processes[1]. The Pd and Rh spectra we report here manifest similar experimental systematics: (A) both the L_3 and L_2 losses are displaced the same amount relative to their respective main peaks; (B) the ratio of the L_3 and L_2 intensities is very close to the statistical ratio, suggesting little CK contribution; (C) the shapes of both satellite structures are approximately the same and cannot arise from multiplet splitting of the final states with the spectator vacancies; (D) the satellite to main peak ratios are very similar for both the L_3 and L_2 spectra; (E) comparison with spectra from PdAg alloys indicates the intrinsic nature of the losses; (F) energy loss spectra present lineshape variations inconsistent with the satellite measurements; and (G) comparison with threshold photo excited Pd $L_{3,2}M_{4,5}M_{4,5}$ spectra[2] indicates the dependence of the satellite lineshapes on photon energy. We demonstrate that the Pd and Rh satellite relative positions and lineshapes are consistent with spectator vacancy interpretation. In particular, the satellite lineshapes appear to correspond basically to broadened displaced "images" of the corresponding main spectra. It would seem, therefore, that the bremsstrahlung excited Pd and Rh $L_{2,3}M_{4,5}M_{4,5}$ satellites are almost entirely caused by intra-atomic shake-up processes; the "image" nature of their lineshapes resembles that of extrinsic losses such as plasmons in other metals.

REFERENCES

- [1] G. G. Kleiman, S. G. C. de Castro and R. Landers, Phys. Rev., B 49 (1994) 2753
- [2] W. Drube, A. Lessmann and G. Materlink, Jpn. J. Appl. Phys., 32 (1993) 173

Estrutura atômica e propriedades eletrônicas das superfícies [110] de CdTe e CdSe

KAZUNORI WATARI, ARMANDO CORBANI FERRAZ
*Instituto de Física da Universidade de São Paulo Caixa
Postal 20516 - telefax (11)814-0503 CEP 01498-970 São
Paulo SP Brasil*

JOSÉ LUIZ AARESTRUP ALVES
Fundação de Ensino Superior de São João Del Rei

Apresentamos neste trabalho um estudo das propriedades atômicas e eletrônicas das superfícies [110] de CdTe e CdSe. São analisadas as estruturas atômicas de equilíbrio e faixas de energia, comparando com recentes resultados experimentais. Os cálculos foram baseados na teoria do funcional densidade, na aproximação de densidade local (LDA) para o termo de troca e correlação e no uso de pseudopotenciais ab-initio. No intuito de determinar as posições atômicas de equilíbrio, as três camadas mais externas da superfície foram relaxadas calculando-se a energia total e as forças envolvidas nos átomos, utilizando-se o método "steepest descent" para os deslocamentos atômicos em conjunto com a técnica de Car-Parrinello para trazer as funções de onda à autoconsistência. A estrutura de equilíbrio

é identificada quando todas as forças são menores que $0.005\text{eV}/\text{\AA}$ correspondendo a uma incerteza numérica menor que 0.05\AA nas posições atômicas. As funções de uma partícula foram expandidas em ondas planas até a energia cinética de 10Ry e a integração na zona de Brillouin foi feita considerando-se 4 pontos especiais de Monkhorst-Pack.

CÁLCULO DE VELOCIDADE DE ÍONS EMITIDOS POR SUPERFÍCIES IONIZADAS.

ENIO FROTA DA SILVEIRA, MARIA MATOS, CLAUDIA
S. C. DE CASTRO, EDUARDO PINHEIRO
PUC - Rio de Janeiro

Superfícies de alvos sólidos expostas ao bombardeio de partículas ou fótons energéticos tornam-se eletricamente carregadas, provocando a emissão de íons atômicos ou moleculares formados através da interação projétil-sólido. O espectro de velocidades com que esses íons são emitidos informa sobre a distribuição de cargas superficiais gerada sobre o sólido, o que, por sua vez, é uma fonte de informação essencial na determinação do mecanismo da interação projétil-sólido. Desenvolvemos um programa de computador (ligagem C) capaz de calcular a equação de movimento clássica da emissão iônica por uma superfície ionizada. Tais cálculos foram aplicados para a emissão de H^+ por superfícies sob impacto de projéteis multi-carregados com velocidades da ordem da velocidade de Bohr. Modelos de desorção iônica, como PID¹ (Pre-Impact Desorption) podem ser então testados.

[1] E.F. da Silveira, M. Matos, Nucl. Instr. Methods, Apr. 1995.

CONSTRUÇÃO DE UM PORTA AMOSTRAS COM RECURSOS PARA CONTROLE DA TEMPERATURA E APLICAÇÃO DE BIAS NUM SISTEMA CVD A PLASMA DE MICROONDAS

VICTOR PELLEGRINI MAMMANA, FRANCISCO TADEU
DEGASPERI, ODAIR GIMENES MARTINS, MARIA
CECÍLIA SALVADORI
Instituto de Física da USP

Encontra-se em funcionamento desde 1993, no Instituto de Física da USP um equipamento para deposição de filmes de diamantes usando Plasma CVD por microondas. Através dele obtiveram-se ótimos filmes de diamante. Este equipamento apresenta excelentes características quanto ao controle da pressão, fluxo de gases, posição do substrato e sintonia da cavidade ressonante de microondas. No entanto, pelo fato da potência da válvula de microondas influir diretamente nas características do plasma, e também na temperatura da amostra, encontramos dificuldades para realizar deposições em temperaturas mais baixas. Outra dificul-

dade encontrada foi o fato do porta amostras original não dispor de qualquer dispositivo para a estabilização da temperatura, o que exigia uma monitoração humana constante através de pirômetro óptico para estabilizar a temperatura. Portanto, a necessidade de desacoplar a temperatura da amostra da potência da válvula de microondas, e também a necessidade de promover um melhor controle da temperatura, motivaram a construção de um novo porta amostras refrigerado com ar comprimido, e aquecido por uma resistência elétrica, ligada a um sistema PID para controle da temperatura. Este sistema PID é realimentado pelos dados de temperatura fornecidos por um termopar posicionado sob a amostra. Decidiu-se incluir também nesta nova versão do porta amostras, recursos para a aplicação de tensões (bias) à amostra, com o intuito de aumentar a densidade de nucleação de diamante. As restrições de espaço dentro do porta amostras, a diferença de pressão entre a parte externa e interna da câmara de reação, a tensão necessária para o aumento da nucleação, e principalmente as altas temperaturas tornaram o projeto e a construção deste novo porta amostras extremamente delicados. Montado na câmara de reação, este porta amostras encontra-se na fase de testes, e já apresentou resultados quanto ao controle da temperatura e o aumento na densidade de nucleação.

MONTAGEM E CARACTERIZAÇÃO DE UM CANHÃO DE ELÉTRONS NA ESTAÇÃO DE RAIOS X MOLES DO LNLS.

DANIELA ZANCHET⁽¹⁾, MIGUEL ABBATE,
GUILHERME BUENO FRAGUAS, HÉLIO TOLENTINO
Laboratório Nacional de Luz Síncrotron/CNPq

Um canhão de elétrons, baseado no modelo utilizado no tubo de televisão, e sua eletrônica, foram montados na câmara de medidas da estação de espectroscopia de raios X moles do LNLS. A eletrônica permite o controle independente da energia dos elétrons, dos potenciais das lentes, bem como da corrente de emissão. Esta flexibilidade na eletrônica permite uma melhor caracterização e otimização do canhão em função da energia dos elétrons. As características do canhão, em termos de corrente fornecida e tamanho de foco, foram levantadas para diferentes valores de energia do feixe de elétrons. Paralelamente, foram feitas simulações das trajetórias dos elétrons no canhão utilizando o programa SIMION. Estes resultados, bem como os primeiros espectros AES e EELS obtidos com o canhão, serão apresentados.

(1) Bolsista: CAPES

THE LOCAL REACTIVITY OF GaAs[110] SURFACE IN INTERACTION WITH ATOMS

PAULO CESAR PIQUINI, ADALBERTO FAZZIO
Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo, SP.

ARNALDO DAL PINO JR
Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos, SP

Using the local version of the Hard and Soft Acids and Bases (HSAB) principle we have studied the possible regions of chemical reaction of the GaAs[110] surface with atoms (Na,Cs,Si,Ge,Cl,Br) to initiate. Based on properties of isolated reactants the HSAB principle allows us to predict the most reactive sites of a polyatomic system. The calculations are performed at a Hartree-Fock self-consistent-field level to the determination of physical properties of the isolated surface and atoms. The GaAs[110] surface was simulated by a cluster of 44 atoms (20 As,20 Ga,24 H) in an experimentally determined GaAs[110] surface geometry. The predictions are compared with other theoretical calculations that involves an explicit determination of the gradient of the complex (surface+atom) system. We also compare with some experimental results.

Adsorção de H, O e Cl sobre Superfícies de Prata

J. L. A. ALVES, H. W. LEITE ALVES
Depto. de Ciências Naturais, FUNREI - Fundação de Ensino Superior de São João del Rei, São João del Rei - MG

C. M. C. DE CASTILHO
Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia

As superfícies de Prata possuem propriedades catalíticas notáveis e têm despertado um grande interesse, tanto na indústria, quanto na pesquisa básica. A adsorção de hidrogênio, oxigênio e cloro sobre superfícies Ag (1 1 0) têm sido bastante estudadas experimentalmente. A importância da face (1 1 0) resulta do fato de que o monocristal Ag(1 1 0) é um catalisador muito mais eficiente que amostras policristalinas usadas comercialmente. No presente trabalho, estudamos as adsorções referidas acima por meio de cálculos de estrutura eletrônica utilizando a aproximação de "cluster" molecular e métodos quânticos *ab initio* com funções base gaussianas (código Gaussian 92). São investigados os diversos sítios possíveis de adsorção com a determinação de distâncias e energia de ligação, frequências de oscilações e distribuições de carga. Os resultados mostram que os átomos adsorvidos se ligam preferencialmente no centro de ligações Ag-Ag.

Calibração e Automação de Um Espectrômetro de Elétrons Para o Estudo de Superfícies

VON BRAUN NASCIMENTO, EDMAR A. SOARES,
VAGNER E. DE CARVALHO
Depto. de Física - ICEx - UFMG

O Espectrômetro de elétrons é um instrumento essencial para técnicas experimentais que envolvem espalhamento de elétrons (ou ions) em superfícies. Entre os vários tipos existentes, aqueles instrumentos do tipo eletrostático de hemisférios concêntricos têm sido largamente usados principalmente devido ao fato de permitirem a realização de medidas com resolução angular. Neste trabalho apresentamos detalhes da construção, calibração e automação de um Espectrômetro de Elétrons de alta resolução projetado para aplicações em Espectroscopia de Elétrons Auger e Espectroscopia de Foto-elétrons. Dois hemisférios concêntricos, de raio médio de 45mm, associados a um conjunto de lentes eletrostáticas na entrada e outro na saída dos hemisférios, foram usados na construção do Espectrômetro. O instrumento opera no modo em que a energia de passagem dos elétrons através do espaço entre os hemisférios (região de análise) é constante. Neste caso, os elétrons são desacelerados nas lentes de entrada à medida que a energia de análise é variada.

Determinação da Condutividade Térmica de Filmes Finos pelo Méto do do Comparador Térmico

VAGNER EUSTÁQUIO DE CARVALHO
Depto. de Física - ICEx - UFMG

O método do Comparador Térmico tem sido usado, com relativo sucesso, para a determinação da condutividade térmica de sólidos em geral. O método se baseia no fato de que a resistência térmica de contato entre dois sólidos pode ser dada por $(\frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{\lambda_2})4r$ onde λ_1 e λ_2 são as condutividades térmicas dos dois materiais e r é o raio efetivo de contato. Se esse raio for mantido constante, a resistência térmica depende basicamente da menor das condutividades térmicas envolvidas. Comparado com outros métodos, o Comparador Térmico oferece a vantagem de fornecer medidas de condutividade térmica em um tempo relativamente curto mas, por outro lado, requer uma calibração prévia com amostras de condutividade conhecida. Por ser rápido e não destrutivo e envolver uma geometria relativamente simples na preparação das amostras, o método tem sido recentemente utilizado na determinação da condutividade térmica de filmes.

Neste trabalho apresentamos detalhes da construção do instrumento, sua calibração e aplicação. Resultados de medidas realizadas em amostras de pedras brasileiras bem como as características básicas para sua utilização em amostras de filmes finos são apresentados e discutidos.

Espectros de fotoelétrons do nível $V2p$ do bronze $Na_{0.33}V_2O_5$

A. MOCELLIN, M. ABBATE

Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, CNPq

Nós apresentamos e discutimos espectros de fotoelétrons do nível $V2p$ do bronze $Na_{0.33}V_2O_5$. Os espectros 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. A diferença de energia entre estes picos é devida ao processo de blindagem do buraco interno. O pico principal corresponde ao buraco interno bem blindado, com uma configuração final do tipo $2p^5 3d^2 \bar{L}$ (onde \bar{L} representa um processo de transferência de carga). O pico satélite corresponde ao buraco interno mal blindado, com uma configuração final do tipo $2p^5 3d^1$. Os espectros são calculados utilizando-se um modelo de *cluster* que inclui processos de transferência de carga. Os cálculos permitem estimar o valor da repulsão eletrostática entre os elétrons $V3d$. A repulsão eletrostática $V3d - V3d$ é menor que a energia de transferência de carga $V3d - O2p$. Iste significa que o composto $Na_{0.33}V_2O_5$ está no regime de Mott-Hubbard.

INTERCALAÇÃO ELETRO E FOTOQUÍMICA EM FILMES FINOS DE SUBÓXIDOS DE Mo

J. SCARMINIO

FILMES FINOS EM METALURGIA: PERSPECTIVAS ATUAIS

WIDO H. SCHREINER

Depto. de Física UFPR

Nesta exposição daremos ênfase ao desenvolvimento atual dos filmes finos como recobrimentos metalúrgicos. Além das técnicas mais importantes de deposição em uso também descreveremos as tendências que dominarão a área no futuro. Mostraremos as vantagens da utilização dos filmes finos em relação às outras técnicas em uso no tratamento de superfícies com aplicações metalúrgicas.

Univ. Est. de Londrina, Depto. de Física, 86.051-970
Londrina, Pr

A. GORENSTEIN, A. LOURENÇO
IFGW, Unicamp, 13.083-970 Campinas, SP

Filmes finos de subóxidos de molibdênio foram preparados por sputtering de um alvo de Mo metálico, em atmosfera de argônio e oxigênio, variando-se o fluxo de O_2 de 2,5 a 5,0 cm^3/min . e mantendo-se constante a pressão da câmara de deposição. Obteve-se filmes amorfos, quando observados por difração de raios-x e de composição variável, observadas pelos diferentes espectros de transmitância (350 a 2000 nm) obtidos em filmes de mesmas espessuras. Foram feitas intercalações eletroquímicas de íons Li^+ , usando-se como eletrólito uma solução de $LiClO_4$ em carbonato de propileno e intercalações fotoquímicas de prótons H^+ , irradiando-se as amostras com luz UV. Em ambos os casos observou-se alterações nas absorções óticas, fenômenos estes conhecidos como eletro e fotocromismo, respectivamente. Mais ainda, observou-se que estas alterações são fortemente dependentes do fluxo de oxigênio com que os filmes são preparados, ou seja, de suas composições. No fenômeno de fotocromismo observou-se que as respostas óticas dependem do meio químico em que as amostras são irradiadas. Medidas da voltagem das células eletroquímicas [ITO/MoO_x/LiClO₄/Pt] em função da carga inserida mostram também uma dependência com a composição do filme, embora nenhuma variação significativa tenha sido observada nos coeficientes de difusão dos íons Li^+ . Modelos explicando os resultados serão apresentados.

Workshop: Tratamentos Superficiais para Aplicações Metalúrgicas (SUF) - 08/06/95

DISSOLUÇÃO, REPRECIPITAÇÃO E ESTABILIDADE TÉRMICA DE NITRETOS E CARBONITRETOS DE FERRO BOMBARDEADOS COM GASES NOBRES: ESTUDO COMPARATIVO COM AÇOS CARBONO IMPLANTADOS COM NITROGÊNIO E NITRETADOS A PLASMA

GABRIEL SIMON, MARCOS AUGUSTO ZEN DE VASCONCELLOS, MARCOS SOARES, CARLOS ALBERTO DOS SANTOS

Instituto de Física-UFRGS

Nitretação a plasma (NP) é uma técnica de tratamento superficial consolidada em ambientes industriais de diversos países. Por outro lado, a implantação iônica (II), que se supõe uma técnica alternativa à NP, vem apresentando sérios problemas instrumentais para sua aceitação em escala industrial. Alguns aspectos metodológicos aproximam essas técnicas, mas vários outros as distinguem. Entre esses, destacam-se os efeitos do bombardeio de gases nobres sobre nitretos e carbonitretos de ferro precipitados em aços carbono tratados por ambas as técnicas. Na presente comunicação, serão discutidas as principais dificuldades para a aceitação da II em escala industrial, bem como algumas tentativas para superá-las, e serão apresentados resultados recentes de um estudo sistemático objetivando a comparação entre as duas técnicas, no que se refere ao comportamento dos precipitados em aços carbono, frente ao bombardeio com gases nobres. Difração de raios X a ângulo rasante (DRXR), espectroscopia Mössbauer de elétrons de conversão (EMEC) e espectroscopia Mössbauer de raios X de conversão (EMXC) foram utilizados como técnicas de análise. Análises realizadas em amostras virgens e em amostras submetidas a diferentes tratamentos térmicos, sugerem que, quando comparada à II, a NP proporciona a formação de precipitados termicamente mais estáveis. Esses resultados, juntamente com aqueles obtidos após o bombardeio de gases nobres sugerem que os precipitados resultantes da NP são maiores do que aqueles resultantes da II.

ASPECTOS METALÚRGICOS DE CAMADAS DE NITRETAÇÃO IÔNICA: CONTRIBUIÇÃO PARA A MELHORIA DA RESISTÊNCIA AO DESGASTE.

JOSÉ DE ANCHIETA RODRIGUES

Universidade Federal de São Carlos

CLDOMIRO ALVES JUNIOR

Universidade Federal do Rio Grande do Norte

Primeiramente serão apresentados os principais mecanismos de desgaste que ocorrem em materiais dúteis e frágeis, Esta comparação se torna importante porque o revestimento de aços por camadas de nitretos é formada de materiais com características dúteis e frágeis, respectivamente. Serão mostradas as relações entre taxa de desgaste e parâmetros ligados ao processos de desgaste e às propriedades dos materiais, assim como os aspectos microestruturais. Assim, dureza, resistência mecânica, tenacidade, resiliência, são propriedades importantes, mas também aspectos de acabamento, como por exemplo a rugosidade, tem a sua influência. A seguir serão apresentadas as características microestruturais das camadas de nitretos, em aços em geral, geradas por plasma. Discute-se as camadas monofásicas e as multifásicas. Apresenta-se a influência da nitretação por plasma contínuo e por plasma pulsado. Este último permite um maior controle sobre as fases resultantes, uniformidade na espessura da camada, que são aspectos que terão influência sobre a taxa de desgaste O plasma pulsado permite uma distribuição bem mais uniforme da temperatura, em toda a superfície da peça que se está nitretando. Por fim se relacionará esses aspectos metalúrgicos das camadas nitretadas com os processos de desgaste. Serão apresentados alguns exemplos de melhoria da resistência ao desgaste por abrasão e outros mecanismos, para alguns tipos de aços, tais como: H13, M2, Maraging, VC131, Inox 304 e Inox 316.

Filmes Finos I (SUF) - 08/06/95

IMPLANTAÇÃO IÔNICA EM FILMES FINOS DE a-C:H E a-CN_x:H: ANÁLISE POR ESPECTROSCOPIA DE ANIQUILAÇÃO DE PÓSITRONS

FERNANDO LÁZARO FREIRE JR, DANTE FERREIRA
FRANCESCHINI

Departamento de Física, PUC-Rio

CARLOS ALBERTO ACHETE
COPPE/PEMM, UFRJ

B. BRUSA, GINO MARIOTTO

Dipartimento di Fisica, Università di Trento, Italia

Filmes finos de carbono amorfo e de nitreto de carbono amorfo hidrogenados, a-C:H e a-CN_x:H, depositados por Plasma Enhanced CVD a partir de plasmas formados por misturas de metano e nitrogênio, foram implantados por íons de Nitrogênio (70 keV) em diversas doses ($6-20 \times 10^{16} \text{N/cm}^2$), mantendo-se os substratos à temperatura ambiente. As amostras foram analisadas por espectroscopia de aniquilação de pósitrons usando a técnica de alargamento Doppler. Esta técnica permite inferir a razão entre pósitrons aniquilados em vazios (voids, defeitos pontuais) e no "bulk" do material. O uso de feixes de pósitrons monoenergéticos para diversas energias incidentes permite determinar o perfil em profundidade destes defeitos ou vazios. Os resultados obtidos para os filmes de carbono e de nitreto de carbono amorfo indicam uma modificação estrutural, que aumenta com a dose e depende muito pouco dos processos de transferência de energia entre os íons de nitrogênio e o material implantado, colisões elásticas e inelásticas, em bom acordo com resultados da análise por espectroscopia Auger e espectroscopia Raman nestas amostras, recentemente publicados [1]. Os efeitos da implantação iônica são verificados a profundidades menores que $R_p + \Delta R_p$.

[1] F.L. Freire Jr., D.F. Franceschini, C.A. Achete e G. Mariotto, *Applied Physics A*, **49** (1994) 965.

Sobre a Formação de Filmes Finos de Nitreto de Carbono

JOSÉ FERNANDO DINIZ CHUBACI, SHIGUEO
WATANABE

*Departamento de Física Nuclear, Instituto de Física,
Universidade de São Paulo*

KIYOSHI OGATA, AKINORI EBE

R&D Div., Nissin Electric Co. Ltd., Kyoto, Japão

FUMINORI FUJIMOTO

Osaka University, Japão

JOCHEN P. BIRSACK

Hahn-Meitner-Institut, Berlin, Alemanha

Recentemente, têm havido grande interesse na formação de nitreto de carbono. A técnica de deposição de vapor com simultâneo bombardeamento de feixes iônicos (IBAD, IVD) tem demonstrado êxito na preparação deste novo material. Em nossos experimentos, as propriedades dos filmes são controladas pela variação da energia dos íons de nitrogênio e da razão de composição C/N. Foram produzidas amostras com energia de íons entre 0.5 e 10.0 keV e com razão de composição $C/N = 0.5 \sim 3.0$. Amostras com alta incorporação de nitrogênio ($C/N = 0.6 \sim 0.7$) e baixa energia de implante ($< 1.0 \text{keV}$) apresentaram alta dureza Knoop alcançando 62.74 GPa. Medidas de XPS e FT-IR indicaram uma alta fração da ligação tripla $C \equiv N$. A difração de raios-X mostrou estrutura amorfa. Simulações computacionais pelo "Dynamic TRIM code" foram realizadas para se estudar os parâmetros e para se entender o processo de formação de filmes finos de nitreto de carbono sobre substratos de Si, sílica fundida e WC. (CNPQ, FAPESP, FINEP)

Camadas duras de a-C(N):H obtidas por meio de PECVD em atmosferas de CH₄-NH₃

D. F. FRANCESCHINI, F. L. FREIRE JR

Departamento de Física, PUC-RIO

C. A. ACHETE

*Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais,
COPPE/UFRJ*

G. MARIOTTO

Dipartimento di Fisica, Università di Trento

Camadas duras de a-C(N):H foram depositadas sobre substratos de Si(100) por "glow-discharge" autopolarizado em atmosferas de CH₄-NH₃. Os filmes foram obtidos a uma pressão total de 8 Pa, com potencial de autopolarização igual a -370V e com pressões parciais de NH₃ entre 0% e 15%. 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. A incorporação de nitrogênio nos filmes ocorreu a níveis de até 11%, para a pressão parcial de 12.5% de NH₃. Esta incorporação corresponde a um rendimento que é mais de quatro vezes maior do que aquele obtido previamente utilizando-se N₂ como fonte de nitrogênio. A tensão interna dos filmes foi reduzida de aproximadamente 50% com a incorporação de nitrogênio, valor também superior ao obtido a partir de N₂. Os espectros de Raman mostraram que a incorporação de nitrogênio resulta num aumento do tamanho ou número de aglomerados grafíticos, ainda que exibindo mudanças menores na razão I_D/I_G , e nas posição e largura do pico G, quando comparados com os obtidos de filmes produzidos a partir de N₂. As diferenças observadas foram

discutidas em termos da influência do caráter molecular do precursor contendo nitrogênio (N_2 ou NH_3), seu potencial de ionização e sua capacidade de adsorção durante o processo de crescimento do filme.

FILMES FINOS DE ÓXIDO DE VANÁDIO: UTILIZAÇÃO EM DISPOSITIVOS DE INTERCALAÇÃO.

J. SCARMINIO

Depto. Física, UEL, Londrina, Pr.

A. GORENSTEIN

*Instituto de Física "Gleb Wataghin", UNICAMP,
Campinas, SP*

Dispositivos de intercalação são dispositivos nos quais ao menos um dos componentes é um material com rede hospedeira de dimensionalidade adequada para a intercalação iônica. Os óxidos de vanádio, como o V_2O_5 e o V_6O_{13} na forma maciça tem sido utilizados como cátodos em baterias de lítio e, na forma de filmes finos, em dispositivos eletrocromicos ou microbaterias regarregáveis. Na utilização como cátodos em microbaterias de lítio, é desejável que o material apresente potenciais superiores a 3 V vs. Li, alta capacidade e densidade de energia. Como componente ópticamente ativo em dispositivos eletrocromicos, buscam-se altas eficiências eletrocromicas e tempos de resposta rápidos. Como componentes ópticamente passivos, busca-se boa capacidade de armazenagem. Em todas as aplicações a reversibilidade do processo de intercalação é essencial. Neste trabalho apresenta-se um estudo comparativo de filmes finos de pentóxido de vanádio depositados por duas técnicas: "sputtering" reativo, a partir de alvo de vanádio em atmosfera de O_2/Ar ou por evaporação "flash" a partir do material em pó. A microestrutura dos filmes foi analisada por difração de raios-X e por espectroscopia Raman. Variando-se as condições de deposição foram obtidos filmes amorfos ou policristalinos, com orientação preferencial na direção (001). O espectro Raman, para os filmes obtidos por evaporação "flash" apresentou tanto os modos a baixa frequência ("rigid-layer like mode") como os modos vanadil a alta frequência. A modificação na microestrutura após intercalação com lítio é também discutida neste trabalho. Os filmes depositados por "sputtering" apresentaram potencial inicial de 3.5V vs. Li e filmes depositados por evaporação "flash" valores ligeiramente inferiores (3.2V). A curva potencial vs. grau de intercalação, para os dois materiais apresenta patamares característicos do pentóxido de vanádio maciço. A interpretação desta curvas, polêmica na literatura, é também discutida neste trabalho. O coeficiente de difusão foi também estimado. O comportamento óptico dos filmes frente á intercalação iônica foi estudado. Os filmes são eletrocromicos, de coloração catódica, com contrastes que dependem das condições de deposição. Para ambos os filmes, a intercalação provoca um deslo-

camento no gap óptico, não observado em outros materiais eletrocromicos.

FOTOLUMINESCÊNCIA EM $a-Si_{1-x}C_x:H$ COORDENADO TETRAEDRICAMENTE

LEANDRO R. TESSLER

IFGW - UNICAMP

IONEL SOLOMON

LPMC - Ecole Polytechnique - França

O mecanismo responsável pela posição e largura da banda de fotoluminescência no $a-Si:H$ é motivo de animado debate na literatura há mais de 10 anos. Dois modelos foram propostos, ambos descrevendo os resultados experimentais de forma satisfatória a partir de processos físicos diferentes. O modelo chamado da interação elétron-fônon propõe a rede relaxa após a absorção de um fóton pela emissão de fônons, e a banda de luminescência é deslocada por um Stokes shift de 0.4 - 0.5 eV. O modelo da desordem estática atribui a posição e forma da banda de luminescência à distribuição dinâmica de portadores nas caudas exponenciais das bandas. O estudo de $a-Si_{1-x}C_x:H$ oferece a possibilidade de estudarmos um sistema no qual tanto a energia de fônon quanto as inclinação das caudas de banda (parâmetros de Urbach) variam com x. Medimos os espectro de fotoluminescência em uma série de amostras de $a-Si_{1-x}C_x:H$ ($0 < x < 0.4$) preparado por PECVD a partir de misturas SiH_4/CH_4 . A potência fornecida ao plasma durante as deposições estava abaixo do limiar de decomposição primaria do CH_4 ("regime de baixa potência"). Desta forma, praticamente todo o carbono nas amostras está na forma de grupos metil ($-CH_3$), mantendo a hibridização sp^3 do gás no sólido. Esta é provavelmente a liga mais semelhante a $a-Si:H$ existente. Nossos resultados indicam que a desordem estática é a principal responsável pela forma da banda de luminescência no $a-Si:H$, sendo a contribuição da interação elétron-fônon desprezível. Para altas concentrações de carbono ($x > 0.35$) observamos luminescência visível a temperatura ambiente com alta eficiência quântica, da ordem daquela do $a-Si:H$ a 77K.

MEMBRANAS PERMEÁVEIS DE DIAMANTE

M. C. SALVADORI, Y. MIYAO, G. MOSCATI

Instituto de Física - Univ. de São Paulo - São Paulo

As propriedades físicas e químicas do diamante o tornaram um material de vasta aplicação tecnológica. Especificamente membranas permeáveis de diamante são altamente desejáveis para aplicações como: filtros em meios corrosivos, devido o diamante ser quimicamente inerte e resistente mecanicamente; ou ainda como dispositivo para aquecimento ou resfriamento de fluidos, visto que o diamante é um excelente condutor térmico,

sendo cerca de cinco vezes melhor que o cobre a temperatura ambiente. Neste trabalho é realizada a técnica de "Microwave Plasma-Assisted Chemical Vapour Deposition" para crescimento de filmes de diamante. O substrato é molibdênio, sendo que os poros são obtidos através de pó de molibdênio disperso sobre sua superfície, antes do crescimento. Após a deposição, o molibdênio é removido quimicamente, obtendo-se membranas auto-sustentadas de diamante. Os resultados mostram ser possível produzir estas membranas com controle de espessura e densidade de poros, sendo que há uma limitação quanto ao diâmetro de poro, estando este dependente da espessura.

Filmes Finos II (SUF) - 08/06/95

Filmes finos de ligas $a\text{-Si}_x\text{Ge}_{1-x}\text{:H}$ ($x \leq 0.1$) crescidos por co-sputtering

MARCELO MULATO, IVAN EMILIO CHAMBOULEYRON
Unicamp

Atualmente, a utilização de filmes finos de semicondutores amorfos hidrogenados é uma realidade tecnológica e não apenas acadêmica. Dentre esses materiais, há um grande interesse no estudo de ligas silício-germânio amorfas hidrogenadas ($a\text{-Si}_x\text{Ge}_{1-x}\text{:H}$). Um dos principais motivos diz respeito a poder-se obter um material com gap variável desde 1.04 eV ($a\text{-Ge:H}$) até 1.8 eV ($a\text{-Si:H}$). Em particular, como iremos apresentar, baixas concentrações de silício ($x \leq 0.1$) são interessantes por provocar mudanças expressivas nas propriedades eletrônicas do material de partida ($a\text{-Ge:H}$) enquanto as mudanças de gap e hidrogenação são praticamente irrelevantes. Como exemplo temos para $a\text{-Ge:H}$ ($E_g=1.04$ eV, $E_{04}=1.19$ eV, $E_a/E_g=0.44$, $H=5\%$) e para $a\text{-Si}_{0.1}\text{Ge}_{0.9}\text{:H}$ ($E_g=1.04$ eV, $E_{04}=1.21$ eV, $E_a/E_g=0.50$, $H=5\%$), além de diminuição maior que uma ordem de grandeza na condutividade a temperatura ambiente. Nesse trabalho, lançamos mão da larga experiência do Grupo de Conversão Fotovoltáica - Unicamp no crescimento de filmes finos de $a\text{-Ge:H}$ por sputtering: as amostras foram crescidas por co-sputtering, ou seja, adicionando-se pequenos pedaços de silício sobre um alvo de germânio (3"). De acordo com as caracterizações realizadas até o presente momento, acreditamos estar próxima a construção de um dispositivo p-i-n utilizando-se $a\text{-SiGe:H}$ como a camada intrínseca.

Apoio: CNPq, Fapesp

AMORPHOUS $a\text{-C:H:O:N}$ FILMS BY PECVD OF ISOPROPYL ALCOHOL/NITROGEN MIXTURES

STEVEN F. DURRANT, ELIDIANE C. RANGEL,
NILSON C. DA CRUZ, MÁRIO A. BICA DE MORAES
Laboratório de Processos de Plasma, DEA, IFGW,
UNICAMP

Films deposited from a single monomer by plasma enhanced chemical vapour deposition (PECVD) are usually composed of the constituent elements of the monomer. The presence of a suitable comonomer changes not only the plasma conditions, such as the electron temperature, but also the composition of the deposited material. In this work, films were deposited from mixtures of isopropyl alcohol and nitrogen in a deposition system fed with radiofrequency power. Actinometric optical emission spectrometry was used to determine the relative concentrations of species of interest present in the discharge, such as CN, as a function of the proportion of nitrogen in the feed gas, R_n . Films deposited at various R_n were characterized by transmission infrared spectrometry (IRS) and ultraviolet-visible spectrometry (UV-VIS); the former registered the presence of structural groups such as CN, and the latter allowed the determination of optical parameters such as refractive index and optical gap. Relationships between the plasma parameters and the film properties are discussed.

CARACTERIZAÇÃO DE FILMES FINOS DE DIAMANTE CVD PARA APLICAÇÕES ÓPTICAS

NÉLIA FERREIRA LEITE, VLADIMIR JESUS
TRAVA-AIROLDI, EVALDO JOSÉ CORAT, NEIDENEI
GOMES FERREIRA
LAS/INPE

Filmes finos de diamante CVD têm um potencial muito grande para serem usados como revestimento de superfícies para aplicações ópticas devido à combinação de suas propriedades: transparência, dureza, resistência a ataques químicos, e condutividade térmica. As técnicas de rotinas para caracterização da qualidade óptica dos filmes de diamante incluem microscopia eletrônica de varredura, difração de raio-X e espectroscopia Raman e de infravermelho.

Neste trabalho, a partir de resultados obtidos pelas técnicas de caracterização citadas acima, investigou-se a dependência da qualidade óptica com os parâmetros de crescimento do filme de diamante CVD.

Filmes de diamante sobre substrato de quartzo policristalino foram primeiramente crescidos em um reator assistido por filamento quente, onde se verificou uma baixa qualidade óptica dos filmes. Optou-se então para crescimento de filmes de diamante a partir de um plasma de H_2/CH_4 gerado por microondas onde se obtem maior densidade de nucleação e subsequente melhoria na qualidade óptica.

Espera-se com este trabalho desenvolver filmes para

revestimento de componentes ópticos a serem utilizados em subsistemas de satélite científico do INPE.

ESPECTROSCOPIA DE EMISSÃO ÓPTICA EM PLASMA REATIVO DURANTE O CRESCIMENTO DE FILMES DE DIAMANTE CVD

NEIDENEI GOMES FERREIRA, NÉLIA FERREIRA LEITE, VLADIMIR JESUS TRAVA-AIROLDI, EVALDO JOSÉ CORAT
LAS/INPE

O estudo das propriedades ópticas e mecânicas em filmes policristalinos de diamante CVD tem se mostrado de grande interesse científico e tecnológico devido a esses filmes apresentarem as mesmas propriedades físico-químicas do diamante natural.

Espectroscopia de emissão óptica durante o processo de formação dos filmes em reatores de microondas é um método fácil e barato, que pode ser feito sem contato físico, para identificar "in-situ" as espécies estáveis e não-estáveis das reações presentes no plasma. Essas espécies dependem dos gases envolvidos no processo, de suas respectivas concentrações e do substrato.

Este trabalho apresenta os primeiros resultados obtidos em espectroscopia de emissão óptica para filmes de diamante crescidos em substratos de silício e zirconia-céria. Verifica-se que a intensidade de linhas de alguns componentes gasosos está diretamente relacionada com alguns parâmetros de crescimento. Os filmes foram sintetizados por plasma de H_2/CH_4 gerado por microondas para diferentes concentrações da mistura gasosa. Microscopia eletrônica de varredura foi também utilizada para observar tanto o processo de nucleação quanto a morfologia dos filmes.

INFLUÊNCIA DO TRATAMENTO DO SUBSTRATO NA DEPOSIÇÃO DE DIAMANTE POR CVD

SIMONE CAMARGO TRIPPE, ANDRÉ PAES DE ALMEIDA, MARIA CECÍLIA SALVADORI, JOEL C. RUBIM

Instituto de Física da Universidade de São Paulo - São Paulo

Este trabalho tem por objetivo estudar a densidade de nucleação, tamanho de grão, qualidade e morfologia dos cristais, mediante variação da preparação prévia do substrato. Sendo assim foram realizadas deposições em silício policristalino, usando um processo denominado por CVD à plasma de microondas (Deposição Química a Vapor), onde manteve-se os parâmetros de deposição fixados. O tempo de deposição foi de duas horas, ou seja, suficiente para interromper o depósito na sua fase de nucleação. Este estudo gera informações à respeito da interface substrato e cristal de diamante, uma vez que a preparação prévia do substrato está diretamente

ligada a qualidade e a morfologia desses cristais. A caracterização é feita usando Microscopia Eletrônica de Varredura, a qual permite obter informações relacionadas a morfologia dos cristais, densidade de nucleação e tamanho de grão, além da Espectroscopia Raman, da qual tira-se informações das três formas alotrópicas do carbono (grafite, carbono amorfo e diamante) presentes no depósito.

PLASMA-SURFACE INTERACTIONS IN THE DEPOSITION OF a-C:N:H, a-C:H:O AND a-Si:H:N FILMS BY PECVD.

ELIDIANE C. RANGEL

Laboratório de Processos de Plasma, DFA, IFGW, UNICAMP

NILSON C. DA CRUZ, STEVEN F. DURRANT, JORGE H. NICOLA, MÁRIO A. BICA DE MORAES

Laboratório de Processos de Plasma, DFA, IFGW, UNICAMP

In plasma enhanced chemical vapor deposition (PECVD), the surface of the growing film is continuously bombarded by ions and neutrals (in ground and metastable states) and by electrons from the discharge. Excitation and bond breaking of the chemical species on the film surface are thus effects which are expected to occur to a degree that depends on the plasma composition, electron temperature and density. This work describes the results of some experiments in plasma-film surface interactions performed during the PECVD of amorphous films (a-C:N:H, a-C:H:O and a-Si:H:N) in a stainless steel vacuum chamber. The discharges were fed with acetylene- N_2 -He-Ar, acetylene- O_2 -He-Ar and tetramethylsilane (TMS)- N_2 -He-Ar mixtures, and were driven by two parallel plate electrodes connected to a radiofrequency power supply (40 MHz, 100W). Actinometric optical emission spectroscopy was used to investigate the discharges. The appearance of the species CN in discharges of He-Ar mixtures when either an a-C:N:H or a-Si:H:N was present in the chamber, shows that CN particles are desorbed from the film surface by the action of the discharge. Similar observations for the species CO, when an a-C:H:O film was in the chamber, also show that surface effects are responsible for the CO desorption. It should be noted that, even though the species CH is abundant in discharges in which an organic or organometallic gas is present, CH does not seem to be released from the film surface by the discharge in significant concentrations. Results from experiments in which the He/Ar ratio was varied in the He-Ar plasmas, strongly indicate that sputtering, produced by the Ar atoms, and surface interactions involving metastable He atoms are the mechanisms responsible for both the CN and CO desorption. A theoretical

model relating the concentration of the CN and CO species in the discharge, the partial pressures of the He and Ar, and the power applied to the plasma is presented.

STRUCTURAL AND OPTICAL PROPERTIES OF a-C:H:O:F FILMS PRODUCED BY PECVD

NILSON C. DA CRUZ, ELIDIANE C. RANGEL,
STEVEN F. DURRANT, MÁRIO A. BICA DE MORAES
*Laboratório de Processos de Plasma, DFA, IFGW,
UNICAMP*

Fluorinated films deposited by plasma enhanced chemical vapour deposition (PECVD) are typically hydrophobic, resistant to acid attack, exhibit a low coefficient of friction, and show good adhesion to diverse substrates. In addition, the optical properties of the films, such as refractive index n and optical gap E_g , depend on the film structure and composition. As the degree of fluorination of the films is controllable by a suitable choice of monomer and comonomer flow rates, n and E_g can, to some degree, be selected. In this work, fluorinated films were deposited by PECVD of acetone/ sulfur hexafluoride and isopropyl alcohol/sulfur hexafluoride mixtures in a vacuum chamber fed with radiofrequency power. Transmission infrared spectroscopy (IRS) was used to detect the presence of structural groups, such as CF, in films deposited at various proportions of SF₆ in the feed, R_F . Ultraviolet-visible spectroscopy (UV-VIS) data allowed calculation of n and E_g of films deposited at different R_F . Deposition rates, R_d , were also determined as a function of the same parameter. Qualitative explanations of the dependence of n , E_g and R_d on R_F are given.

Study of RF sputtered a-Si:H and a-Ge:H deposition by Photothermal Deflection Spectroscopy

PABLO IVAN ROVIRA, MARCELO MULATO,
FERNANDO ALVAREZ
*Instituto de Física "Gleb Wataghin", UNICAMP,
Campinas*

The growing importance of amorphous materials in the semiconductor technology makes essential the study of the deposition parameters conditions leading to good quality films. In this work we study the quality dependence of a-Ge:H and a-Si:H films deposited by RF Sputtering as a function of the principal growth parameters (substrate temperature, target bias, and H₂ partial pressure in the plasma atmosphere), analysed by Photothermal Deflection Spectroscopy (PDS) and by Infrared Spectroscopy (IR). PDS permits investigate structural disorder and defect density (dangling bonds). Analysis of the IR gives quantitative estimations of hydrogen concentration in the film. We conclude that

bigger substrate temperatures are tempting to better films (lower Urbach tail and defect density). It is well related in the literature that increasing the temperature the mobility of the molecules is bigger, ordering the film structure. The bias seems to be the most important parameter on the control of the material hydrogenation, therefore the sample quality. The hydrogenation tends to an ideal value near 6% for a-Si:H, and 4% for a-Ge:H. The H₂ partial pressure variation does not show significant variations neither on the hydrogenation, nor on the sample quality.

ESTUDOS DA NUCLEAÇÃO DE FILME DE DIAMANTE-CVD A PARTIR DE DIFERENTES FORMAS DE PREPARAÇÃO DE SUBSTRATOS USANDO A TÉCNICA ASSISTIDA POR MICROONDAS

TEÓFILO MIGUEL DE SOUZA
CDT - Centro de Desenvolvimento de Tecnologia e Recursos Humanos, São José dos Campos
VLADIMIR JESUS TRAVA-AIROLDI, EVALDO JOSÉ CORAT, NÉLIA FERREIRA LEITE
LAS/INPE

Há um enorme interesse em filmes de diamante-CVD obtidos a partir da técnica assistida por microondas. Verifica-se que filmes de diamante-CVD crescidos em substratos de Silício $p < 100 >$ e Silício $p < 111 >$ tem apresentado baixo stress e permite controle da nucleação e da taxa de granulação de acordo com o método da preparação do substrato. As superfícies tratadas pelas várias técnicas são analisadas pela microscopia eletrônica de varredura antes e em vários estágios de preparação, nucleação e crescimento dos filmes. A preparação dos substratos de silício utiliza uma mistura apropriada de etanol e pó de diamante tratados em ultra-som, afim de obter uma melhor nucleação e crescimento do filme de diamante-CVD. A técnica de tratamento da superfície do silício foi utilizada para obter condições de uma maior uniformidade de nucleação e, também, permitir a deposição de filmes em grandes áreas com baixo "stress interno", a partir da técnica assistida por microondas.

INFLUÊNCIA DA EXPOSIÇÃO À RAIOS-X SOBRE O COMPRIMENTO DE DIFUSÃO EM FILMES FINOS DE a-Si:H

JOSÉ FERNANDO FRAGALLI
Centro de Ciências Tecnológicas, Universidade do Estado de Santa Catarina - Joinville - SC
LINO MISOGUTI, ANTONIO NORIO NAKAGOITO,
VANDERLEI SALVADOR BAGNATO
IFSC, USP - São Carlos

Nós investigamos o comportamento do comprimento de difusão de filmes finos de a-Si:H depositados pela

técnica de descarga luminescente por rádio frequência, quando amostras deste material são expostas a doses de radiação eletromagnética de alta energia (Raios-X). Resultados mostram que o comprimento de difusão decresce consideravelmente após a irradiação: Para um valor inicial (sem exposição) de 850 nm, após 4 horas de exposição seu valor passa a ser 600 nm. Tudo indica que a radiação induz um processo de degradação das propriedades de transporte do material. Medidas elétricas auxiliares, tais como fotocondutividade e condutividade no escuro em função da dose de radiação corroboram esta análise. o comprimento de difusão foi medido pela técnica conhecida como SSPG (*Steady State PhotocARRIER Grating*).

Obtenção de Filmes Finos de Tântalo por Sputtering DC

CRISTIANA SCHMIDT DE MAGALHÃES, TARCÍSIO ROMERO DE OLIVEIRA, LUIZ ALBERTO CASTRO DE ALMEIDA, YAMATO MIYAO, ALAÍDE PELLEGRINI MAMMANA, CARLOS IGNÁCIO Z. MAMMANA
Centro Tecnológico para Informática - Instituto de Microeletrônica - Laboratório de Mostradores de Informação

IRIS L. TORRIANI, LEIDE PASSOS CAVALCANTI
IFGW - Unicamp

Foi recuperado um sistema de 'sputtering' DC, projetado e construído em nosso laboratório, com o qual vêm sendo obtidos filmes finos de tântalo sobre substratos de vidro e silício monocristalino, buscando-se otimizar suas propriedades físicas e elétricas para utilização em capacitores e transistores de filmes finos para o endereçamento de painéis de cristal líquido. O processo está sendo estudado quanto a: pressões iniciais na câmara (da ordem de 10^{-6} Torr), fluxo de argônio, tensões (1 a 2,3 kV) e correntes (20 a 70 mA) entre alvo e substrato, distância alvo-substrato (65 a 22 mm), tratamento térmico inicial do substrato, condições de limpeza e controle da 'backstream'. Os filmes foram caracterizados quanto à uniformidade da espessura (por perfilometria), resistividade elétrica (por Van der Pauw), composição (por microsonda de elétrons), orientação cristalográfica (por difração de Raio-X), densidade, aderência e seletividade ao ataque químico. Foi ainda estabelecido um processo fotolitográfico para a gravação de estruturas de teste com resolução até 4 micra. Estão também sendo estabelecidos os processos de oxidação térmica e anodização para obtenção de pentóxido de tântalo para passivação dos substratos e confecção das camadas isolantes dos dispositivos.

Coordenação atômica em camadas duras de a-CC(N):H

D. F. FRANCESCHINI, F. L. FREIRE JR

Departamento de Física, PUC-RIO

S. R. P. SILVA

Engineering Department, Cambridge University, Inglaterra

C. A. ACHETE

Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais, COPPE/UFRJ

A fração de átomos de carbono e nitrogênio com estado de hibridização sp^3 , foi obtida por meio de espectroscopia de perda de energia de elétrons (EELS), em camadas duras de a-C(N):H produzidas por PECVD. Os espectros de EELS, obtidos a partir de filmes contendo entre 0 e 11% de nitrogênio, mostraram uma sensível redução na concentração de átomos de carbono em estado sp^3 , mesmo para as concentrações menores de nitrogênio. A fração sp^3 de carbono variou entre 48% (para a amostra livre de nitrogênio) e 11%. Estes resultados mostram estar em em perfeito acordo com a variação da tensão interna compressiva medida nas mesmas amostras, a qual exibiu uma sensível redução em função da incorporação de nitrogênio. A variação da fração sp^3 em função da concentração de nitrogênio, obtida nestas camadas, mostra um comportamento análogo ao obtido anteriormente por outros autores, em filmes não hidrogenados, obtidos por meio de deposição assistida por íons. Este fato é analisado em termos dos possíveis papéis do nitrogênio no estabelecimento do estado de hibridização de átomos de carbono, em filmes de carbono tipo diamante.

Caracterização de filmes de carbono tipo-diamante (DLC) depositados sobre substratos de polímeros estirênicos

S. VASQUEZ, C. A. ACHETE

Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais, COPPE/UFRJ

D. F. FRANCESCHINI, F. L. FREIRE JR

Departamento de Física, PUC-RIO

Uma série de polímeros estirênicamente substituídos foi utilizada como substrato para filmes de carbono amorfo hidrogenado (a-C:H). Para a deposição foi empregada a decomposição de metano por "glow discharge" à rádio-frequência (13.56 MHz), com pressão na câmara de 8 Pa e -370V de autopolarização. Os filmes DLC foram depositados sobre poliestireno - PS, poli(estireno-co-acrilonitrila) - SAN e poli(acrilonitrila-co-butadieno-estireno) - ABS. A estrutura dos filmes DLC formados sobre os polímeros foi caracterizada através de ESCA e espectroscopias infravermelho e Raman. A análise de ESCA permite identificar os elementos e seu ambiente químico. A quantidade relativa de carbonos com hibridização sp^2 e sp^3 é dada pelos espectros de infraver-

melho onde observa-se uma forte banda de absorção na faixa 3300-2850 cm^{-1} , correspondendo ao estiramento de grupos C-H. Os espectros de Raman informam acerca do caráter das ligações sp^2 nos filmes de carbono.

Filmes Finos de Dióxido de Estanho e suas Aplicações

MARCOS ANTONIO SCHREINER, MILTON LUIZ DE PAULA EDUARDO, LUIZ ALBERTO CASTRO DE ALMEIDA, ALAÍDE PELLEGRINI MAMMANA, CARLOS IGNÁCIO ZAMITTI MAMMANA

Fundação Centro Tecnológico para Informática - Instituto de Microeletrônica - Laboratório de Mostradores de Informação

Estão sendo desenvolvidos os processos básicos de fabricação de mostradores de cristal líquido, dentre os quais destaca-se a deposição de filmes finos transparentes e condutores de dióxido de estanho (SnO_2) utilizados nos eletrodos dos mostradores. Foi projetado e construído um sistema simples que opera pela decomposição de vapores de tetracloreto de estanho (SnCl_4 de grau industrial) e metanol (CH_3OH P.A.), carregados para a câmara pelo portador inerte (N_2), sobre os substratos aquecidos a temperaturas na faixa de 270 a 400 C. O processo foi estabelecido de forma a se otimizar as propriedades dos filmes depositados, obtendo-se resistividade elétrica até 2 mohms.cm, transmitância óptica superior a 85%, alta estabilidade química, boa aderência ao vidro e excelente uniformidade da espessura. Testes de dureza Vickers demonstraram que os filmes conferem um aumento na resistência mecânica do vidro, reduzindo micro-trincas e quebras superficiais decorrentes de ações mecânicas. As características físicas, químicas e elétricas obtidas tem viabilizado a aplicação dos filmes em outros dispositivos como telas de toque, tablets, teclados especiais e elementos de aquecimento.

EFEITO DA INCORPORAÇÃO DE CARBONO NO GERMÂNIO AMORFO HIDROGENADO (a-Ge:H)

JOHNNY VILCARROMERO LÓPEZ, FRANCISCO DAS CHAGAS MARQUES
UNICAMP

Neste trabalho realizamos um estudo das propriedades ópticas e estruturais de filmes finos de carbeto de germânio amorfo hidrogenado preparados pela técnica de rf co-sputtering. Um dos objetivos é preparar este material e investigar suas propriedades, e compará-las com seus similares carbetos de silício, que é um material amplamente estudado e de alto valor tecnológico. Para a preparação destes filmes, usamos alvos composto de grafite com pedaços de germânio, colocados sobre o disco de grafite, a fim de obter 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 nos filmes. Observamos que a incorporação de carbono na rede do germânio aumenta a banda proibida óptica. O índice de refração foi obtido através de transmissão óptica. Um estudo sobre os modos vibracionais presentes nas ligas em função do conteúdo de carbono será apresentado. O stress mecânico foi obtido através de medidas do raio de curvatura do sistema filme/substrato utilizando um profilômetro.

————— Apoio: CNPq e FAPESP

Crescimento de Filmes Finos de SiO_2 em Ambientes a Seco e a Vapor

E. A. DE VASCONCELOS, V. L. M. COUTO, E. F. DA SILVA JR

Departamento de Física-UFPE

O crescimento de filmes finos de SiO_2 crescidos termicamente é de grande importância tecnológica entre as etapas de processamento de estruturas e dispositivos microeletrônicos. Neste trabalho apresentamos para filmes finos de SiO_2 térmico crescidos a seco e a vapor resultados experimentais que indicam um comportamento da relação funcional x (espessura do óxido) versus t (tempo de oxidação) na forma $x = at^b$, onde o expoente b varia na faixa $\frac{1}{2} \leq b \leq \frac{3}{2}$ dependendo da região de oxidação (i.e. óxidos finos e/ou espessos). Esta dependência temporal é estudada em função de parâmetros de interesse, tais como pré-processamento, temperatura de oxidação e efeitos da difusão de oxigênio em ambientes a seco e a vapor. Os resultados experimentais obtidos são analisados em termos de teorias modernas de processos de crescimento do SiO_2 térmico e o seu comportamento nos regimes de tempos muito curtos e/ou muito longos estão em excelente concordância com estes modelos. Através desses dados, um novo regime de crescimento de SiO_2 supra-linear é predito.

ESTUDO DE CONTATOS RETIFICADORES EM n-GaAs

ADENILSON JOSÉ CHIQUITO, SÉRGIO MERGULHÃO
UFSCar

Contatos retificadores fabricados pela deposição de diferentes tipos de metais em GaAs do tipo n, com baixa concentração de dopantes, têm sido estudado em nossos laboratórios para o cálculo de fator de idealidade, altura da barreira Schottky e densidade de estados superficiais. Para o cálculo destes parâmetros, é importante o conhecimento do valor da constante de Richardson do material. No entanto, diferentes valores são encontrados na literatura. Foram feitas medidas de corrente em função da tensão aplicada, para temperaturas ente 80 ° K e 310 ° K. O gráfico de Richardson forneceu

o valor de sua constante. A constante de Richardson foi comparada com o valor obtido a partir do gráfico de corrente em função da temperatura, para tensão de polarização constante. Curvas de capacitância em função da frequência entre 1 Hz e 100 KHz foram efetuadas para diversas tensões de polarização direta. O gráfico da capacitância para altas frequências em função da tensão forneceu o valor da largura da camada de depleção e a densidade de impurezas do material. A característica de capacitância para baixa frequência em função da tensão forneceu a densidade e a posição em energia, de estados presentes na camada interfacial entre o semicondutor e o metal.

Efeito dos Parâmetros de Deposição nas Propriedades de Películas de Nitreto de Silício.

EDUARDO MAKOTO SATO

Lab. de Microeletrônica- Escola Politécnica - USP.

MARIA APARECIDA GODOY SOLER

UnB- Departamento de Física

As películas de nitreto de silício foram depositadas em um sistema tipo PECVD (Plasma enhanced chemical vapor deposition) Estudou-se a influência que os principais parâmetros de deposição exercem nas características finais das camadas obtidas. Os parâmetros considerados foram: temperatura do substrato durante a deposição; concentração relativa dos gases reagentes, amônia e silana, e a potência de r.f. aplicada aos gases para gerar o plasma. Através da técnica de elipsometria obteve-se o índice de refração e a espessura das películas depositadas; a incorporação de hidrogênio, a reflectância, a absorbância e o gap óptico de Tauc, foram estimados através de espectroscopia nas regiões de infravermelho, visível e ultravioleta. Através de espectrometria de retroespalhamento RBS obteve-se a composição estequiométrica e as concentrações de silício e nitrogênio. Os resultados mostraram que as características das camadas depositadas podem ser bem controladas, ficando viabilizada a produção de películas de nitreto de silício adequadas à função de camadas anti-refletoras para serem utilizadas em células solares de silício multicristalino. As películas obtidas com as condições de deposição otimizadas apresentaram um bom casamento óptico, para a interface silício/ar, por possuírem índice de refração próximo de 2, espessura de 750Å e um gap óptico em torno de 2,7, sendo transparente à maior parte do espectro visível.

Propriedades ópticas, morfológicas e estruturais de filmes finos de CdS preparados por deposição química

L. C. CARNEIRO, R. C. POMPEI, R. ASSUMPÇÃO
Unicamp

Dispositivos fotovoltaicos baseados em compostos II-VI

vêm despertando contínuo interesse devido à possibilidade de obtenção de heteroestruturas com boas características optoeletrônicas e baixo custo de preparação. Filmes finos de CdS são particularmente importantes pois além deste material apresentar uma ótima largura de banda proibida para aplicações fotovoltaicas, pode ser obtido diretamente através de deposição química, utilizando insumos de baixo custo e um mínimo de gasto energético. Neste trabalho, filmes finos de CdS foram depositados sobre vidro(lâminas de microscópio) utilizando uma solução aquosa contendo essencialmente Acetato de Cádmio como fonte de Cd^{+2} , Tiouréia como fonte de Enxôfre, Tri-Etanolamina como agente complexante e Hidróxido de Amônia como controlador de PH. Camadas altamente aderentes podem ser obtidas em um intervalo

relativamente amplo de condições, com taxas de deposição controladas fundamentalmente pela concentração e fração molar dos reagentes, temperatura e PH da solução. As amostras aqui discutidas foram preparadas a $T=30^{\circ}C$, $PH=11$ e tempos de deposição entre 1h e 6h apresentando espessuras da ordem de 0.5 μm . O objetivo principal deste estudo é estabelecer correlação entre a estrutura e morfologia dos filmes depositados sobre vidro, que frequentemente apresentam um maior grau de descontinuidade quando comparados a depósitos realizados sobre substratos cristalinos, e as propriedades ópticas no visível, UV e IR-próximo. Apresentamos resultados referentes à estequiometria e tamanho de grão(SEM/EDS e XRD) e estimativas de densidades de defeitos nos contornos de grão(SEM/EBIC).

FILMES FINOS DE CN_x PRODUZIDOS POR "RF SPUTTERING"

MÔNICA DE MESQUITA LACERDA, FERNANDO LÁZARO FREIRE JR, DANTE FERREIRA
FRANCESCHINI

Departamento de Física, PUC-Rio

CARLOS ALBERTO ACHETE
COPPE/LEMM, UFRJ

O grande interesse na produção de filmes finos de carbono nitrogenado surgiu quando previu-se teoricamente a existência do nitreto de carbono (C_3N_4), material que teria dureza tão elevada quanto a do diamante. A produção destes filmes tem sido impulsionada devido as suas potenciais aplicações como recobrimentos protetores, revestimentos anti-corrosivos e anti-refletores na região do infra-vermelho. Filmes de 1000 Å - 3000 Å de CN_x foram produzidos através da técnica de "RF Sputtering", com 100% de nitrogênio no plasma, e alta potência (200 W). As técnicas de análise utilizadas foram RBS (Rutherford Backscattering Spectrometry), que possibilita obter as quantidades relativas dos componentes do filme; Reação Nuclear $N^{14}(d,p)O^{15}$, usada para obter a concentração de nitrogênio, ERDA

(Elastic Recoil Detection Analysis) para determinação de hidrogênio no filme. Os resultados obtidos com as técnicas nucleares combinados com o valor da espessura dos filmes medida com um profilometro permitiu determinar a densidade do filme. Espectroscopia Raman foi usada para a análise estrutural dos filmes, permitindo obter informação sobre o grau de desordem do material. Os resultados mostram que a concentração de nitrogênio nos filmes é compatível com a encontrada na literatura, cerca de 40% - 45%, sendo sua densidade menor que 2g/cm^3 . Os filmes são livres de hidrogênio, oxigênio e contaminantes pesados.

PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE FILMES DUROS DE a-C_{1-x}Si_x:H

ANTONIO LUCIANO BAIA NETO⁺, SÉRGIO CAMARGO JR

Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais - UFRJ + Departamento de Química - ICE - UFRRJ

FRIEDHELM FINGER

KFA - Juelich - Alemanha.

Recobrimentos duros de a-C:H, são de grande interesse tecnológico devido sua elevada dureza, baixo coeficiente de atrito, elevada inércia química e resistência ao desgaste. A incorporação de outros elementos a esse material tem sido tema de diversos estudos. Neste trabalho obtivemos filmes duros de a-C_{1-x}Si_x:H ($0 \leq x \leq 0.6$) utilizando uma mistura de SiH₄ e CH₄ em um sistema de deposição química por vapor assistida por plasma (PECVD). Investigamos as propriedades eletrônicas dos filmes com diferentes concentrações de silício. Medidas da condutividade elétrica em função da temperatura indicam o predomínio do mecanismo de Hopping no nível de Fermi, no processo de condução do material. Observamos também que a incorporação de silício eleva a condutividade elétrica. Tratamentos térmicos a 200 °C em amostra com silício incorporado indicam um rearranjo estrutural e consequente redução na densidade de defeitos, fenômenos não observados em filmes de a-C:H puros. Resultados obtidos a partir de ESR mostram uma queda de duas ordens de grandeza na densidade de spins com o aumento da concentração de silício. Observou-se uma relação direta entre o gap ótico e a densidade desses defeitos.

EXPERIMENTOS DE EFUSÃO DE GASES

EM FILMES DE aC:Si:H

RICARDO ASSUNÇÃO SANTOS, ANTÔNIO LUCIANO BAIA NETO⁺, SÉRGIO DE SOUZA CAMARGO JR
Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais - UFRJ + Departamento de Química - ICE - UFRRJ

Experimentos de efusão térmica de gases em amostras de a-C:H com silício incorporado foram realizados com o intuito de obter informações sobre a microestrutura destes filmes. A técnica de efusão consiste em colocar uma amostra em um tubo de quartzo, com pressão na faixa de 10^{-7} torr, e aquecê-lo a uma taxa constante, da temperatura ambiente até cerca de novecentos graus centígrados. Durante o aquecimento monitora-se a saída do gás desejado com a ajuda de um espectrômetro quadrupolar de massa. O estudo dos espectros de efusão pode revelar por qual processo as moléculas de gás são liberadas do filme e, conseqüentemente, revelar sua microestrutura. Neste trabalho consideramos 3 processos principais: explosão de voids isolados, desorção da superfície interna de voids interconectados ou difusão através do material compacto. Observou-se que, à medida que o silício é incorporado ao material, o pico de efusão de hidrogênio inicialmente cresce e se alarga e, para concentrações de silício maiores, diminui e se desloca para temperaturas mais altas, se tornando cada vez mais largo. Os espectros de efusão de metano apresentam picos estreitos que não se deslocam quando se adiciona silício aos filmes, porém apresentam uma diminuição abrupta. Filmes com cerca de 5 at.% de silício apresentam picos uma ordem de grandeza menores que os filmes de a-C:H puros. Para filmes com concentração de silício igual a cerca de 40 at.% foi feito um estudo da influência da espessura no espectro de efusão de hidrogênio. Verificou-se que na medida em que se aumenta a espessura, o pico se desloca para temperaturas mais altas. Filmes com baixa concentração de silício foram depositados em plasma ricos em hélio para observar a possível incorporação de moléculas do gás no interior dos voids presentes no filme.

Workshop: Sistemas Magnéticos Epitaxiais (SUF/MAT/MMM) - 09/06/95

The Growth and Structure of Epitaxial Magnetic Metal Films

DAVID D. CHAMBLISS

IBM Research Division, Almaden Research Center, 650 Harry Road, San Jose CA 95120-6099, USA

For a number of years, the techniques of epitaxial growth have been applied to magnetic films, in particular to magnetic metals grown on nonmagnetic metal substrates. By analogy with epitaxially grown semiconductor devices, epitaxial magnetic films would appear to be attractive in magnetic devices, especially for increasing magnetic storage densities and thus shrinking device length scales. This talk will discuss some of the serious challenges faces when

epitaxy of magnetic materials is attempted, including high surface energies, structural instabilities, difficulties in assessing the quality of epitaxy, and sensitivity to contamination. These issues will be addressed with specific reference to the prototype system of Fe on Cu(100), using scanning tunneling microscopy and other experimental results where appropriate. Other examples of epitaxial magnetic films will be discussed where appropriate and as time permits.

This work was done in collaboration with R.J. Wilson, S. Chiang, K.E. Johnson, and K. Kalki, and it was supported in part by the Office of Naval Research (N00014-89-C-0099).

RHEED INTENSITY OSCILLATIONS DURING EPITAXIAL GROWTH OF FCC Fe(001)

W. KEUNE, A. SCHATZ

Laboratorium fuer Angewandte Physik, Gerhard-Mercator Universitaet, D-47048 Duisburg, Germany

Great efforts have been made in understanding the relationship between growth, structure and magnetic properties of epitaxial ultrathin metal films [1], such as, for instance, metastable fcc-like Fe on Cu(001). The continued interest in this system is based on its unusual magnetic properties which are correlated to details of the film preparation conditions [1,2]. For the Fe/Cu(001) system, we have performed a systematic reflection high-energy electron diffraction (RHEED) study [3] under various film-growth conditions. Regular intensity oscillations in the specular beam of RHEED observed during epitaxial growth are generally considered to imply that growth proceeds predominantly via a 2D layer-by-layer process. We demonstrate that under the same growth conditions the observed pattern of RHEED oscillations is strongly influenced by the chosen diffraction condition. The RHEED intensity at an off-specular-beam position (along the (00) rod) generally shows about ten equally spaced oscillations during epitaxial growth of Fe between 340-370 K, including the initial stages of growth, thus indicating predominantly atomic layer-by-layer-like growth up to ca. 10 ML Fe. By contrast, for the same growth conditions, the RHEED intensity at the on-specular-beam position behaves irregularly below ca. 5 ML Fe due to the sensitivity to (4x1)- or (5x1) surface reconstructions under these diffraction conditions, but not due to 3D island growth. For growth at 300 K, initial Fe-bilayer-island formation followed by layer-by-layer growth above 2 ML Fe is observed at the largest deposition rates; by decreasing the deposition rate, however, the intensity of the first RHEED oscillation peak increases continuously, which suggests a gradual reduction of initial Fe-bilayer formation in favor of layer-by-layer-like growth. Work supported by the Deutsche Forschungsgemeinschaft (SFB166)

[1] S.D. Bader, Dongqi Li, and Z.Q. Qiu, *J. Appl. Phys.* 76, 6419(1994)

[2] R.D. Ellerbrock, A. Fuest, A. Schatz, W. Keune, and R.A. Brand, *Phys. Rev. Lett.*, in press

[3] A. Schatz, S. Dunkhorst, S. Lingnau, U. von Hoersten, and W. Keune, *Surf. Sci.* 310, L595(1994)

Magnetic Phase Transitions in Epitaxial Fe/Cr Superlattices

ERIC E. FULLERTON

Materials Science Division, Argonne National Laboratory, Argonne, IL 60439, USA

Growth of epitaxial superlattices allows the interlayer coupling and magnetic anisotropy to be tailored to probe rather subtle magnetic ordering transitions. We discuss two types of ordering transitions in Fe/Cr superlattices, the surface spin-flop transition in Fe/Cr(211) superlattices and the Neel transition in the Cr spacer layers in Fe/Cr(100) superlattices. The surface spin-flop transition is a first-order, field-induced phase transition in antiferromagnets with uniaxial magnetic anisotropy and the field applied along the easy direction. It was first predicted over 25 years ago, but not realized experimentally until the present work. In Fe/Cr(100) superlattices, the antiferromagnetic ordering of the Cr spacers results in anomalies in a variety of physical properties, including the interlayer coupling, remanent magnetization, coercivity, magnetoresistance and resistivity. The transition temperature is strongly Cr thickness dependent. A 'transition-temperature shift exponent' can be extracted including data in the thick Cr regime (160 Å) and discussed in terms of the combination of finite-size and spin frustration effects.

Work supported by the U.S. Department of Energy, Basic Energy Sciences-Materials Sciences, under contract No. W-31-109-ENG-38.

Epitaxia de Semicondutores Mediada por Surfactantes

WAGNER NUNES RODRIGUES

UFMG

A associação de materiais com diferentes propriedades é um dos principais objetivos em ciências dos materiais atualmente. Entretanto as escolhas possíveis de materiais levando a camadas epitaxiais de alta qualidade são limitadas pelo desacordo de malha e por considerações de energia livre de superfície. No entanto tem sido observado que certas espécies químicas modificam o modo de crescimento de sistemas altamente tensionados, alterando a espessura crítica do filme pseudomórfico e mesmo suprimindo a transição de camada a camada para ilhas, normalmente observada em filmes altamente tensionados. As espécies químicas responsáveis por esse fenômeno são chamadas surfactantes e citam-se, como exemplo, o caso do As, Te ou Sb no sistema Ge/Si e Te no caso InAs/GaAs.

Serão apresentados resultados de estudos por fotoemissão de níveis de caroço e com resolução angular, difração de elétrons e Rutherford Backscattering para os sistemas InAs:Te:GaAs, Ge:Te:Si e GaAs:Pb:GaAs. Os resultados experimentais junto com cálculos de primeiros princípios levam a uma nova interpretação do papel exercido pela espécie surfactante, em contraste com as proposições mais em uso.

Crescimento Epitaxial de Siliceto de Cromo Sobre Silício (111)

C. A. ACHETE

COPPE /UFRJ, Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais

H. NIEHUS

Humboldt Universität, Berlin

WAGNER NUNES RODRIGUES

Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte

Neste trabalho descrevemos os resultados do estudo sobre os primeiros estágios do crescimento do siliceto de cromo sobre substrato de silício monocristalino (111) reconstruído 7×7 . Para este estudo foram utilizadas as técnicas de Microscopia de Tunelamento de Varredura (STM) em conjunto com Difração de Elétrons de Baixa Energia (LEED) e Espectroscopia de Elétrons Auger (AES). Camadas de Cromo variando em espessura entre 0,5 monocamada e 10 monocamadas foram depositadas "in situ" por feixe de elétrons a pressão menor que 3×10^{-10} Torr. Foi também verificada a influência da temperatura do substrato durante a deposição de Cr no crescimento epitaxial do siliceto. Melhor epitaxia foi obtida para filmes depositados entre 600 e 650 C.

EPITAXIA DE Fe CFC SOBRE $\text{Cu}_{84}\text{Al}_{16}(100)$ INVESTIGADA POR FOTOEMIÇÃO INDUZIDA POR RADIAÇÃO SÍNCROTRON

WALDEMAR AUGUSTO DE ALMEIDA MACEDO

Centro de desenvolvimento da Tecnologia Nuclear, Belo Horizonte

FAUSTO SIROTTI, GIORGIO ROSSI, GIANCARLO PANACCIONE

Laboratoire pour l'Utilisation du Rayonnement Electromagnetique, Orsay

AXEL SCHATZ, WERNER KEUNE

Universität Gerhard Mercator, Duisburg

Investigamos, pela primeira vez, o crescimento de Fe sobre a superfície de $\text{Cu}_{84}\text{Al}_{16}(100)$, a diferentes temperaturas (150 K, 330 K e 400 K), para coberturas de Fe entre 1.8 Å e 18 Å (1 - 10 ML), utilizando fotoemissão estimulada por radiação síncrotron (SR-PES). Do ponto de vista do magnetismo do Fe γ , $\text{Cu}_{84}\text{Al}_{16}$ é um substrato altamente interessante para o seu crescimento epitaxial, uma vez que o mesmo apresenta parâmetro de rede pouco maior que aquele calculado para a instabilidade magneto-volumétrica prevista para essa fase do Fe. A caracterização do substrato e dos filmes de Fe foi feita pela análise dos picos Fe-3s, Fe-3p, Al-2p, Cu-2p, Cu-3d e bandas de valência e o crescimento epitaxial controlado por LEED. A superfície do $\text{Cu}_{84}\text{Al}_{16}(100)$ foi estudada para fótons incidentes de diferentes energias, entre 140 eV e 400 eV, pela evolução dos sinais Cu-3p e Al-2p. A comparação da razão de intensidades entre os picos de Cu e Al com aquelas obtidas dos valores calculados por Yeh e Lindau para as seções de choque para fotoionização indica uma superfície rica em Al. A análise dos espectros de fotoemissão do Fe mostra que não há formação de ligas na interface Fe/CuAl, resultando no crescimento de filme de Fe de estrutura cfc, conforme confirmado por LEED. À temperatura ambiente ou acima desta, há ocorrência de interdifusão de Al na interface Fe/CuAl, como é evidenciado principalmente pelos espectros das bandas de valência, medidos a 150 eV.

**COMPARAÇÃO DAS IMAGENS DE
MICROSCÓPIO ELETRÔNICO E DE
TUNELAMENTO DAS SUPERFÍCIES DE
AMOSTRAS DE (100) n-InP ATACADAS
FOTOELETRQUÍMICAMENTE**

NEIDENEI G. FERREIRA, DAVID SOLTZ, LUCILA
CESCATO

Laboratório de Óptica, DESCM - IFGW - UNICAMP

MAURÍCIO KLEINKE

Laboratório de Interfaces, DFA - IFGW - UNICAMP

Neste trabalho as imagens das mesmas amostras obtidas através de um microscópio de tunelamento e de um microscópio eletrônico de varredura são comparadas visando-se analisar as microestruturas desenvolvidas na superfície e identificar planos cristalinos revelados através do ataque fotoeletroquímico em amostras de (100) n-InP. As imagens SEM exibem a forma e a orientação das microestruturas, permitindo também vistas das seções transversais de clivagem dos cristais, enquanto que o microscópio de tunelamento fornece imagens tridimensionais da topografia da superfície que devem ser cuidadosamente analisadas para se identificar os verdadeiros planos cristalinos. Ambos os métodos confirmam o aparecimento dos planos 111 agudos, compostos apenas de Índio que devem ser os mais lentamente atacados. As imagens SEM das seções transversais das amostras mostram o aparecimento de uma estrutura multifacetada que não é observada nas imagens do microscópio de tunelamento e que exibe planos de Índio obtusos.

**Campo Elétrico Local e Probabilidade de
Tunelamento de Elétrons**

MARCELO MEDALHA MOLLIÇONE, LUIS CARLOS
OGANDO DACAL, CAIO MÁRIO CASTRO DE
CASTILHO
UFBA

O tunelamento de elétrons através de uma barreira de potencial é o mecanismo básico no processo de formação da imagem no Scanning Tunneling Microscope (STM) e no Field Ion Microscope (FIM). As soluções analíticas para a probabilidade de tunelamento sempre assumem um campo elétrico constante. Algumas soluções numéricas consideram a variação local do campo no que se refere à posição do núcleo atômico mas não à variação ao longo da barreira de potencial. Esta limitação de cálculo conflita com o fato de que é a variação local do campo o fator que regula o contraste da imagem. Neste trabalho consideramos, pela primeira vez segundo o nosso conhecimento, a variação do campo elétrico ao longo da barreira de potencial e as suas consequências tanto na determinação da probabilidade de tunelamento como na determinação dos pontos de retorno clássico.

**Electronic properties for Sb on GaAs(110) in
the sub-monolayer coverage regime**

RITA MAGRI, FRANCA MANGHI, CARLO CALANDRA
Universit  di Modena, Italy

We present a theoretical investigation of the electronic structure of a Sb/GaAs(110) interface in the sub-monolayer coverage regime. To model the Sb islands we have considered a 4×1 (110) surface unit cell in which the Sb chains have been truncated, obtaining a coverage $\theta = 0.625\text{ML}$. By full ab-initio total energy minimization, we have determined the equilibrium geometry for Sb terraces and for the GaAs substrate. We found that the buckling between the inequivalent Sb atoms along the growth direction (i.e. the [110] direction) is enhanced compared to the full monolayer coverage case. The single particle band structure shows electronic states highly localized on the terrace edges whose energy falls inside the optical gap. They are associated with the incomplete bonding of Sb and substrate atoms. The interface turns out to be metallic, contrary to the experiment. We show that the inclusion of the Hubbard correlation with an on-site Coulomb interaction parameter U larger than 3 eV is able to reproduce the insulating character of the interface.

Filmes Finos e Superfícies (SUF) - 09/06/95

**ADSORÇÃO DE CRIPTÔNIO EM VIDRO E
VIDRO RECOBERTO COM RUBÍDIO**

M. E. BASSOLS, E. LERNER
IF/UF RJ

Isotermas de adsorção de Criptônio em vidro Pyrex e vidro Pyrex recoberto com Rubídio foram medidas a 77,6 K usando o método volumétrico. Verificou-se que para a isoterma de Criptônio sobre o vidro com Rubídio, a adsorção é da ordem de dez vezes menor do que a do Criptônio sobre vidro puro. Comparando-se com os dados obtidos anteriormente para o sistema *Kr/vidro*, estima-se que o calor isostérico de adsorção do Criptônio no Rubídio é aproximadamente 130 K. Este resultado apesar de não ser preciso, devido à inhomogeneidade do *Rb* e às correções necessárias devido a forte interação *Kr/vidro*, está de acordo com previsões teóricas e resultados experimentais obtidos indicando a fraca interação de gases nobres com metais alcalinos.

Avanço nas medidas de condutância em filmes de Langmuir

AILTON CAVALLI, OSVALDO N. OLIVEIRA JR
Instituto de Física de São Carlos, - USP (Grupo de Polímeros)

Uma controvérsia sobre a possibilidade de medir a condução protônica em filmes de Langmuir depositados sobre água pura vem sendo alimentada por diversos grupos, nos Estados Unidos e Rússia. Resultados com filmes de fosfolipídios dariam suporte à tese da condução protônica ao longo de membranas celulares, uma vez que biomembranas podem ser tratadas, a grosso modo, como bicamadas de fosfolipídios. Estas medidas na interface filme/água são normalmente realizadas imergindo parcialmente eletrodos na subfase aquosa, e medindo-se a condutância à medida que o filme de Langmuir vai sendo comprimido. Dois problemas têm sido alvos de crítica nestas medidas: o pequeno aumento da condução devido à organização da monocamada em relação à condução de volume da subfase aquosa e o chamado efeito do menisco, no qual a área imersa do eletrodo diminui quando a tensão superficial começa a diminuir. Nesse trabalho estes problemas são eliminados através do uso de um sistema diferencial com um arranjo especial de eletrodos. Os resultados obtidos para filmes de Langmuir de fosfato de dihexadecila (DHP) e diestearoil fosfatidil colina (DSPC) mostram de maneira inequívoca que há um aumento de condutância da ordem de 10^{-8} S/cm, tanto a.c. como d.c., quando um filme é comprimido acima de uma densidade crítica. Pode-se afirmar que as dúvidas com relação à provável existência de condução em filmes de Langmuir foram completamente dirimidas.

PROPRIEDADES ÓPTICAS DE FILMES FINOS DE YTRIA (Y_2O_3)

MÁRCIA A. FOGARIN DESTRO, LUIZ C. M. LAVRAS,
 ALVARO J. DAMIÃO
IEAv - CTA

O estudo das propriedades ópticas da yttria, sob a forma de monocamada de filme fino, produzida por evaporação com feixe de elétrons, tem como objetivo medir a transmitância, a absorção e o índice de refração deste material, para utilizá-lo na produção de dispositivos ópticos. Neste trabalho são apresentados espectros de transmissão de filmes finos de Y_2O_3 . Estes espectros revelam que tais filmes têm uma pequena absorção, que não foi descrita na bibliografia disponível. Apresenta-se também medidas de índice de refração obtidas com a técnica de Modos Guiados, utilizando-se prismas de três materiais diferentes: SF11, safira e rutila. Observou-se com estas medidas que o filme fino obtido apresenta índice de refração menor que o descrito na bibliografia. Em um próximo trabalho, filmes finos de Y_2O_3 serão depositados em câmara de evaporação contendo

O_2 em diferentes pressões, para verificação de possível mudança da estequiometria do filme e conseqüente mudança das propriedades ópticas.

Análise e avaliação do stress induzido pela deposição de uma camada de SiOx, em uma das faces de um laser de InGaAsP/InP

EDMILSON J. T. MANGANOTE, JOSÉ R. FILHO
CPqD-TELEBRAS S/A

A emissão estimulada em lasers de InGaAsP/InP é usualmente polarizada no modo TE. Na presença de um stress suficientemente alto na região ativa, podemos ter uma emissão estimulada na polarização TM, acima do limiar. Pode-se identificar a presença e estimar a magnitude do stress, através da análise dos espectros de emissão polarizada nos modos TE e TM. Um stress compressivo uniaxial tem sido relacionado com mal casamento da rede, expansão térmica das camadas, metalização, solda, etc. Neste trabalho, avaliamos experimentalmente a introdução de um outro fator, a deposição de uma camada de monóxido de silício em uma das faces. Para esta análise consideramos três etapas; o dispositivo antes da soldagem, após a soldagem e após a deposição da camada de monóxido de silício. Em cada etapa analisamos o espectro de emissão dos modos TE e TM.

FORMAÇÃO DE AUSTENITA E EFEITOS DE IRRADIAÇÃO DE Ar E Kr EM AÇOS CARBONO NITRETADOS A PLASMA

GABRIEL SIMON, CARLOS ALBERTO DOS SANTOS,
 MARCOS A. ZEN VASCONCELLOS, MARCOS R. F. SOARES
IF-UFRGS

Formação de austenita em aços carbono nitretados a plasma tem sido observada tanto em amostras após nitretadas, quanto em amostras submetidas a tratamentos térmicos nas temperaturas de 550 e 600°C, quando ocorre a decomposição da camada de compostos. Este comportamento foi observado apenas em aços onde a camada de compostos era fundamentalmente nitretos γ' , isto é, em amostra nitretadas em tempos iguais ou superiores a 60 min. A formação de austenita se dá a temperatura inferior a temperatura de equilíbrio no diagrama de fase que é 590°C, sendo que as amostras são nitretadas a temperaturas de 450°C. Amostras nitretadas em 15, 30, 60 e 120 min foram irradiadas com Ar e Kr e submetidas a recozimentos seqüenciais em 250, 320, 400, 500, 600°C. A implantação de Ar e Kr foi feita

com diferentes energias de modo a produzir um platô de 1000Å a partir da superfície da amostra. Observou-se que o principal efeito da irradiação foi a formação de nitretos ricos em nitrogênio do tipo $\epsilon - Fe_{2+x}$, isto é, num processo de dissolução e reprecipitação houve a formação de finíssimos precipitados de nitretos ϵ nos contornos de grão dos grandes grãos das amostras como nitretadas. As amostras foram analisadas por CEMS (Espectroscopia Mössbauer de Elétrons de Conversão), CXMS (Espectroscopia Mössbauer de Raios-X de Conversão), GXR (Difração de Raios-X a Ângulo Rasante), microsonda e reação nuclear.

ESTUDO DA RELAÇÃO ENTRE ESCALAS DE COBERTURA DE FILMES DE 3He ADSORVIDO, POR ISOTERMAS DE ADSORÇÃO.

GELSON DE CARVALHO LEÃO, RAUL EDGARDO RAPP, EUGENIO LERNER

Instituto de Física da Universidade Federal do Rio de Janeiro

HENRI GODFRIN

Centre de Recherches sur les Très Basses Températures

O sistema bidimensional 3He adsorvido em grafite apresenta uma grande variedade de propriedades magnéticas e estruturais. Resultados complementares obtidos por diferentes técnicas experimentais, e em diferentes laboratórios, são muito importantes para uma melhor compreensão deste sistema. Entretanto, a comparação de tais resultados conduz ao problema de escalas de cobertura e a relação entre elas, sendo que a cobertura pode ser obtida por diferentes métodos e através de distintos sistemas adsorvidos, independentemente da técnica experimental utilizada para o estudo das propriedades do sistema em questão. O objetivo da pesquisa é comparar as coberturas correspondentes a uma monocamada, calculadas a partir de diversas isotermas de adsorção, obtidas de diferentes sistemas adsorvidos, utilizando o mesmo substrato e a mesma aparelhagem. Deste modo, pode-se estabelecer o percentual de desvio nas várias determinações e comparar com o que é obtido através de medidas efetuadas nos mesmos sistemas e em diferentes laboratórios. Isto permite, portanto, verificar o quanto é válido comparar estas escalas de cobertura obtidas por diversos laboratórios, pois não há na literatura estudo semelhante ao que estamos realizando. Neste trabalho, tentamos estabelecer uma correlação entre algumas das distintas escalas de cobertura, através de medidas de isotermas de adsorção em Grafoil (grafite exfoliado comprimido). Medimos, até o momento, isotermas de N_2 a 74K, Kr a 77K e 3He a 4.0K e 4.2K, que estão associadas às calibrações mais utilizadas.

DEPOSIÇÃO DE FILMES METÁLICOS EM CAVIDADES DE BOMBEIO PARA LASERS

DIVA GLASSER LEME, SOLANGE EIKO MITANI, WAGNER DE ROSSI

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

A função de uma cavidade bombeadora de um laser de estado sólido é transferir a energia luminosa da lâmpada para o elemento laser ativo (bastão). A eficiência de um laser do estado sólido depende muito da maneira com a qual se faz a transferência da energia de bombeio para o meio laser ativo. O laser será mais eficiente quanto maior for a quantidade de luz absorvida pelo bastão e a cavidade deve ter uma geometria adequada para esta transferência, devendo refletir os comprimentos de onda de absorção do meio laser. A geometria desta cavidade elíptica ou cilíndrica dependerá do tipo de laser em questão. Nestas cavidades são depositados filmes de Au ou Ag em alto vácuo para obtermos uma superfície refletora. Neste trabalho mostraremos os resultados de eficiência e durabilidade destes filmes refletores, para lasers de neodímio com bandas de absorção entre 400 e 850 nm.

EFEITO DA ENERGIA DE ÍONS DE OXIGÊNIO NA FORMAÇÃO DE FILMES FINOS DE ÓXIDO DE ZIRCÔNIO COM MÉTODO DE "ION AND VAPOR DEPOSITION"

MASAO MATSUOKA, SADA O ISOTANI, JOSÉ FERNANDO DINIZ CHUBACI, SHIGUEO WATANABE

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

NAOTO KURATANI, KIYOSHI OGATA

R&D Div., Nissin Electric Co. Ltd., Kyoto, Japan

YUJI SETSUHARA, SHOJI MIYAKE

Welding Research Institute, Osaka University, Osaka, Japan

Filmes finos de ZrO_2 foram formados em substratos de Si(111) usando um sistema de "Ion and Vapor Deposition (IVD)" com uma fonte de íons tipo "bucket" baseada na "Electron Cyclotron Resonance (ECR)" e um evaporador por feixe eletrônico. A energia dos íons de oxigênio foi escolhida de 2, 5, 10, 20 keV e a razão de transporte Zr/O foi fixa em 0,92 e 2,3. O resultado dos dados obtidos com a difratometria de raios-X mostra um pico a $2\theta = 30^\circ$ que coincide com o plano (111) do cristal de ZrO_2 na estrutura tetragonal e indica que quanto maior a energia dos íons e/ou quanto maior a

razão de transporte, maior a orientação de (111) de ZrO_2 o filme apresenta. A análise dos espectros obtidos com a técnica "X-ray Photoelectron Spectroscopy (XPS)" demonstra que a razão de composição Zr/O dos filmes formados atinge seu máximo a 10 keV de energia dos íons e que há crescimento na produção de Zr^{3+} e Zr^{2+} quando aumenta a razão de transporte.

MEDIDAS DE RESISTIVIDADE *IN SITU* DE MULTICAMADAS DE Fe-Zr DURANTE REAÇÃO DE ESTADO SÓLIDO

MARINES GRANDE MALCUM MIRANDA, ROSALVO MÁRIO NUNES MIRANDA, ANDREA PAESANO JR, MARCOS ANTÔNIO ZEN VASCONCELLOS, MARIO NORBERTO BAIBICH, LIVIO AMARAL

Instituto de Física, UFRGS

A reação de estado sólido em multicamadas metálicas induz a formação de fases na interface das camadas elementares. Usualmente as fases formadas são identificadas e a cinética da reação analisada. Para um dado par de reação, A e B, verifica-se que as fases reagidas bem como a taxa de reação dependem da temperatura e da geometria dos filmes. Técnicas como Espectroscopia Mössbauer, difratometria de raios-X, microscopia eletrônica, magnetização, etc. tem sido usadas em um grande número de amostras para identificar as fases formadas e estimar a taxa de crescimento das mesmas. Por outro lado, as propriedades de transporte também variam de acordo com a evolução da reação. Assim, a medida de variação da resistividade do filme é uma técnica apropriada para observação da cinética de reação no filme enquanto esta se processa. Neste trabalho medimos *in situ* a variação da resistividade ρ em função do tempo em multicamadas de Fe-Zr quando tratadas termicamente nas temperaturas de 300, 360 e 420 °C. As curvas $\rho/\rho_0 \times t$ obtidas revelam um comportamento sigmoidal para o processo de modificação das multicamadas. Esta modificação tratada com base na teoria de Johnson-Mehl-Avrami para transformações heterogêneas, permitindo a obtenção de parâmetros cinéticos do processo. Supondo que a fase amorfa cresce planarmente calculado o coeficiente de interdifusão, D_{am} , da fase amorfa dentro de modelos da literatura. Os resultados da cinética de modificação são discutidos com relação aos modelos que propusemos anteriormente para medidas de Espectroscopia Mössbauer neste sistema.

MULTICAMADA Eu/Fe: UM ESTUDO SOBRE A FORMAÇÃO E IDENTIFICAÇÃO DE ÓXIDOS

WLADIMIR HERNANDEZ FLORES, JOÃO BATISTA MARIMON DA CUNHA

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

WIDO HERWIG SCHREINER

Universidade Federal do Paraná

Neste trabalho são apresentadas medidas de difração de raios-X (r-X), de espectroscopia Mössbauer de elétrons de conversão (CEMS) no ^{57}Fe e no ^{151}Eu e levantadas as curvas de histerese magnética na multicamada $[[\text{Eu}(3\text{nm})/\text{Fe}(3\text{nm})]_{15}/\text{Fe}(3\text{nm})]$ evaporada sob um substrato de Si(111). Os resultados de r-X e CEMS indicam que uma pequena quantidade de EuO é formada nas multicamadas durante a deposição. A multicamada foi tratada termicamente a 320 °C numa pressão de 10^{-2} torr por 1, 3, 6, 8 e 9 horas e submetida a duas implantações de Ar com 350 keV nas doses de 10^{14} e 10^{15} íons/cm². Em todas as amostras com tratamento térmico o r-X e CEMS no ^{151}Eu mostram somente Eu_2O_3 , e CEMS no ^{57}Fe mostra ferro metálico, Fe_3O_4 e uma fase de óxido não esperada. Esta última fase é atribuída a ocupação de vacâncias ou substituição dos íons de Fe por íons de Eu^{3+} nos sítios octaédricos do Fe_3O_4 , e aumenta com a evolução temporal dos tratamentos térmicos. Para tempos acima de 6 horas observa-se nitidamente uma fase de óxido de ferro paramagnético. As medidas de magnetização revelam um acoplamento antiferromagnético entre as camadas e uma redução na magnetização de saturação com os tratamentos térmicos, estabilizando-se a partir do tratamento de 6 horas. A multicamada implantada nas diferentes doses apresenta somente uma oxidação de certa fração das camadas de európio e também mostra uma redução nas magnetizações de saturação.

PHASE TRANSFORMATION INDUCED BY Ar^+ AND Xe^+ IRRADIATION ON β -NiAl THIN FILMS

ROSALVO MÁRIO NUNES MIRANDA, MARCOS ANTÔNIO ZEN VASCONCELLOS, MARIO NORBERTO BAIBICH

Instituto de Física, UFRGS

JOSÉ ANTÔNIO TRINDADE BORGES DA COSTA
UFESM

Phase transformations induced by ion beam bombardment have been investigated by *in situ* electrical resistivity measurements "during" irradiation. The previously described measuring method allows for a step by step study of the transformations.

Thin-film samples were made by sequential electron-gun evaporation of alternate layers of Ni and Al, in the form $(\text{Ni}(50 \text{ \AA})/\text{Al}(75 \text{ \AA}))_n$, $n=(2,3,4,5,6,7)$, producing thicknesses of 25 to 75 nm. The samples were deposited over a SiO_2 substrate using a masking system to obtain the four probe geometry. Multilayers were submitted to 773K over 2 hours to induce an homogeneous β -NiAl alloy. Ion irradiations were performed with 120 keV of Ar^+ and 300keV of Xe^+ , and both cases end with final doses in range of 1 to 2 E15 ions/cm²; the substrate was kept at 77K. Low currents (25 nA to 100 nA) were used to prevent sample heating. Electri-

cal resistivity was measured using conventional AC four probe technique and the resolution was better than 50 ppm in this computer controlled system.

The resistivity vs. dose plots, X-ray diffratograms, electronmicroprobe analysis results and resistivity vs. temperature, at both high and low temperatures, allow the identification of equivalent thermal processes, as well as to propose a dominant mechanism for the modification of the structure of the films that is related to the parameters of the collision cascades.

Amorização por Reação de Estado Sólido em filmes finos de $Fe_{50}Zr_{50}$

MAGALE ELISA BRÜCKMANN, ANDREA PAESANO JR, SÉRGIO RIBEIRO TEIXEIRA, LÍVIO AMARAL
Instituto de Física - UFRGS

A reação de estado sólido em multicamadas de filmes finos produz fases reagidas dependentes da temperatura e da geometria. O objetivo deste trabalho é acompanhar a formação por RES e a cinética de crescimento das fases em três séries de amostras de $Fe_{0.50}Zr_{0.50}$. Multicamadas de FeZr na concentração 50% at Fe preparadas por evaporação sequencial através de um sistema de feixe duplo de elétrons em três diferentes geometrias mas com mesma espessura total (Série 1: 16 bicamadas de 25Å Fe/50Å Zr, Série 2: 8 bicamadas de 50Å Fe/100Å Zr, Série 3: 5 bicamadas de 80Å Fe/160Å Zr) foram tratadas termicamente a 350°C em alto vácuo em tempos de recozimento entre 15min e 24h. Para essa temperatura e concentração verifica-se a formação de uma fase amorfa a qual foi quantificada, para cada uma das séries, através da espectroscopia Mössbauer de elétrons de conversão (CEMS) e medidas de Magnetometria. Os resultados de cinética de formação obtidos por CEMS e Magnetometria são analisados em termos do modelo por nós desenvolvido anteriormente e a formação da fase amorfa é descrita qualitativamente em termos do diagrama de energia livre para o sistema levando em conta as variáveis termodinâmicas disponíveis na literatura para este sistema.

ABSORVEDOR SELETIVO PARA CAPTAÇÃO DE ENERGIA SOLAR

WALTER M. LIMA, ANTONIO J. PALANGANA, LORIL L. BUENO, OSVALDO J. DOS SANTOS
Universidade Estadual de Maringá

A seletividade espectral de camadas de níquel e ferro em placas de alumínio comercial por de anodização em ácido fosfórico diluído, e seguida via ac eletrólise com as soluções de sulfato de níquel e sulfato de ferro, foi desenvolvida e utilizada em coletores solares planos providos de tubos de calor. Os tubos de calor tem a função de fazer a troca térmica entre as placas absorvedoras de calor e a água a ser aquecida. As propriedades óticas foram analisadas a partir das medidas de refletância no

domínio de comprimento de onda no intervalo de 0,35 a 20 μm . A eficiência térmica deste dispositivo, aliada a baixa degradação térmica das placas absorvedoras de calor e do sistema como um todo, mostram a sua viabilidade como um processo alternativo e prático na captação de energia solar para aquecimento de água.

STUDY OF LATTICE SITES OF Fe DILUTED IN $^{57}Fe/X(X = Ca, Sc, Y)$ FILMS

E. C. PASSAMANI, ELISA BAGGIO-SAITOVITCH

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

V. A. PEÑA RODRÍGUEZ

Universidad Nacional Mayor de San Marcos. Facultad de Ciencias Físicas. Lima-Perú

In this work we will show some results about the behaviour of diluted Fe in several metals, such as: Ca/Fe(10%), Sc/Fe(4%), Y/Fe(4% e 6%), where the Fe have a low solubility. This systems were prepared by vapor quenching of pure metals on cooled substract. The purpose of this work was to study the features of different local Fe sites, in order to determine the competition between the occupation of the interstitial (S) and substitutional (I) Fe sites. For the sample characterization we used *in situ* Mössbauer measurements. This results will be compared with similar studies from In-beam Mössbauer spectroscopy (IBMS) reported by R. Sielemann et al¹ and D. Riegel², where the IBMS was used to study single isolated ^{57}Fe impurities after implantation in selected or even vanishing solubility for Fe prevails. ¹ R. Sielemann. Invited paper presented at the IXth International Conference on Hyperfine Interactions. August 17-21, 1992, Osaka, Japan. ² D.Riegel. Submitted to Phys. rev. Letters 1992.

COMPARATIVE STUDY OF H^+ EMISSION INDUCED BY ATOMIC C AND C_{60} MeV BEAMS

J. A. M. PEREIRA, E. F. DA SILVEIRA, J. M. F.

JERONYMO

PUC-Rio

S. DELLA-NEGRA, Y. LEBEYEC, A. BRUNELLE

IPN-Orsay

K. KOIDE

IFUSP

The Van de Graaff accelerator at PUC-Rio was used to perform a series of experiments on H^+ desorption induced by MeV carbon beams impinging carbon foils of different thickness (from 200 Å to 5000 Å). The analysis chamber was equipped with a time-of-flight mass spectrometer that could be rotated around itself. This allows the study of Secondary Ion emission from the same surface by reflection (R) or transmission (T). We measured the H^+ yield (number of detected H^+ per projectile) in the two modes varying the charge state of the C beam (+1, ..., +5) and for different energies from

300 keV to 1.00 MeV. Those measurements permit to know the variation of the H^+ yield as a function of the projectile charge: $Y(q) = Y(0) + \alpha q^n$ where q is the incident charge state and n is close to 2. The determination of the equilibrium charge state at the exit of the carbon foil could also be determined. Moreover, we calculated the ratio between the yield of H^+ coming from the beam exit surface ($YH^+(T)$) to the yield of H^+ coming from the beam entrance surface ($YH^+(R)$) as a function of the thickness (d) of the sample. Similar experiments have been performed at IPN-Orsay using carbon clusters projectiles delivered by the 15 MV TANDEM accelerator. In the reflection mode, the H^+ yield increases with the square of the number of projectile constituents. For C_{10} and C_{60} clusters projectiles at an energy of 300 keV/carbon, the plots of $YH^+(T)/YH^+(R)$ versus d decrease with the thickness down to a minimum around 100 nm and then increase to present a local maximum at 400 nm. The current experiments at PUC-Rio can give results to determine the mean charge state of the cluster in the first layers of the solid and confirm if the effect observed at Orsay is due to equilibrium charge state process or due to a coherent pressure pulse induced by the structure of the projectile.

Observação por STM de Crescimento Epitaxial de Cu/Si(111)

RENATA A. SIMÃO, CARLOS A. ACHETE

*Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais
PEMM - COPPE / UFRJ*

HORST NIEHUS

Humboldt Universität - Berlin

Filmes de cobre de até 2ML sobre Si(111) 7x7 foram produzidos 'in situ' em uma câmara de ultra-alto vácuo a pressões inferiores de 4×10^{-10} Torr e analisados por STM e Espectroscopia Auger. Para coberturas menores que 0,5ML observa-se que os átomos de cobre ocupam posições entre os átomos de silício sem provocar a destruição da superestrutura 7x7 do Si(111). Aumentando-se a cobertura os núcleos de crescimento coalescem formando uma estrutura epitaxial de ordem de longo alcance. Para deposições a temperatura ambiente o crescimento se dá camada por camada. Foi observada também a evolução térmica de filmes de diversas espessuras mostrando que o tratamento térmico a temperaturas inferiores a 600°C leva a modificação da estrutura inicial de superfície 7x7 do Si(111) que passa a apresentar uma periodicidade não bem definida.

CHARACTERIZATION OF MICROPLASMAS GENERATED BY NITROGEN LASERS ON SOLID SURFACES

LUIZA SELIGMAN

Ciência e Engenharia dos Materiais, Universidade Federal de Santa Catarina

JORGE AMORETTI LISBÂ

Engenharia Elétrica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul

In this work we studied microplasmas generated by focusing the beam of a nitrogen laser on a brass sample in air. We evaluated the quantity of material evaporated observing through a microscope the dimensions of the cavity produced on the sample surface by the laser pulse. The velocity of expansion of the microplasma was obtained from measurements of the time evolution of the light emitted as a function of the distance above the target. Time integrated optical emission spectra show discrete spectral lines of the elements of the sample overlaid on a broad band radiation.

Spectra measured with time resolution show that the broad band radiation occurs at the beginning of the microplasma and has a duration of few tens of nanoseconds, while the spectral lines were observed after this initial time. These spectra also show broadening, asymmetry and shifting of the spectral lines. A discussion of the processes leading to the broadening of spectral lines was presented using the Stark effect to explain the main mechanism of these features. The time evolution of the temperature and the electron density " n_e " of the microplasma were calculated applying the method of Boltzmann plots and the theory of the Stark effect, respectively. We located these results in an " n_e " against " T " diagram, which permitted us to compare the microplasmas studied in this work with plasmas generated by others means. (j)

MEDIDA DO COEFICIENTE DE DIFUSÃO DO Li^+ NO FILME FINO DE CeO_2-TiO_2

MARCELO ANDRADE MACÊDO

Departamento de Física, UFS

MICHEL ANDRÉ AEGERTER

Instituto de Física de São Carlos, USP

LUÍS OTÁVIO BULHÕES

Departamento de Química, UFSCar

Através do processo sol-gel obteve-se o filme fino de CeO_2-TiO_2 . O coeficiente de difusão (\tilde{D}) dos íons Li^+ foi determinado através da técnica de titulação galvanostática intermitente. Pôde-se observar que \tilde{D} cai rapidamente para pequenas variações na estequiometria ($\Delta\delta$) e permanece constante para $\Delta\delta > 0,005$ com valor em torno de 4×10^{-12} cm²/s. Estes resultados indicam que o filme de CeO_2-TiO_2 tem uma cinética rápida para os íons Li^+ , podendo ser usado como contra-eletrodo em sistemas iônicos que necessitem de chaveamento rápido, tais como espelhos eletrocromicos e óculos eletrocromicos.

A INFLUÊNCIA DA COMPOSIÇÃO DOS GASES E DA TEMPERATURA NA ESTRUTURA DOS FILMES DE TiN PRODUZIDOS POR PVD.

LILIAN F. DE SENNA, CARLOS A. ACHETE
COPPE/UFRJ

A estrutura dos filmes de nitreto de titânio, TiN, influencia bastante em suas propriedades tribológicas. Desse modo, é muito interessante fazer com que uma estrutura desejada possa ser obtida através do controle de alguns dos parâmetros do processo de deposição. Neste trabalho, filmes de TiN foram depositados sobre vidro e Si (100) por d.c. Magnetron Sputtering, sem polarização do substrato. Escolheu-se como parâmetros controladores a serem estudados a composição dos gases no plasma, Ar e N₂, e a temperatura do substrato. Análises de Rutherford Backscattering Spectroscopy (RBS), Difração de raios X e Microscopia Eletrônica de Varredura mostraram que para a mesma potência aplicada, são verificadas variações diretas na espessura, na composição e na estrutura do filme depositado, levando, conseqüentemente, à influências importantes em suas propriedades.

AValiação DA ESPESSURA DE FILMES ESPESSOS DE HIDROXIEPATITA USANDO INTERFEROMETRIA DE ONDAS TÉRMICAS

ANTONIO CARLOS BENTO, MAURO LUCIANO
BAESSO

Universidade Estadual de Maringá, Departamento de Física

DARRYL P. ALMOND

University of Bath, U.K., School of Material Science

A técnica de Interferometria de Ondas Térmicas é uma técnica de análise não destrutiva que vem sendo muito utilizada na caracterização de filmes espessos depositados por jato de plasma frio. Neste trabalho, apresentamos uma metodologia que permite a caracterização da espessura de Hidroxiepatita depositada em diversas peças de reposição femural modeladas em Titânio. O método foi testado para uma variedade de próteses revestidas pelo processo de jato de plasma, e representam as variedades disponíveis no comércio. Para avaliar a validade deste método, as amostras foram sec-

cionadas em determinadas posições ao longo do revestimento, para a análise em microscópio óptico. Os resultados obtidos com a Interferometria de Ondas Térmicas mostraram uma ótima correlação com aqueles obtidos pela técnica destrutiva convencional (microscopia óptica). Além disso, os resultados mostram evidências de que esta técnica é capaz de resolver com precisão variações de espessuras em amostras que apresentam uma complexa geometria, como é o caso das próteses de reposição geralmente utilizadas em cirurgias de reposição óssea.

CARACTERIZAÇÃO DE PROPRIEDADES TÉRMICAS DE REVESTIMENTOS CERÂMICOS ATRAVÉS DA INTERFEROMETRIA DE ONDAS TÉRMICAS

ANTONIO CARLOS BENTO, MAURO LUCIANO
BAESSO

Universidade Estadual de Maringá, Departamento de Física

DARRYL P. ALMOND

University of Bath, U.K., School of Material Science

Neste trabalho apresentamos a possibilidade de utilização da Interferometria de Ondas Térmicas para a determinação das propriedades ópticas e térmicas de revestimentos cerâmicos, depositados por jato de plasma frio. No processo de jato de plasma frio, o material é fundido pela chama que o injeta sobre o substrato frio, aos poucos uma camada vai sendo formada pela condensação dessas partículas. Este processo em geral produz um revestimento característico e de espessura irregular. Os resultados apresentados foram obtidos para uma variedade de revestimentos cerâmicos sobre distintos substratos metálicos. Além da possibilidade da medida da difusividade, condutividade e efusividade térmica, também apresentamos uma análise criteriosa da precisão da Interferometria de Ondas Térmicas quando aplicada a esse tipo de revestimento. Ainda, é apresentada uma discussão detalhada da limitação da técnica em função do coeficiente de reflexão da onda térmica na interface revestimento/substrato, quando a obtenção de propriedades térmicas é desejada.

CONFERÊNCIAS

Palestra Vespertina - C - 07/06/95

THE FUTURE OF FIBRE CIRCUITRY

DAVID N. PAYNE

Optoelectronics Research Centre, The University of Southampton

Although functional, interconnected, multi-path fibre devices (fibre circuits) have been around for some time, the development of the EDFA has given enormous impetus to the area, since the inclusion of an active element allows far greater versatility. Already a number of quite complex circuits have been reported for non-linear switching, soliton-generation, logic, multiplexing and demultiplexing and a wide variety of fibre-lasers. To date, with the exception of the EDFA itself, the impact on current telecommunications networks has not been great, owing largely to the advanced nature of the devices, such as their very high bit-rate capability. It is therefore interesting to speculate on the future of fibre circuitry in the high-capacity telecommunications environment of the future.

The EDFA has removed the restriction on transmission distance and experiments reporting soliton transmission over 10,000km at multigigabit rates are common. In the trunk network, transmission rates in excess of 60Gbit/s over a few hundred km would appear possible and the challenge therefore is to generate, modulate, multiplex and demultiplex data streams at this speed. Whereas time multiplexing can be performed in parallel and individual pulses interleaved using simple time-delay paths, demultiplexing, i.e. switching out every *n*th pulse, is more complex. Demultiplexing has been demonstrated in fibre using soliton dragging, non-linear loop-mirror switches and four-wave mixing at data rates approaching 40Gbit/s.

Although a number of logic elements have been demonstrated using various fibre non-linear effects, the "pipeline" delay caused by the long fibre length is a problem which has yet to be addressed.

Switching speeds in the tens of femtoseconds are possible and it is this very high speed which makes fibre circuitry attractive for signal-processing. However, an alternative route to high-transmission capacity and switching is through dense wavelength-division-multiplexing (WDM). Here fibre circuitry has yet to make an impact, although there are a number of fibre components (e.g. the fibre Fabry-Perot) which are essential constituents of any system. A number of groups are investigating the erbium-doped laser/EDFA combination for stable, single-frequency WDM sources, as well as WDM comb-generators.

In conclusion, fibre circuitry based around the erbium-doped fibre would appear set to play a major part in the development of the high-capacity telecommunications systems of the future. Widely-tunable, single-frequency fibre lasers, femtosecond signal-processing/logic elements, multiplexers and demultiplexers will all play a part. A number of these functions can also be achieved through the use of planar optical circuits or external-cavity laser diodes and it remains to be seen which of the technologies is most suited to a given application.

Palestra Vespertina - A - 07/06/95

SCANNING PROBE MICROSCOPY OF ORGANIC MATERIALS

J. E. FROMMER

IBM Almaden Research Center, Harry Road, San Jose, CA 95120

The range of organic materials and properties successfully imaged by scanning probe microscopes has been very wide. The scanning probe microscope produces data based on detection of forces between the instrument and the sample. These forces are affected by the nature of the bonding within the materials under scrutiny. As a class of materials, organics can enter into multiple bonding modes: covalent, van der Waals, ionic, electrostatic, and hydrogen bonds, in many combinations. Therefore, an awareness of these multiple modes and their manifestation in material behavior is necessary in interpreting images and in setting scanning parameters.

This overview will cover a broad range of organic materials, from *molecular crystals* to weakly anchored liquids. Intermolecular interactions will be discussed, as well as how the scanning instruments probe these forces. Or-

ganic samples will be discussed in various contexts in which they are found, e.g., friction, adhesion, assemblies, manipulation.

Palestra Vespertina - B - 07/06/95

Epitaxy as a Chemical Reaction: Metal-on-Metal Growth Studied with the Scanning Tunneling Microscope

DAVID D. CHAMBLISS

IBM Research Division, Almaden Research Center, 650 Harry Road, San Jose CA 95120-6099, USA

The scanning tunneling microscope (STM) has revealed an unexpected variety in the structures formed when metal films are grown on metal crystals. This variety challenges the appealing picture of epitaxy as the orderly arrangement of deposited atoms on an almost inert substrate. Instead, one must regard epitaxy as a potentially complex chemical reaction between substrate and deposit. Important phenomena include the removal of atoms from the surface, the exchange of substrate and deposit atoms, the formation of long-range ordering by strain in the substrate, and the structural transformation of subsurface layers in the substrate and the film.

These phenomena will be discussed in the context of several of these experimental examples:

- Ni and Fe on Au(111). These metals are seen to form a lattice of islands, with ordering attributable to the reconstruction of the Au(111) surface.
- Fe and Au on Cu(100). These systems demonstrate the importance of atomic place exchange between substrate and deposit. For Au on Cu(100), an ordered surface alloy is formed, whereas for Fe on Cu(100), segregated clusters of Fe are formed.
- Martensitic structural change of Fe on Cu(100). The STM can observe the results of a bulklike structural change below the surface of the film.
- Ordered segregation of Ag and Co on Mo(110). Codeposited immiscible materials are seen to form an ordered structure due to strain relaxation.

This work was done in collaboration with R.J. Wilson, S. Chiang, K.E. Johnson, and K. Kalki, and it was supported in part by the Office of Naval Research (N00014-89-C-0099).

Palestra Vespertina - D - 07/06/95

Electron Spin Relaxation Times: Effects of Temperature, Orientation, and Motion

GARETH R. EATON, SANDRA S. EATON, JING-LONG DU, BARNARD GHIM

Department of Chemistry, University of Denver, Denver, Colorado 80208 USA

Pulsed electron paramagnetic resonance (EPR) spectroscopy permits direct measurement of electron spin relaxation times. These relaxation times provide insight into a wide range of physical phenomena. The phase memory time, T_m , measured by electron spin echo spectroscopy includes the effects of all dynamic processes that lead to dephasing of the spin echo or removal of excited spins from the set that is observed. In nitroxyl radicals, chromium(V) complexes and copper complexes including copper(II) bis(diethyl- dithiocarbamate), electron spin echoes have been used to monitor the rate of rotation of methyl groups in frozen solution and doped solids. Small amplitude molecular motions result in a characteristic orientation dependence of T_m that has been observed for metal complexes including vanadyl porphyrin, chromium(V) porphyrin, and copper(II) bis(diethyl- dithiocarbamate) in frozen solution and/or doped solids. Saturation recovery EPR can be used to measure the spin-lattice relaxation time, T_1 . T_1 has been found to depend upon the orientation of the paramagnetic center with respect to the external magnetic field for the E' defect in irradiated silicon dioxide and for nitroxyl radicals, copper(II) porphyrins, copper(II) bis(diethyldithiocarbamate), chromium(V) porphyrins, and molybdenum(V) porphyrins in frozen solutions, doped solids or single crystals. The orientation dependence is attributed to local vibrational modes of the molecule.

Palestra Vespertina - E - 07/06/95

Numerical Simulations of a Gauge Glass

J. M. KOSTERLITZ, A. VALLAT, B. GROSSMANN

Brown University, USA

We discuss the effects of disorder in superconducting films and arrays of Josephson Junctions and show that a simple gauge glass model is a reasonable description of these systems under certain circumstances. The results from numerical simulations in two and three dimensions are discussed and strong evidence for an "ordered" state in three dimensions is presented.

Palestra Vespertina - C - 08/06/95

SYNCHROTRON RADIATION OPPORTUNITIES IN CONDENSED MATTER PHYSICS

MICHAEL HART

Schuster Laboratory, Department of Physics, The University, Manchester M13 9PL, UK

For a century x-rays have been generated by electron bombardment of solid targets - the ubiquitous "x-ray tube". Even now, there is no sign of any replacement for such sources and no substantial prospect of improving their performance but every sign that will enjoy a long and assured future in a very wide range of analytical methods. Just 15 years ago at Daresbury the worlds first purpose built electron storage ring designed specifically to produce x-rays came into production and was quickly followed by others in the USA and Japan while several of the older rings, built originally for high energy physics research were dedicated more and more to research using the synchrotron radiation rather than the particle beams which they stored. None of these second generation storage rings was optimized for x-ray production and plans for a third generation [which were] quickly developed. The 6 GeV European Synchrotron Radiation Facility [ESRF] in Grenoble opened for users in 1994, the 7 GeV Advanced Photon Source [APS] starts commissioning this year at Argonne and the Japanese 8 GeV Spring 8 is already past the civil engineering stage of construction. These sources all produce copious numbers of x-ray photons with power in the kW range, very high brightness, quasi-monochromatic beams at up to kW/mm² power density, linear or circular polarization in the pS time scale. X-ray optics with corresponding high finesse has all been developed in the last few years. Only during the last few years has it become clear that these source characteristics can be controlled on demand. The impact on experimentation in Condensed Matter Physics is exciting for we can choose, for example, very high energy resolution for Mössbauer experiments, circular polarization for magnetic studies, pico-second pulses for transient measurements and sub-micron spots for scanning spectroscopies and imaging, all in the same facility. This is not the end of the story for ways and means to produce even more impressive beams are already under discussion.

Palestra Vespertina - A - 08/06/95

COMPUTER MODELLING OF DEFECTS IN SOLIDS

ROBERT A. JACKSON

Department of Chemistry Keele University, Staffs ST5 5BG, UK

Computer modelling techniques can provide much useful information about solids. This includes prediction of structures, calculation of lattice properties, and prediction of the effect on structures of the presence of defects. The lecture will start with a general introduction to computer modelling methods. This will include a summary of what information can be obtained, and what information must be provided. Included in this latter category are interatomic potentials, which are crucial to providing reliable results, and the methods by which these may be obtained will be discussed. Following the general introduction, the lecture will focus on the calculation of defect properties. Two approaches will be described, one of which is appropriate for point defects, and one which deals with situations where there are high concentrations of defects. The first approach treats defects as being in the centre of otherwise perfect crystal, while the second approach introduces defects explicitly into a large unit cell (a supercell). Some recent examples of the application of both approaches will be given, including studies of uranium oxide phases, and the defect properties of BaLiF₃.

Palestra Vespertina - B - 08/06/95

Towards molecular level design and control of Smart Materials Systems Future Science & Technology Challenges

D. T. CLARK

DRAL RUSTI, CCLRC, Daresbury Laboratories, Warrington, UK

A long term goal in Materials Science and Technology is that of environmentally adaptive self repairing SMART Materials systems for which Nature provides many valuable learning points. Whilst the emphasis at present is largely around synthesis in unshapes, design and assembly as sequential operations, (leading to a dominant emphasis on ultimate properties but "dumb" materials systems with the consequent need to "overengineer"), the longer term future is much more about spatially resolved synthesis and assembly as parallel activities. This will provide options to design at the molecular level, systems which are optimum for function and able to respond to their environment, including self repair in a genuine mimic of nature's composite systems.

It is becoming clear that polymer science and technology will play a pivotal role in the emerging 'Chemistry direct to shapes' era where molecular level design, synthesis and assembly of the spatially resolved 'active' materials systems of the future will bypass many of the issues of incommensurate engineering associated with bolt-on actuators, sensors, etc currently envisaged. The issues of massively parallel information processing to provide a data to knowledge to action transduction in a Smart system will also hinge on developments in Polymer science and molecular control of interface structures.

The "stepping stone" science and technology issues towards an era of molecular level design of genuine mimics of Nature's materials systems are already becoming apparent and the lecture will aim to highlight the current as well as future challenges in this field which will be all pervasive in the coming decades, from a condensed matter physics perspectives.

Palestra Vespertina - D - 08/06/95

Magnetic Microscopy Using Superconducting Sensors

FRED WELLSTOOD

Center for Superconductivity Research, Department of Physics, University of Maryland, College Park, Maryland, USA

My research group at the University of Maryland has developed a novel family of scanning probe microscopes which use low-noise Superconducting Quantum Interference Devices (SQUIDS) to image fine spatial variations in very weak magnetic fields. The spatial resolution of this kind of microscope is limited by the size of the SQUID and its distance from the sample. To achieve the best resolution, we typically place both the sample and SQUID in a cryogenic dewar and use SQUIDS which are as small as 10^{-11} m. With such an arrangement, we can resolve changes in field which are as small as 10-11 Tesla with a spatial resolution which is only about an order of magnitude worse than that of an optical microscope. To construct a magnetic picture, we record the SQUID output as a function of position over the sample and use this data to produce a false color image. While most of our SQUID microscopes have required the sample to be at cryogenic temperatures, we have recently developed a system for obtaining high resolution magnetic images of samples which are in air at room temperature. Using our microscopes, we have examined a variety of samples, including small currents flowing in fine wires, magnetic ink, diamagnetic screening from superconducting thin films, magnetic vortices in superconductors, paramagnetic material, thin magnetic films, and superconducting devices. By applying time varying fields, and monitoring the induced eddy currents, we have also been able to image normal metal structures such as patterns on printed circuit boards, defects in small metal assemblies, and metal thin films. The microscope can also be operated as a tunable high frequency probe, with the operating frequency set by the Josephson relation. Operating in this mode, we have obtained images at probing frequencies as high as about 200 GHz, without the need for external microwave sources or detectors. I will describe the basic operation of the microscope, show a selection of magnetic, radio frequency and microwave images, and discuss potential applications such as searching for very small regions of new superconductors.

Palestra Vespertina - E - 08/06/95

ULTRASHORT-PULSE FIBER LASERS

ERICH P. IPPEN

Department of Electrical Engineering and Computer Science, and Research Laboratory of Electronics, Massachusetts Institute of Technology

Erbium-doped fibers have made it possible to construct compact, all-solid-state, ultrashort-pulse optical sources in the 1.55 μm wavelength range. Their broad gain bandwidth can accommodate the formation of femtosecond pulses, and their energy saturation characteristics allow for relatively high pulse energies. At the same time, soliton propagation effects conspire to keep pulse durations from reaching their potentially ultrashort limits, and the fiber lengths required for threshold make it difficult to achieve high pulse repetition rates. In this talk we describe several novel design approaches and experimental techniques being used to overcome these difficulties. In different systems, we have achieved pulses as short as 63 fs, pulses with energies greater than 1nJ, and stabilized pulse trains with multigigahertz repetition rates. Potential applications include femtosecond diagnostics, ultrahigh bit rate optical networks, and time-domain optical memories.

Palestra Vespertina - D - 09/06/95

LIQUID CRYSTALS, FRUSTRATION AND STRUCTURES OF BROKEN CHIRAL SYMMETRY

LECH LONGA

CIFMC-UnB

Though Blue Phases of chiral liquid crystals were already detected more than 105 years ago, only recently they have begun to be fully understood. In the absence of an external field three thermodynamically distinct Blue Phases have been identified and labelled, in order of increasing temperature, BPI, BPII and BPIII [1]. Among them it seems most probable that BPI and BPII have periodicities of body-centered cubic structure with the space group symmetry $O^8(I4_132)$ and of simple cubic structure with the space group symmetry $O^2(P4_232)$, respectively.

The structure of BPIII, which is formed directly on cooling the ordinary isotropic liquid (ISO), is still a matter of intensive experimental and theoretical studies. First of all, the Bragg scattering of light observed in BPI and BPII, is replaced in BPIII by a weak selective reflection band typical of an amorphous system [1]. Secondly, phase transitions from BPIII into ISO at moderate chiralities or into lower temperature BPI or BPII phases are all first order [2]. Finally, recent experiments for highly chiral liquid crystalline compounds indicate on a possibility of continuous evolution of BPIII into ISO [3]. Though a critical point between BPIII and ISO still has not been detected these observations put severe restrictions on a hypothetical structure of BPIII. Two scenarios seem most probable: (a) BPIII and ISO phases are of the same macroscopic symmetry and approach a common critical point at high chiralities. As both liquids appear only in chiral systems the corresponding order parameter should be a pseudoscalar quantity; (b) BPIII and ISO phases are of different macroscopic symmetry with a high-chirality multicritical point.

From theoretical point of view several suggestions for a possible structure of BPIII have been proposed in the literature [1,4-6]. In this talk we shall review three models. The first one is the *Icosahedral model* [4] in which it is assumed that BPIII possesses a quasiperiodic symmetry of an icosahedral quasicrystal. Unfortunately detailed calculations of the phase diagrams within the frame of the extended de Gennes - Wilson - Ginzburg - Landau free energy show that none of possible quasiperiodic icosahedral structures is absolutely stable in the (temperature, chirality) plane [4c,d].

The second model is the *model of cubic bond-orientational order (CBOO)* [5]. We demonstrate that all Blue Phases could, in principle, be described in a consistent way with the help of two order parameters: the standard alignment tensor field $Q_{\alpha\beta}(\mathbf{r})$ and a nonlinear dielectric susceptibility $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta}$ of octahedral point group symmetry $O(432)$. The calculations incorporating both tensor fields show that the BPIII could be understood as appearing in the process of melting where cubic space group symmetries of ordinary cubic Blue Phase superlattices reduce to their octahedral factor group. Within this model one can stabilize BOO phase just below the isotropic liquid and account for a tricritical point at high chiralities.

In the third model it is assumed that macroscopic symmetries of BPIII and of ISO are the same [6]. Both phases are described with the help of the simplest "microscopic" pseudoscalar order parameter field Δ , buildt out of the components $Q_{\alpha\beta}(r)$ of the alignment tensor $Q(r)$: $\Delta = V^{-1} \int \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} Q_{\alpha\beta}(r) \partial_\gamma Q_{\gamma\rho}$. The corresponding macroscopic observable $\langle \Delta \rangle$ (rotatory power) is correlated in a selfconsistent way with the ultraviolet cutoff of deGennes-Landau- Ginzburg- Wilson statistical field theory (here $\langle \dots \rangle$ denotes thermodynamic average over the fields $Q_{\alpha\beta}$). It is shown that two different phases characterized by two different values of $\langle \Delta \rangle$ could be predicted in the temperature range where the Gaussian theory with $Q \equiv 0$ is stable.

[1]For recent reviews see: (a)D. C. Wright and N. D. Mermin, Rev. Mod. Phys. **61**, 385 (1989); (b)P. P. Crooker, Liq. Cryst., **5**, 751 (1989); (c)R. M. Hornreich and S. Shtrikman, Mol. Cryst. Liq. Cryst. **165**, 183 (1988); (d)V. A. Belyakov and V. E. Dmitrienko, Usp. Fiz. Nauk **146**, 369 (1985) [Sov. Phys. Usp. **28**, 535 (1985)].

[2]J. Thoen, Phys. Rev. A **37**, 1754, (1988).

[3](a) G. Voets, Ph. D. thesis, Univ. of Leuven, Belgium (1992); (b) G.Voets and W. Van Dael, Liq. Cryst. **14**, 617 (1993); (c) J.B.Becker and P.J.Collings, Mol. Cryst. Liq. Cryst., in press. (d) Z.Kutnjak, C.W.Garland, J.L. Passmore and P.J.Collings, Presented at the European Conference on Liquid Crystals, Bovec, 1995.

[4](a)R. M. Hornreich and S.Shtrikman, Phys. Rev. Lett. **56**, 1723 (1986); (b) H. Kleinert and K. Maki, Fortschr. Phys. **29**, 219 (1981); (c) L. Longa, W. Fink and H. -R. Trebin, Phys. Rev. E **48**, (1993), 2296; (d) L. Longa, W. Fink and H. -R. Trebin, Phys. Rev. E **50**, (1994), 3841;

[5](a) L. Longa and H.- R. Trebin, Phys. Rev. Lett. **71**, (1993), 2757; (b) J. Englert, L. Longa and H. -R. Trebin, in preparation; (c) L.Longa, M.Żelazna, H. -R. Trebin and J. Moscicki, in preparation.

[6]L. Longa and H. -R. Trebin, Phys. Rev. Lett. submitted.

Acknowledgments

This research was financially supported by the CNPq Agency in Brasil and by the European

Palestra Vespertina - A - 09/06/95

METROLOGIA NA INTERFACE ENTRE CIÊNCIA PURA E APLICADA

GIORGIO MOSCATI

Instituto de Física da Universidade de São Paulo, Membro do Comité Internacional de Pesos e Medidas

A Metrologia trata da Ciência, Técnica e Arte das medições e de suas relações com as atividades Científicas, Produtivas Comerciais e Ambientais de nossa sociedade e com a qualidade de vida e defesa do cidadão e do consumidor. Com êste amplo espectro, a Metrologia está presente em todas as atividades profissionais ou não de todos nós. Também envolve praticamente todas as disciplinas e áreas do conhecimento, varrendo o espectro de problemas desde os que envolvem os aspectos mais profundos e fundamentais da Física, até o dia a dia do cidadão e do comprador comum, passando pelo empresário, pelo legislador, pelo político e pelo diplomata. Surpreendentemente a área é pouco conhecida, mesmo nos meios profissionais e às vezes é considerada como uma atividade com regras estabelecidas a muito tempo, sem mudanças ou modernidade. O próprio nome do "Bureau International des Poids et Mesures" (BIPM) estabelecido por convenção internacional em 1875 e que ainda é hoje a referência internacional da Metrologia, trai a falta de visão de seus fundadores que aparentemente imaginavam que uma vez produzidos os padrões de massa e comprimento o único papel da instituição seria garantir a segurança e inviolabilidade dos padrões de comprimento e massa e permitir a comparação dos padrões das várias nações com os internacionais. A situação hoje é totalmente diferente. A Metrologia está em intensa atividade, mudança e evolução e grandes laboratórios em diversos países, principalmente os mais avançados tecnologicamente, e o próprio BIPM desenvolvem grande atividade no campo procurando cobrir todas as grandezas físicas e começando a cobrir as químicas. Os principais problemas da área estão em estabelecer as unidades de base não mais em protótipos arbitrários, ligados a propriedades de corpos materiais ou geomórficos, mas baseando-as em propriedades mais fundamentais da Física, suas Constantes Fundamentais. Este processo está em andamento e a nova definição do metro é um reflexo deste esforço. Num futuro a médio e longo prazo a definição do quilograma, do segundo, e do ampère entre outras, deverão sofrer modificações por apresentarem problemas que comprometem sua utilização nas aplicações com maiores demandas e exigência.

Outros problemas envolvem a disseminação dos padrões de grandezas de base e derivadas bem como a cobertura de escalas cada vez mais amplas nos valores das grandezas a serem mensuradas e de estender a possibilidade de mensurações metrologicamente rastreadas a um número cada vez maior de grandezas. A nível nacional verifica-se uma falta de conscientização da comunidade científica envolvida em pesquisas que envolvem a medida de grandezas, com relação à rastreabilidade metrológica. No sistema produtivo, a garantia da qualidade dos produtos encontra sérias dificuldades na falta de um sistema metrológico de apoio devidamente estabelecido, o que compromete as exportações e torna o país vulnerável à importação de produtos sem qualidade comprovada, vitimizando o consumidor. Um amplo esforço nacional está sendo desenvolvido para melhorar a situação e ampliar a competência, qualificação, confiabilidade e capacidade de atendimento do sistema estabelecido que constitui o SINMETRO que inclui o INMETRO como seu órgão executivo e de coordenação. A comunidade científica e principalmente os Físicos poderão dar uma importante contribuição a esse esforço, podendo por seu turno se beneficiar com a existência de uma base metrologia ampla e confiável. Os Físicos podem contribuir na pesquisa metrológica, no desenvolvimento de instrumentos e procedimentos, na formação de Recursos Humanos e principalmente na difusão de uma cultura metrológica com amplos benefícios para a sociedade. Esta contribuição pode ser realizada dentro do próprio campo de atividade de cada um, bastando uma maior conscientização e uma receptividade para os problemas, métodos e conhecimentos da Metrologia. Na palestra a ser apresentada procuraremos dar uma visão da área, de seus sucessos e problemas, da situação no país, de como os Físicos podem contribuir para a área e de como sua contribuição é essencial para o desenvolvimento do país. Será também abordada a situação Internacional com seus sucessos e problemas. Serão também abordados os problemas científicos envolvidos no estabelecimento das unidades de base e de seus padrões.

Palestra Vespertina - B - 09/06/95

Electron Paramagnetic Resonance Studies of C₆₀ Anions Generated Electrochemically

SANDRA S. EATON, GARETH R. EATON, PAUL C. TRULOVE⁺, RICHARD T. CARLIN⁺

⁺Frank J. Seiler Research Laboratory, US Air Force, Academy, Colorado 80840, USA and Department of Chemistry, University of Denver

The 1, -2, and -3 anions of C₆₀ were generated electrochemically in dimethylsulfoxide solution (DMSO) or 4:1 toluene:acetonitrile and monitored by square wave voltammetry and visible/near-IR spectra. The continuous wave (CW) electron paramagnetic resonance (EPR) signals for the -1 and -3 anions exhibit line widths that are strongly temperature dependent. Below about 60 K the temperature dependence of the line widths is attributed to dynamic averaging of anisotropy. Measurements of the electron spin relaxation rates by electron spin echo and saturation recovery techniques at low temperature indicate that the line widths above about 60 K are relaxation time determined. The CW EPR spectra of the -2 anion show a sharp signal superimposed on a second signal with a splitting of about 11 G, which is similar to what has been reported previously. The double-integrated signal intensity at 100 K for the sharp is only a few percent of the total C₆₀ in the sample, which is not consistent with assignment of this signal to the ground state of C₆₀²⁻. At lower temperatures T₁ for the sharp signal is very long: for example, 0.63 s at 4.5 K and 14 ms at 50 K, which is too long to obtain accurate CW line shapes and intensities. The microwave power required for a 90° pulse was characteristic of an S=1/2 spin system. The intensities of the 2-pulse echo and of the FID from the sharp signal as a function of temperature between 4.5 and 50 K followed the Boltzmann behavior of an isolated S=1/2 species. The EPR evidence is not consistent with assignment of the sharp signal to either the ground state or to a thermally excited state of C₆₀²⁻. Above 135 K in DMSO solutions of the -2 anion a signal with a 30 G peak-to-peak Lorentzian line width grows in with increasing temperature and at 255 K corresponds to 6*1% of the calculated C₆₀²⁻ concentration determined by near-IR spectra. This signal is assigned to a thermally-populated excited triplet state of C₆₀²⁻ with a singlet-triplet splitting of 450 * 50 cm⁻¹.

Palestra Vespertina - C - 09/06/95

SOFT X-RAY SPECTROSCOPY OF CLUSTERS

SANDEEP KAKAR

HASYLAB am DESY - Hamburg FRG

Cluster physics derives its interest from the fact that clusters are intermediate in size between isolated atoms and the solid state. The number of atoms in a cluster can be continuously varied from $N=1$ to very large N , permitting a detailed examination of the evolution of properties with physical size.

HASYLAB has a tradition of cluster spectroscopic studies in the VUV range, which is now being expanded to harder photons in the spectral range 60 eV - 2000 eV and higher.

The undulator beamlines at HASYLAB (which serve as photon sources) and a new experimental station for spectroscopy of mass analyzed clusters will be described. To this station have been coupled conventional cluster sources already existant at HASYLAB as well as a recently built reactor for preparation of Carbon and Silicon clusters.

As an illustration of the research that can be done at the facility we will report on investigations done at the Ar K-edge in Argon clusters, at the O K-edge in water clusters and at the C K-edge in Carbon clusters.

Índice de Autores e Apresentações

Períodos

- 1 - Primeiro Período da Manhã 8:30 - 10:30 - 1. Manhã (120 minutos)
 2 - Segundo Período da Manhã 11:00 - 12:30 - 2. Manhã (90 minutos)
 3 - Tarde (Paineis) 14:00 - 16:00 - Tarde (Paineis)
 4 - Segundo Período da Tarde 16:15 - 18:30 - Tarde (Palestras)

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.		
Abbade, M. L. F.	8	3	301	Alayo, M. I.	8	3	176		
Abbate, M.	7	3	331	Albuquerque, A. R. P. L. de	2	01	159		
Abbate, M.	7	3	334	Albuquerque, D. F. de	9	3	124		
Abbate, M.	7	1	06	328	Albuquerque, J. E. de	7	1	11 (Palace)	257	
Abbate, M.	7	3	336	Albuquerque, J. E. de	7	3	262		
Abdala-Ribeiro, A.	7	3	290	Albuquerque, M. P. de	7	3	32		
Abramof, E.	7	3	290	Alcalde, A. M.	8	2	13	297	
Abramof, E.	8	2	13	297	Alcantara, M. R.	9	3	143	
Abramof, M. F. R. E. E.	8	3	58	Alcaraz, F. C.	7	3	88		
Abritta, T.	9	3	254	Alcaraz, F. C.	8	1	12	99	
Acchar, W.	8	1	07	172	Alfonso, N. F. C.	7	3	92	
Achete, C. A.	8	2	06	338	Algatti, M. A.	8	1	11 (Palace)	264	
Achete, C. A.	8	3	343	Aliaga-Guerra, D.	9	3	225		
Achete, C. A.	8	3	343	Aliaga-Guerra, D.	9	2	09	219	
Achete, C. A.	9	2	06	348	Aliaga-Guerra, D.	9	3	225	
Achete, C. A.	9	3	354	Aliaga-Guerra, D.	7	3	197		
Achete, C. A.	8	2	06	338	Allia, P.	9	2	09	218
Achete, C. A.	8	3	345	Almeida, A. de	7	3	35		
Achete, C. A.	9	3	355	Almeida, A. de	7	3	36		
Acquadro, J. C.	7	3	9	Almeida, A. P. de	8	3	341		
Acquadro, J. C.	7	3	12	Almeida, C. A. S.	7	3	10		
Adhikari, S. K.	7	3	96	Almeida, D. de P.	9	1	05	22	
Adorno, A. T.	7	3	166	Almeida, D. F. de	8	2	07	174	
Adorno, A. T.	7	3	167	Almeida, D. P.	8	2	05	13	
Aegerter, M.	7	1	07	276	Almeida, D. P.	8	3	15	
Aegerter, M. A.	9	3	253	Almeida, D. P.	8	3	15		
Aegerter, M. A.	8	1	02	239	Almeida, J. R. L. de	9	3	123	
Aegerter, M. A.	7	3	313	Almeida, J. R. L. de	9	3	124		
Aegerter, M. A.	9	3	354	Almeida, J. R. L. de	9	3	124		
Ågren, H.	7	1	05	6	Almeida, L. A. C. de	8	3	344	
Aguarter, M. A.	9	3	256	Almeida, L. A. C. de	8	3	343		
Aguiar, A. de	7	3	311	Almeida, L. A. C. de	9	3	49		
Aguiar, F. M. de	9	2	10 (Palace)	216	Almeida, L. A. C. de	9	3	143		
Aguiar, J. A.	7	1	04	307	Almeida, M. B.	9	2	08	62
Aguiar, J. A.	8	1	04	316	Almeida, M. P. de	9	3	133	
Aguiar, J. A.	7	1	04	306	Almeida, R. M. C. de	7	2	12	85
Aguiar, J. A.	7	1	04	307	Almeida, R. M. C. de	7	3	99	
Aguiar, J. A.	7	1	04	306	Almeida, W. M. M.	8	3	278	
Aguiar, M. C. de O.	7	1	02	232	Almond, D. P.	9	3	355	
Aiello, O. E.	8	3	111	Almond, D. P.	9	3	355		
Aksela, H.	9	2	05	23	Altoe, M. V. P.	9	3	220	
Aksela, S.	9	2	05	23	Altoe, M. V. P.	9	2	09	215
Alayo, M. I.	8	3	176	Altoe, M. V. P.	9	3	226		

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Alvarez, F.	8	3		342	Antonello, L. L.	7	3		167
Alves Junior, C.	8	1	06	337	Antunes, A. B.	9	3		225
Alves, A. R.	8	3		303	Aranha, N.	9	3		64
Alves, C. A.	7	2	08	54	Aranha, V. C. S. R. N.	9	3		251
Alves, C. F.	9	3		123	Araujo, A. D.	9	1	05	22
Alves, H. W. L.	7	3		335	Araujo, C. B. de	7	1	02	232
Alves, J. L. A.	7	3		333	Araujo, C. B. de	9	3		254
Alves, J. L. A.	7	1	05	5	Araujo, C. B. de	8	1	02	239
Alves, J. L. A.	7	3		335	Araujo, C. B. de	7	1	02	231
Alves, K. M. B.	9	3		224	Araujo, C. B. de	9	3		254
Alves, K. M. B.	9	3		224	Araujo, D. B. de	8	3		324
Alves, M. do C. M.	7	2	07	166	Araujo, E. B. de	8	2	07	173
Alves, M. do C. M.	8	1	14	71	Araujo, E. B. de	8	2	07	173
Alves, N.	7	3		261	Araujo, J. F.	7	2	08	54
Alves, O. L.	9	3		250	Araujo, J. H. de	7	3		169
Alves, O. L.	9	3		251	Araujo, J. M. de	9	3		123
Alves, O. L.	9	3		64	Araujo, J. M. de	8	3		116
Alves, S. G.	7	3		34	Araujo, M. A. B. de	9	3		224
Alves, V. M.	9	3		141	Araujo, M. A. B. de	8	2	07	173
Amaral Jr, M. R. do	9	3		77	Araujo, M. A. B. de	8	2	07	173
Amaral, A. C. C. do	9	3		143	Araujo, M. A. de	9	3		272
Amaral, C. L. C.	7	1	14	66	Araujo, M. B. de	7	3		168
Amaral, L.	8	1	07	172	Araujo, M. B. de	7	1	07	276
Amaral, L.	9	3		352	Araujo, M. T. de	9	2	02	250
Amaral, L.	9	3		353	Araujo, M. T. de	9	3		252
Amaral, L. Q. do	9	3		77	Araujo, M. T. de	9	3		252
Amorim, H. S. de	9	3		76	Ardila, D. R.	8	1	07	172
Amorim, H. S. de	9	3		77	Ardisson, J. D.	9	3		226
Amorim, J. de	9	3		255	Ardisson, J. D.	9	3		227
Amthauer, G.	9	1	10 (Palace)	214	Armelin, M. J. A.	9	1	01	158
Amthauer, G.	9	1	10 (Palace)	214	Arni, R. K.	8	3		74
Anazawa, R. M.	7	3		311	Arruda, A. S. de	9	3		127
Anazawa, R. M.	9	3		255	Arruda, G. J. de	7	3		166
Anda, E. V.	9	1	13	303	Assis, M. das D.	8	3		42
Anda, E. V.	9	1	13	304	Assis, M. das D.	8	1	03	38
Anda, E. V.	7	3		293	Assumpcao, R.	8	3		345
Anda, E. V.	9	3		230	Assuntaupio,	7	1	14	68
Andrade Jr, R. de	8	1	04	316	Aulet, A.	9	3		182
Andrade Jr, R. de	8	3		320	Ausmees, A.	9	2	05	23
Andrade, R.	8	3		212	Avanci, L. H.	8	3		59
Andrade, R. F. S.	9	1	12	116	Avila, M. A.	8	3		320
Andrade, R. F. S.	9	2	12	118	Avila, M. de A.	8	1	04	317
Andrade, R. F. S.	9	3		129	Avillez, R. R. de	8	3		176
Andrade, R. F. S.	8	3		112	Ayta, W. E. F.	9	3		179
Andreetta, J.	8	2	02	241	Azevedo, A.	8	1	09	201
Andreetta, J. P.	9	3		63	Azevedo, G. de M.	8	3		14
Andreetta, J. P.	8	3		245	Azevedo, I. de S.	7	3		168
Andreetta, J. P.	8	3		245	Badurek, G.	9	2	09	217
Andreetta, J. P.	8	1	08	55	Badurek, G.	9	3		221
Andreetta, M. R. B.	9	3		63	Baesso, M. L.	9	1	11 (Palace)	136
Anteneodo, C.	8	3		111	Baesso, M. L.	9	2	03	282
Anteneodo, C.	7	3		93	Baesso, M. L.	9	3		355
Anteneodo, C.	9	3		47	Baesso, M. L.	9	3		355
Anteneodo, C.	8	3		44	Baffa, O.	8	3		42
Antonelli, A.	8	3		208	Baffa, O.	7	3		34
Antonelli, A.	9	3		131	Baffa, O.	7	1	01	145

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Baffa, O.	7	3		35	Bambino, T. M.	9	3		254
Baffa, O.	7	2	01	146	Bandeira, I. N.	7	3		290
Baggio-Saitovich, E. M.	7	3		312	Bandeira, I. N.	8	2	13	297
Baggio-Saitovich, E.	9	3		224	Baranauskas, V.	7	3		331
Baggio-Saitovich, E.	7	3		195	Baran, Z.	7	1	14	67
Baggio-Saitovich, E.	7	3		196	Baran, Z.	9	3		80
Baggio-Saitovich, E.	9	3		284	Barbara, B.	7	1	09	184
Baggio-Saitovich, E.	9	3		353	Barberis, G. E.	8	3		277
Baggio-Saitovich, E.	7	1	14	68	Barberis, G. E.	8	3		278
Baggio-Saitovich, E. M.	7	1	04	308	Barbero, G.	8	2	10 (Palace)	135
Baggio-Saitovich, E. M.	7	3		193	Barbero, G.	8	1	10 (Palace)	134
Baggio-Saitovich, E. M.	7	3		312	Barbeta, V. B.	7	2	09	187
Baggio-Saitovich, E. M.	7	3		193	Barbieri, R. S.	7	3		153
Baggio-Saitovich, E. M.	7	3		194	Barbieri, R. S.	7	2	05	7
Baggio-Saitovich, E. M.	8	3		322	Barbieri, R. S.	8	3		19
Baggio-Saitovich, E. M.	7	3		197	Barbosa Filho, F. F.	7	3		87
Baggio-Saitovich, E. M.	9	3		227	Barbosa, A. C. de C.	8	3		204
Baggio-Saitovich, E. M.	7	3		197	Barbosa, A. C. de C.	7	3		188
Baggio, R.	8	3		73	Barbosa, A. F.	8	2	01	154
Baggio, R.	7	1	14	67	Barbosa, D. F. P.	9	2	12	118
Bagnato, V.	9	1	05	21	Barbosa, E.	8	2	02	241
Bagnato, V. S.	8	3		243	Barbosa, F. R.	8	2	01	154
Bagnato, V. S.	8	1	08	56	Barbosa, F. R.	8	3		246
Bagnato, V. S.	9	2	02	250	Barbosa, G. A.	9	3		251
Bagnato, V. S.	9	2	02	249	Barbosa, G. A.	8	1	02	238
Bagnato, V. S.	9	3		252	Barbosa, G. A.	9	1	02	247
Bagnato, V. S.	9	2	02	250	Barbosa, G. A.	7	3		237
Bagnato, V. S.	9	3		252	Barbosa, L. C.	9	3		250
Bagnato, V. S.	9	3		252	Barbosa, L. C.	9	3		251
Bagnato, V. S.	9	3		253	Barbosa, L. C.	7	3		234
Bagnato, V. S.	9	3		253	Barbosa, L. C.	7	3		234
Bagnato, V. S.	8	3		342	Barbosa, L. C.	9	3		251
Bagnato, V. S.	9	3		253	Barbosa, L. C.	7	1	02	232
Bagnato, V. S.	9	1	02	248	Barbosa, L. C.	8	1	13	296
Bagnato, V. S.	9	3		26	Barbosa, M. C.	7	3		85
Bagnato, V. S.	9	1	05	20	Barbosa, M. C.	9	3		120
Baibich, M. N.	7	3		195	Barbosa, M. C.	7	2	12	83
Baibich, M. N.	7	3		195	Barbosa, M. V.	7	1	04	306
Baibich, M. N.	9	3		352	Barbosa, M. V.	7	1	04	307
Baibich, M. N.	9	3		225	Barbosa, M. V.	7	1	04	306
Baibich, M. N.	9	3		352	Barboza, L. C.	9	3		64
Baibich, M. N.	8	1	09	202	Barci, D. G.	9	3		127
Baierle, R. J.	8	1	13	296	Bargo, P. R.	8	2	01	155
Bakuzis, A. F.	9	3		142	Bargo, P. R.	7	3		150
Baldan, M. R.	8	3		113	Baricco, M.	9	2	09	218
Baldan, M. R.	7	3		95	Barranco, A. V.	7	3		236
Baldocchi, S. L.	9	3		63	Barranco, A. V.	7	3		236
Baldochi, S. L.	9	3		78	Barreto, A. M. F.	9	3		179
Baldochi, S. L.	9	3		251	Barreto, F. C. S.	8	2	12	102
Baldochi, S. L.	9	2	08	62	Barreto, F. C. S.	9	1	12	117
Baldochi, S. L.	7	1	08	53	Barreto, F. C. S.	8	3		108
Bales, B. L.	7	2	03	31	Barrio, J. M.	7	3		91
Balkanski, M.	9	3		178	Barros, F. de S.	9	3		76
Balogh, D. T.	7	3		259	Barros, V. G.	9	3		143
Balzuweit, K.	9	3		77	Barthem, V.	7	3		193
Balzuweit, K.	9	3		80	Bartolomeu, J.	9	3		25

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Baseia, B.	7	3	236	Biaggi, M. H.	8	3	40
Baseia, B.	7	3	237	Bian, S.	9	3	255
Baseia, B.	9	1	02	248	Bian, S.	8	1	02	239
Baseia, B.	7	3	237	Biasi, R. S. de	7	3	167
Basmaji, P.	8	1	13	294	Biasi, R. S. de	8	2	07	174
Basmaji, P.	8	3	301	Bibiano, M. F. de A.	8	3	106
Basmaji, P.	7	1	13	289	Biersack, J. P.	8	2	06	338
Basora, L. A.	9	3	182	Bill, E.	8	2	03	39
Bassi, D.	9	3	27	Bindilatti, V.	7	3	313
Bassi, D.	9	3	27	Bindilatti, V.	8	3	324
Bass, M.	7	3	235	Biondo, A.	9	3	224
Bassols, M. E.	9	3	349	Birnbaum, M.	7	3	238
Bassora, L. A.	7	3	151	Bisch, P. M.	9	3	49
Bastos, T. C.	7	2	11 (Palace)	258	Bisch, P. M.	8	3	43
Batista, D. V. S.	8	1	13	294	Bisch, P. M.	8	3	44
Batista, F. A.	9	3	226	Bisch, P. M.	7	3	35
Batista, J. M. M.	9	3	230	Bisch, P. M.	9	3	50
Batista, W. O. G.	7	1	14	67	Bist, H. D.	8	1	04	315
Batista, W. O. G.	9	3	80	Bjoernehalm, O.	8	3	17
Bean, J. C.	8	2	13	296	Blak, A. R.	8	1	11 (Palace)	264
Beatrice, C. R. S.	7	3	166	Bleux, S.	7	1	08	52
Beatrice, C. R. S.	7	3	167	Bloh, W. V.	8	3	112
Beatrici, A.	8	3	208	Boechat-Roberty, H. M.	8	3	17
Becerra, C. C.	7	2	09	187	Boechat, B.	9	3	219
Becerra, C. C.	9	1	10 (Palace)	213	Boechat, B.	9	3	120
Becerra, C. C.	7	3	313	Bolcatto, P. G.	9	3	283
Becerra, C. C.	9	1	10 (Palace)	212	Bolina, O.	9	3	126
Behar, M.	7	3	8	Bonagamba, T.	9	3	284
Behar, M.	8	1	07	172	Bonagamba, T.	9	1	08	271
Behar, M.	9	3	25	Bonagamba, T. J.	9	3	273
Behar, M.	7	3	11	Bonagamba, T. J.	8	2	11 (Palace)	266
Bejarano, J. M. Z.	7	3	170	Bonagamba, T. J.	7	1	11 (Palace)	257
Belanger, D. P.	7	1	09	183	Bonagamba, T. J.	7	3	260
Bell, M. J. V.	8	1	13	295	Bonagamba, T. J.	9	3	274
Bell, M. J. V.	9	3	161	Bondarenko, A. V.	7	3	313
Bello Jr, B.	9	3	273	Bondarenko, A. V.	8	3	324
Belo, L. C. M.	8	1	02	240	Bonfim, M.	9	3	163
Beltramini, L. M.	8	3	42	Bonfim, O. F. de A.	8	2	12	102
Bemski, G.	8	3	46	Boni, L. de	7	3	10
Benatti, C. R.	8	3	44	Bonventi Jr, W.	9	2	01	159
Benavente, E.	9	3	284	Bordeaux-Rego, A.	8	2	01	155
Benevides, C. A.	9	2	02	249	Borelli, M. E. S.	9	3	121
Bennema, P.	9	3	80	Borges Jr, I.	8	3	14
Bento, A. C.	9	1	11 (Palace)	136	Borges Jr, I.	7	3	9
Bento, A. C.	9	3	355	Borges, A. N.	7	3	291
Bento, A. C.	9	3	355	Borges, C. P. F.	8	3	41
Bernardes, A. T.	7	3	93	Borges, H. A.	9	3	219
Bernardes, A. T.	9	1	12	116	Borges, J. F. M.	9	3	223
Bernardes, E. de S.	7	1	05	5	Borges, N. M.	8	3	279
Bernardes, L. A. B.	9	3	120	Borges, N. M.	7	1	07	276
Bernardot, F.	9	1	02	247	Borges, N. M.	9	3	284
Bernhard, B. H.	8	3	207	Borges, N. M.	8	3	279
Berroir, J. M.	9	1	13	304	Borghs, G.	8	3	301
Bertucci Neto, V.	9	2	01	160	Borissevitch, G.	7	1	03	30
Bezerra, C. A. C. A.	8	2	07	173	Borissevitch, G.	8	3	46
Bezerra, C. G.	8	3	206	Borissevitch, I.	8	3	41

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Borissevitch, I. E.	8	3	45	Bud'ko, S. L.	8	3	322
Borissevitch, I. E.	8	3	45	Bud'ko, S. L.	7	3	195
Bortoleto, R. K.	8	3	74	Bud'ko, S. L.	7	3	196
Boschetti, C.	7	3	290	Bud'ko, S. L.	9	3	284
Boschetti, C.	8	2	13	297	Bud'ko, S. L.	7	3	197
Boselli, M. A.	9	2	07	177	Bud'ko, S. L.	7	3	197
Botaro, V. R.	7	3	259	Budker, V.	9	1	03	281
Botelho, E.	7	2	12	85	Bueno, J. M.	7	2	01	148
Botelho, E.	7	3	99	Bueno, L. L.	9	3	353
Botta Filho, W. J.	7	3	169	Buisson, O.	9	1	04	326
Bouabci, M. B.	9	1	12	117	Bulhoes, E. C. P. L. O. S.	8	3	279
Boudinov, H.	7	3	8	Bulhoes, L. O.	9	3	354
Bourson, P.	9	2	08	61	Bulhoes, L. O. S.	9	3	274
Bourson, P.	7	2	08	53	Bussandri, A. P.	9	3	286
Bowhill, A. M.	7	3	294	Buzano, C.	7	3	86
Brady, M. P. G. F. G.	9	3	130	Cabral, F. A. O.	9	3	228
Brafman, O.	8	2	13	296	Cabral, F. de A. O.	7	3	169
Brafman, O.	7	3	290	Cabral, F. de A. O.	9	3	229
Braga, F. J. H. N.	7	3	33	Cabral, L. R. E.	8	1	04	316
Braga, G. C. B.	8	3	321	Cabrera, G.	8	3	108
Braga, G. C. B.	8	3	322	Cabrera, G. G.	7	2	10 (Palace)	186
Braga, R. R.	8	3	268	Cabrera, G. G.	8	3	208
Branco, N. da S.	9	3	130	Cai, Z.	9	2	10 (Palace)	219
Branco, N. da S.	9	3	123	Calandra, C.	9	2	06	349
Brandao, D.	9	3	221	Caldas, A.	8	3	210
Brandao, L. P. M.	8	3	176	Caldas, A.	8	3	210
Brand, R. A.	8	1	09	200	Caldas, A.	8	3	210
Brasil, M. J. dos S. P.	8	3	301	Caldas, M. J.	8	3	268
Brasil, M. J. S. P.	8	1	13	294	Caldas, M. J.	9	3	48
Brescansin, L. M.	8	3	16	Caldas, M. J.	8	1	13	296
Brescansin, L. M.	8	3	19	Caldas, M. J.	8	3	269
Bretas, R.	9	3	274	Caldas, M. J.	9	3	49
Brinati, J. R.	9	3	131	Caldas, M. J.	7	2	11 (Palace)	258
Brito, A. N. de	9	2	05	23	Caliri, A.	9	3	48
Brito, A. N. de	9	3	25	Caliri, A.	7	3	98
Brito, A. N. de	9	1	05	22	Caliri, A.	9	3	132
Brito, A. N. de	9	1	05	22	Caliri, A.	8	3	114
Brito, J. J. da S.	8	3	211	Caliri, A.	8	3	115
Brito, P. E. de	8	3	206	Calixto, J. B.	8	3	76
Brito, P. E. de	8	3	209	Calvet, A.	9	3	50
Brito, V. da P.	7	3	96	Calvo, R.	7	3	190
Brito, V. da P.	8	3	114	Calvo, R.	9	3	283
Bruckmann, M. E.	9	3	353	Calvo, R.	9	3	283
Brumatto, H. J.	9	1	10 (Palace)	213	Calvo, R.	9	3	284
Brum, J. A.	8	3	301	Calvo, R. A.	9	3	283
Brunelle, A.	9	3	353	Camargo Jr, S.	8	3	346
Brune, M.	9	1	02	247	Camargo Jr, S. de S.	8	3	346
Brunet, L.	8	3	106	Camargo, M. B. de	7	3	238
Brunetti, A.	8	3	74	Camargo, P. C. de	7	3	191
Brunetti, A. H.	9	3	285	Camargo, P. C. de	9	3	163
Brunetti, A. H.	9	3	286	Camargo, P. C. de	7	3	198
Brunnet, L. G.	8	3	107	Camargo, P. C. de	7	3	152
Bruno, O. M.	9	3	164	Camargo, P. C. de	7	3	198
Brusa, B.	8	2	06	338	Camelo Neto, G.	7	3	96
Bud'Ko, S. L.	7	3	312	Camilo Junior, A.	8	3	267
Bud'Ko, S. L.	7	3	193	Camilo Junior, A.	7	3	263

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Cammack, R.	8	3		42	Carvalho, A. A. de	7	1	01	146
Campo, J.	9	1	10 (Palace)	212	Carvalho, C. A. A. de	9	3		127
Campomanes, R.	8	3		175	Carvalho, C. A. M.	9	3		79
Campos, A. A. G.	9	3		227	Carvalho, C. L.	7	3		313
Campos, C.	8	1	08	56	Carvalho, C. M. B.	9	3		224
Campos, C.	9	3		228	Carvalho, C. R. C. de	7	1	05	6
Campos, C.	9	3		230	Carvalho, I. C. S.	8	3		243
Campos, C.	7	3		170	Carvalho, J.	8	2	02	241
Campos, F. A.	8	3		321	Carvalho, J. C. de	9	3		78
Campos, F. A.	8	3		322	Carvalho, J. F.	8	1	08	56
Campos, H. S.	9	3		79	Carvalho, J. F.	8	3		245
Campos, J. S. de C.	7	3		36	Carvalho, J. F.	8	3		245
Campos, P. R. de A.	9	3		122	Carvalho, L. A. V. de	7	3		149
Campos, S. M. da C.	7	3		32	Carvalho, M. M. G. de	9	3		64
Cancela, L. S. G.	7	2	08	54	Carvalho, M. M. G. de	9	3		64
Candela, D. S.	7	3		197	Carvalho, M. M. G. de	8	1	08	55
Cannas, S. A.	7	3		86	Carvalho, M. M. G. de	7	1	13	289
Cannas, S. A.	7	3		93	Carvalho, R. E. de	9	3		132
Cantarero, A.	8	1	13	295	Carvalho, R. P. de	7	3		32
Canuto, S.	9	1	04	326	Carvalho, V. E. de	7	3		335
Canuto, S.	7	1	05	5	Carvalho, V. E. de	7	3		335
Canuto, S.	8	1	05	13	Carvalho, W.	8	2	01	155
Caparica, A. de A.	9	2	12	119	Casagrande, D.	8	3		299
Caparica, A. de A.	7	3		90	Casas, J. S.	8	3		73
Capelli, M. R.	7	3		199	Cassaró, F. A. M.	9	3		160
Caram, J. A.	8	3		76	Castellano, E. E.	8	3		73
Carara, M.	9	3		223	Castellano, E. E.	8	3		76
Carbonari, A. W.	9	1	10 (Palace)	213	Castellano, E. E.	8	1	14	72
Carbonari, A. W.	9	3		80	Castelletto, V.	9	3		77
Carbonari, A. W.	9	3		228	Castilho, C. M. C. de	9	2	06	349
Carbonari, A. W.	9	3		228	Castilho, C. M. C. de	7	3		335
Cardoso, A. M.	9	3		141	Castillo, I. A.	8	1	04	315
Cardoso, F. C.	9	3		140	Castro Neto, J. C. de	7	2	01	148
Cardoso, J. C. S.	7	3		34	Castro, A. C. de	9	3		253
Cardoso, L. P.	8	2	13	297	Castro, A. R. B. de	8	3		17
Cardoso, L. P.	7	2	14	68	Castro, A. R. B. de	9	3		162
Cardoso, L. P.	8	1	08	56	Castro, A. R. B. de	9	3		162
Cardoso, L. P.	8	3		59	Castro, C. F. de S.	7	3		11
Cardoso, M.	7	2	07	166	Castro, C. S. C. de	7	3		334
Cariri, V.	9	3		122	Castro, J. C. de	7	2	01	146
Cariri, V.	8	2	05	14	Castro, J. C. de	7	2	01	147
Carlin, R. T.	9	4	12	362	Castro, J. C. de	7	3		149
Carmo, L. C. S. do	8	3		176	Castro, J. D. e	8	3		204
Carneiro, C. E. I.	9	1	12	117	Castro, J. D. E	7	3		188
Carneiro, C. E. I.	9	3		121	Castro, S. G. C. de	7	2	06	330
Carneiro, C. E. I.	7	3		87	Castro, S. G. C. de	7	3		333
Carneiro, G.	9	1	04	325	Castro, S. G. C. de	9	1	08	271
Carneiro, L. C.	8	3		345	Catalani, F.	7	3		235
Carpanezzi, C. H.	7	3		153	Caticha, N.	7	3		95
Carreno, M. N. P.	8	3		176	Caticha, N.	7	2	12	84
Carrico, A. S.	7	3		189	Cattani, M. M.	8	3		278
Carrico, A. S.	8	1	09	200	Catunda, T.	9	3		256
Carrico, A. S.	8	3		206	Catunda, T.	7	2	02	234
Carrico, A. S.	7	3		189	Caumo, J. R.	8	2	01	155
Carrillo, D.	7	1	14	67	Cavagis, A. D. M.	9	3		230
Carvalho Jr, J. A. de	7	3		332	Cavalcante, E. M.	9	3		275

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Cavalcante, F. S. A.	7	3	10	Chevrollier, M.	9	1	05 21
Cavalcanti, G. de H.	9	2	05 23	Chiappe, G.	9	1	13 304
Cavalcanti, G. de H.	9	3	24	Chiaradia, C.	7	2	01 146
Cavalcanti, L. P.	8	3	343	Chiaradia, C.	7	2	01 147
Cavalcanti, L. P.	7	2	14 70	Chinaglia, E. F.	8	1	09 202
Cavalcanti, S. B.	8	1	02 240	Chiquito, A. J.	8	3	344
Cavalcanti, S. B.	8	3	243	Chitta, V. A.	9	1	13 304
Cavalli, A.	9	3	350	Christ, B.	9	3	255
Cavenaghi, M. A.	7	3	151	Chubaci, J. F. D.	9	3	351
Cebollada, F.	9	3	220	Chubaci, J. F. D.	8	2	06 338
Cechin, J. C.	9	1	04 326	Cilense, M.	7	3	167
Celaschi, S.	8	3	242	Cilense, M.	8	2	07 174
Celaschi, S.	7	2	01 147	Clark, D. T.	8	4	09 359
Celaschi, S.	7	3	237	Coaquira, J. A. H.	7	3	193
Cerdeira, F.	7	3	290	Coelho Neto, J. A.	9	3	285
Cerdeira, F.	8	1	13 295	Coelho Neto, J. A.	7	1	07 276
Cerdeira, F.	8	2	13 296	Coelho Neto, J. A.	9	3	285
Cerqua-Richardson, K.	7	3	235	Coelho, A. A.	9	3	230
Cervantes, H.	8	3	279	Coelho, A. de A.	9	3	229
Cervantes, H.	7	3	151	Coelho, F. O.	9	3	122
Cervantes, R. H.	9	3	287	Coelho, L. F. de S.	8	3	14
Cervantes, R. Hernan	9	2	03 283	Coelho, L. F. de S.	7	3	9
Cesar, C. L.	9	3	250	Cohenca, C. H.	8	3	319
Cesar, C. L.	9	3	251	Coimbra, D.	8	3	19
Cesar, C. L.	8	3	299	Colnago, L. A.	9	2	01 158
Cesar, C. L.	9	3	64	Colucci, C. C.	9	3	228
Cesar, C. L.	7	2	01 147	Colussi, V. C.	7	3	36
Cesar, C. L.	7	1	02 232	Colussi, V. C.	7	3	36
Cesar, C. L.	8	1	13 296	Conceicao, A. da	8	3	319
Cesar, L.	9	3	129	Coniglio, A.	7	1	12 82
Cescato, L.	8	2	02 242	Constantino, C. J. L.	7	3	259
Cescato, L.	8	2	02 242	Continentino, M. A.	9	3	219
Cescato, L.	9	2	06 349	Continentino, M. A.	9	3	120
Ceschin, A. M.	8	2	13 297	Continentino, M. A.	7	3	196
Cesena, M.	9	1	10 (Palace)	214	Continentino, M. A.	7	3	197
Chacham, H.	8	2	13 298	Continentino, M. A.	8	3	211
Chacham, H.	7	1	05 5	Continentino, M. A.	7	3	193
Chadwick, A. V.	8	3	60	Coqblin, B.	7	2	10 (Palace)	185
Chahine, J.	7	2	03 32	Coral, A.	8	2	01 154
Chalub, F. A. da C. C.	8	3	112	Coral, C.	8	2	01 155
Chambliss, D. D.	7	4	09 357	Corat, E. J.	8	3	340
Chambliss, D. D.	9	1	06 346	Corat, E. J.	8	3	341
Chambouleyron, I.	8	3	175	Corat, E. J.	8	3	175
Chambouleyron, I. E.	8	3	340	Corat, E. J.	8	3	342
Chame, A. M. N.	7	3	91	Cordeiro, C. E.	8	3	114
Chate, H.	8	3	107	Cordeiro, C. E.	9	3	133
Chaves Junior, J. da C.	9	3	47	Cordoni, F.	8	3	73
Chaves, A. S.	7	3	94	Cornejo, D. R.	9	3	221
Chaves, A. S.	8	3	303	Cornelio, M. L.	8	3	44
Chaves, F. A. B.	7	3	190	Corona Jr, N.	9	2	01 158
Chemello, V.	7	3	35	Corona Junior, N.	7	2	01 147
Chen, K.	9	2	10 (Palace)	218	Corona Junior, N.	9	2	01 158
Chen, L. Y.	8	3	113	Correa, G. E. de M.	8	3	269
Chermanne, S.	7	1	08 52	Corso, G.	8	3	107
Chesman, C.	8	1	09 201	Cortela, G.	7	3	170
Chevrollier, M.	9	2	02 249	Cortez-Maghelly, C.	9	3	50

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Cortez-Maghelly, C.	9	3	50	Crestana, S.	9	3	160
Costa Filho, A. J. da	9	3	284	Crestana, S.	8	2	12	102
Costa Filho, R. N.	7	3	10	Crestana, S.	9	1	01	158
Costa Filho, R. N. da	8	3	112	Crestana, S.	9	1	01	157
Costa Filho, R. N. da	8	3	115	Cretelli, N. B. S.	8	3		43
Costa Jr, A. T. da	8	3	204	Cruvinel, P. E.	7	3		149
Costa Jr, M. I. da	9	3	220	Cruvinel, P. E.	7	2	01	148
Costa Jr, M. I. da	9	3	223	Cruvinel, P. E.	9	3		162
Costa, A. A.	8	1	09	201	Cruvinel, P. E.	9	2	01	160
Costa, A. A.	8	2	10 (Palace)	136	Cruvinel, P. E.	7	3		152
Costa, A. C. R. da	9	3	275	Cruvinel, P. E.	9	1	01	158
Costa, A. C. R. da	8	3	59	Cruvinel, P. E.	9	3		164
Costa, A. R. da	7	3	168	Cruz, C. H. B.	9	3		250
Costa, B. V. da	9	2	10 (Palace)	218	Cruz, C. H. B.	9	3		251
Costa, E. X.	8	3	40	Cruz, C. H. de B.	7	3		290
Costa, F. A. da	9	3	123	Cruz, H. R. da	9	1	12	118
Costa, J. A. T. B. da	7	3	169	Cruz, J. M. R.	9	3		255
Costa, J. A. T. B. da	7	3	150	Cruz, N. C. da	8	3		340
Costa, J. A. T. B. da	9	3	352	Cruz, N. C. da	8	3		341
Costa, J. E. R.	9	2	10 (Palace)	218	Cruz, N. C. da	8	3		342
Costa, L. S. da	8	3	16	Cuevas, R. F.	9	3		64
Costa, M. C. P.	8	3	44	Cuffini, S. L.	9	3		78
Costa, M. H. de A. S.	8	3	59	Cuffini, S. L.	8	3		74
Costa, M. M.	9	1	08	270	Cuffini, S. L.	8	1	07	172
Costa, M. V. T.	8	3	204	Cuffini, S. L.	9	3		285
Costa, M. V. T.	8	3	204	Cugnasca, C. E.	9	1	01	157
Costa, M. V. T.	7	3	188	Cuitinho, S.	7	3		32
Costa, R. A. L.	7	3	93	Cunha, A. G.	8	3		59
Costa, R. L. B.	8	3	109	Cunha, A. G.	9	3		65
Costa, S. C.	8	3	205	Cunha, C.	8	3		268
Costa, T. V. V.	9	3	224	Cunha, H. N. da	7	3		259
Costa, U. M. de S.	9	1	12	118	Cunha, J. B. M. da	9	3		352
Costa, U. M. de S.	8	3	103	Cunha, S. F. da	7	3		194
Costa, U. M. de S.	9	1	12	118	Cunha, S. F. da	7	3		194
Costa, U. M. S.	8	3	105	Cunha, S. L. S.	7	3		10
Costa, V.	7	3	168	Curado, E.	9	3		124
Cotta, M. A.	8	1	08	55	Curado, E. M. F.	7	3		92
Couce, M. D.	8	3	73	Curado, E. M. F.	7	3		97
Courrol, L. C.	8	3	58	Curado, E. M. F.	9	3		123
Courrol, L. C.	8	3	58	Curilef, S.	9	3		127
Courrol, L. C.	9	2	08	61	Curvelo, A. A. da S.	7	3		196
Coutinho-Filho, M. D.	8	3	269	Curvelo, A. A. S.	7	3		259
Coutinho-Filho, M. D.	7	1	12	82	Cury, L. A.	8	3		298
Coutinho, S.	7	3	96	Cury, L. A.	8	3		299
Coutinho, S.	9	3	123	Cusatis, C.	7	2	14	70
Coutinho, S.	9	3	124	Cusatis, C.	7	2	14	69
Coutinho, S.	9	3	124	Cusatis, C.	8	1	14	72
Couto, F. O.	8	3	106	Custodio, M. C. C.	9	3		63
Couto, M. da S.	7	2	06	331	Custodio, M. C. C.	8	1	08	55
Couto, V. L. M.	8	3	344	d'Aguiar Neto, M. M. F.	9	3		179
Craco, L.	8	3	207	D'Ajello, P. C. T.	8	3		105
Craievich, A.	7	1	14	66	D'Almeida, E. R.	7	3		200
Craievich, A.	8	1	14	71	D'Azeredo, M. T.	9	3		224
Creiasco, J. D.	7	3	168	Da Ros, P.	8	1	01	153
Creiasco, J. D.	7	3	168	Dacal, L. C. O.	9	2	06	349
Cressoni, J. C.	8	3	206	Daghastanli, N. A.	7	3		33

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Daguiar Neto, M. M. F.	9	3		180	Donangelo, R. J.	8	3		14
Damasceno, O. de O.	9	1	08	272	Donatti, D. A.	9	3		178
Damasceno, O. de O.	8	2	11 (Palace)	266	Donatti, D. A.	9	3		178
Damasceno, O. de O.	8	2	11 (Palace)	267	Donoso, J. P.	9	3		274
Damiao, A. J.	7	3		311	Donoso, P.	7	1	07	276
Damiao, A. J.	9	3		350	Donoso, P.	9	3		284
Dantas, A. L.	7	3		189	Donoso, P.	9	1	08	271
Dantas, A. L.	7	3		189	Donoso, P.	8	2	11 (Palace)	266
Dantas, C. M. A.	9	1	02	248	Doran, D.	9	1	10 (Palace)	214
Dantas, I. F.	9	3		179	Doria, M. M.	9	1	04	326
Dantas, N. O.	9	3		181	Doria, M. M.	7	2	04	308
Dantas, N. O.	7	2	07	166	Doria, R.	7	3		315
Dantas, N. O.	9	3		181	Doria, R. M.	8	3		212
Dantas, N. O.	7	3		152	Doria, R. M.	7	3		315
Dantas, N. O.	9	3		181	Drugowich, J. R.	9	1	12	117
Dantas, N. O.	9	3		181	Duarte, A. S.	8	1	02	239
Davidovich, L.	7	3		234	Duarte, M.	9	2	08	62
Davidovich, L.	9	1	02	248	Duarte, M.	7	1	08	53
Davidovich, L.	9	1	02	247	Du, J.	7	4	13	357
Davidovich, L.	7	3		236	Du, J.	9	1	03	281
Davidovich, M. A. M.	9	1	13	305	Du, J.	9	1	03	282
De Reggi, A. S.	8	2	11 (Palace)	266	Duran, J. E. R.	7	3		34
De-Castro-Faria, N.	8	3		14	Durrant, S. F.	8	3		340
De-Castro-Faria, N. V.	7	3		9	Durrant, S. F.	9	3		161
De-Castro-Faria, N. V.	8	3		14	Durrant, S. F.	7	3		149
De-Castro-Faria, N. V.	7	3		9	Durrant, S. F.	8	3		341
Degani, M. H.	9	1	13	304	Durrant, S. F.	8	3		342
Degani, M. H.	7	3		291	Early, E. A.	8	1	04	317
Degasperi, F. T.	7	3		334	Early, E. A.	7	1	04	307
Degterev, I. A.	7	1	03	30	Eaton, G. R.	9	4	12	362
Delben, A. A. S. T.	7	1	07	276	Eaton, G. R.	7	4	13	357
Della-Negra, S.	9	3		353	Eaton, G. R.	9	1	03	281
deLyra, J. L.	9	3		47	Eaton, G. R.	9	1	03	282
Denicolo, I.	9	3		230	Eaton, S. S.	9	4	12	362
Destro, M. A. F.	9	3		350	Eaton, S. S.	7	4	13	357
Destro, M. G.	9	2	02	249	Eaton, S. S.	9	1	03	281
Destro, M. G.	9	3		255	Eaton, S. S.	9	1	03	282
Deutsch, J.	9	1	05	22	Ebe, A.	8	2	06	338
Dezaneti, L. M.	7	3		96	Echegut, P.	7	1	08	52
Dias, N. L.	8	3		59	Eduardo, M. L. de P.	8	3		344
Dias, S. de P.	7	3		331	Eiju, T.	8	2	02	241
Diaz, I. F. L.	8	3		302	Eiju, T.	8	2	02	241
Diehl, A.	9	3		120	Eiras, J. A.	9	2	07	177
Dini, D. C.	8	3		242	Eiras, J. A.	7	2	08	54
Diniz, I. S.	8	2	01	155	Eiras, J. A.	7	3		151
Djanikian, F.	8	3		205	Eiras, J. A.	8	3		175
Djanikian, F.	7	3		188	Eiras, J. A.	9	3		65
Djanikian, F.	8	3		205	Eiras, J. A.	9	3		182
Djanikian, F.	7	3		197	El-Massalami, M.	7	3		197
Domingos, F. I.	7	3		315	El-Massalami, M.	9	3		227
Domingues, P. H.	9	3		219	Ellis, D. E.	7	3		311
Domingues, P. H.	9	3		226	Ellis, D. E.	7	3		192
Dominguez, A. B.	7	3		311	Emmerich, F. G.	8	3		59
Dominguez, D. R. C.	7	2	12	84	Emmerich, F. G.	9	3		65
Donangelo, R.	7	3		12	Emura, M.	9	3		222
Donangelo, R. J.	7	3		9	Enckevort, W. J. P. V.	7	2	06	331

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Enderlein, R.	8	2	13	298	Feitosa, E.	8	3		44
Enderlein, R.	8	1	13	294	Felcio, J. R. D. de	9	3		130
Enderlein, R.	8	2	13	297	Felcio, J. R. D. de	9	1	12	117
Enderlein, R.	8	3		301	Felcio, J. R. D. de	7	3		35
Enderlein, R.	7	3		292	Fellows, C. E.	9	3		24
Engelsberg, M.	9	2	03	282	Fellows, C. E.	7	3		9
Engelsberg, M.	7	1	07	276	Ferlioli, M. F.	7	3		259
Erskine, J. L.	7	1	06	328	Ferlauto, A. S.	7	3		332
Escote, M. T.	7	3		310	Fernandes, A. A. R.	8	2	07	174
Esperidiao, A. S. C.	7	3		97	Fernandes, A. A. R.	9	3		284
Esquivel, D. M.	7	3		32	Fernandes, C.	7	3		86
Esquivel, D. M.	8	3		41	Fernandes, J. C.	9	3		219
Evangelista, L. R.	8	2	10 (Palace)	135	Fernandes, P. A.	7	3		34
Evangelista, L. R.	7	3		86	Fernandes, P. R. G.	9	2	11 (Palace)	139
Evangelista, L. R.	9	1	11 (Palace)	136	Fernandes, R. T.	8	3		319
Evangelista, L. R.	9	3		140	Fernandez, M. T.	9	1	10 (Palace)	212
Evangelista, L. R.	9	3		140	Fernandez, R. M.	8	1	09	202
Evangelista, L. R.	8	2	10 (Palace)	135	Ferrari, C. A.	9	3		26
Evenson, K. M.	7	2	02	233	Ferrari, C. A.	8	3		18
Fabbri, M.	9	3		62	Ferrari, C. A.	9	3		26
Facin, J. A.	9	3		26	Ferrari, M.	9	3		49
Facin, J. A.	8	3		18	Ferraz, A.	9	1	04	325
Facin, J. A.	9	3		26	Ferraz, A.	8	3		209
Falcao-Filho, E. L.	7	1	02	232	Ferraz, A. C.	8	3		299
Fantini, M. C. A.	7	2	14	69	Ferraz, A. C.	8	2	13	298
Fantini, M. C. A.	9	3		79	Ferraz, A. C.	7	3		332
Farenzena, L. S.	9	3		272	Ferraz, A. C.	7	3		333
Faria Jr, I. F. de	8	2	02	242	Ferraz, A. M.	7	1	07	276
Faria, A. C. de	9	3		123	Ferreira Neto, S. J.	9	3		129
Faria, C. C. de	8	3		207	Ferreira, C. L.	8	3		176
Faria, G. C. de	9	3		275	Ferreira, C. M.	7	2	05	7
Faria, L. C.	8	3		75	Ferreira, F. F.	7	2	14	69
Faria, R. M.	7	1	11 (Palace)	257	Ferreira, G. F. L.	8	1	11 (Palace)	265
Faria, R. M.	7	3		262	Ferreira, G. F. L.	9	3		179
Faria, R. M.	7	3		259	Ferreira, G. F. L.	8	3		270
Faria, R. M.	7	3		259	Ferreira, J.	7	3		311
Faria, R. M.	7	1	11 (Palace)	257	Ferreira, J. M.	7	1	04	306
Faria, R. M.	7	2	08	54	Ferreira, J. M.	7	1	04	307
Faria, R. M.	7	2	11 (Palace)	259	Ferreira, J. M.	7	1	04	306
Faria, R. M.	9	2	07	178	Ferreira, J. V. B.	8	3		204
Faria, R. M.	7	3		261	Ferreira, L. G.	7	2	05	8
Faria, R. M.	7	3		264	Ferreira, L. G.	9	2	07	177
Faria, R. M. C.	9	3		164	Ferreira, M. A. E.	8	3		18
Farias, G. A.	7	3		292	Ferreira, M. de F. O.	7	3		196
Farias, G. de A.	8	3		206	Ferreira, N. G.	8	3		340
Farias, G. de A.	7	3		293	Ferreira, N. G.	8	3		341
Favaro, A.	7	3		152	Ferreira, N. G.	9	2	06	349
Favaro, S.	7	3		198	Ferreira, W. S.	9	3		162
Fazzio, A.	9	1	04	326	Ferre, J.	8	2	09	202
Fazzio, A.	7	1	05	5	Ferri, P. H.	8	3		75
Fazzio, A.	7	3		335	Fichtner, P. F. P.	8	1	07	172
Fazzio, A.	7	3		292	Fichtner, P. F. P.	9	3		25
Fehsenfeld, K. M.	8	3		114	Fiedler-Ferrara, N.	8	3		103
Feitosa, C. A. C.	8	3		112	Figueira, M. S.	7	2	10 (Palace)	185
Feitosa, C. A. C.	8	3		115	Figueiredo Neto, A. M.	9	3		140
Feitosa, C. C.	8	1	09	201	Figueiredo Neto, A. M.	9	3		141

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Figueiredo Neto, A. M.	9	3	142	Fraguito, H. L.	7	1	02	232
Figueiredo Neto, A. M.	9	2	11 (Palace)	138	Fraguito, H. L.	8	1	02	239
Figueiredo Neto, A. M.	9	2	11 (Palace)	139	Fraguito, H. L.	8	1	11 (Palace)	265
Figueiredo, J. M.	8	2	12	101	Fraguas, G. B.	9	3	162
Figueiredo, J. M. A.	8	2	12	101	Fraguas, G. B.	7	3	334
Figueiredo, W.	8	3	105	Franca, C.	9	3	180
Figueiredo, W.	9	3	127	Franca, D. R.	8	2	01	156
Figueiredo, W.	9	3	128	Franca, F.	8	3	211
Figueiredo, W.	9	3	128	Franca, F. A.	8	3	209
Filgueira, M.	8	1	07	172	Franceschini, D. F.	8	2	06	338
Finger, F.	8	3	346	Franceschini, D. F.	8	3	343
Fisher, M. E.	7	1	12	83	Franceschini, D. F.	8	3	343
Fisk, Z.	8	3	277	Franceschini, D. F.	8	2	06	338
Fisk, Z.	8	3	322	Franceschini, D. F.	8	3	345
Fittipaldi, I. P.	9	3	124	Franco, B. J. O.	9	3	77
Flemming Neto, J.	9	2	02	250	Franco, D. W.	9	2	03	282
Flemming Neto, J.	9	3	253	Franco, R. W. de A.	8	3	277
Flemming Neto, J.	9	3	253	Frankel, R. B.	7	2	03	31
Flemming Neto, J.	9	3	26	Frare, P. L.	7	1	07	276
Florencio Jr, J.	8	2	12	102	Frare, P. L.	9	3	284
Florencio Jr, J.	9	2	10 (Palace)	219	Frare, P. L.	9	1	08	271
Florencio, O.	7	3	169	Fredericci, C.	9	3	63
Florencio, O.	7	3	199	Freire Jr, F. L.	8	2	06	338
Flores, W. H.	9	3	352	Freire Jr, F. L.	8	3	343
Florez, A.	8	1	02	239	Freire Jr, F. L.	8	3	343
Florez, A.	9	3	256	Freire Jr, F. L.	8	2	06	338
Foerster, B. U.	8	3	278	Freire Jr, F. L.	8	2	07	174
Fogel, L.	7	3	315	Freire Jr, F. L.	8	3	345
Foglio, M. E.	7	2	10 (Palace)	185	Freire, P. de T. C.	7	2	07	165
Foglio, M. E.	8	3	205	Freire, S. L. S.	8	3	298
Foner, S.	8	3	320	Freire, V. N.	7	3	10
Fonseca, A. L. A.	7	3	11	Freire, V. N.	7	3	292
Fonseca, A. L. de A.	8	3	19	Freire, V. N.	7	3	293
Fonseca, E. J. S.	8	1	02	240	Freitas, D. S.	8	3	246
Fonseca, E. J. S.	7	1	02	232	Freitas, H. N.	9	3	255
Fonseca, J. L. C.	9	1	08	270	Freitas, J. C. B.	9	3	254
Fonseca, J. L. C.	7	3	260	Freitas, J. C. C. de	8	3	59
Fonseca, P. de T.	9	3	162	Freitas, U. de	9	3	132
Fonseca, R. E. da	8	3	277	Freitas, U. de	8	3	109
Fonseca, T. L.	7	2	11 (Palace)	258	Freitas, W. A. de	7	3	169
Fontenelle, M. T.	9	1	02	247	Frejlich, J.	8	3	245
Fontes, A. C. S.	8	3	15	Frejlich, J.	8	3	245
Fontes, M. B.	7	3	312	Frejlich, J.	9	3	255
Fontes, M. B.	8	3	322	Frejlich, J.	8	1	02	239
Fontes, M. B.	7	3	195	Frejlich, J.	8	2	02	241
Fontes, M. B.	7	3	196	Freschi, A.	8	2	02	241
Fontes, M. B.	7	3	197	Frommer, J. E.	7	4	02	356
Fontes, M. B.	9	3	227	Frota-Pessoa, S.	7	2	10 (Palace)	186
Fontes, M. B.	7	3	197	Frota-Pessoa, S.	7	2	06	329
Formigoni, C. E.	7	3	33	Frota-Pessoa, S.	9	3	222
Fornes, J. A.	9	3	46	Frota-Pessoa, S.	8	3	209
Fornes, J. A.	9	3	46	Fucheng, L.	9	2	02	249
Fraga, E. S.	9	3	127	Fujimoto, F.	8	2	06	338
Fragalli, J. F.	8	3	342	Fujimoto, M. M.	8	3	16
Fraguito, H. L.	9	3	250	Fullerton, E. E.	9	1	06	347
Fraguito, H. L.	9	3	251	Furtado, C.	9	3	131

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Fuzikawa, K.	7	1	08	52	Giordanengo, B.	7	3		312
G. Neto, J. M.	7	3		259	Giordanengo, B.	7	3		193
Gabas, M.	7	2	09	187	Giordanengo, B.	8	3		322
Galembeck, F.	9	1	08	271	Giotto, M. V.	9	3		273
Galetti, D.	9	3		126	Giotto, M. V.	8	2	11 (Palace)	266
Galkin, V. Y.	7	3		198	Giotto, M. V.	7	1	11 (Palace)	257
Galkin, V. Y.	7	3		198	Giraldi, M. T. M. R.	7	3		237
Gallo, N. J. H.	8	3		245	Giri, A. K.	9	3		227
Gallo, N. J. H.	8	3		245	Givord, D.	9	3		220
Galvao, D. S.	8	3		267	Glossman, M. D.	8	3		76
Galvao, D. S.	7	3		263	Gobato, Y. G.	9	1	13	304
Galvao, D. S.	9	3		48	Godfrin, H.	9	3		351
Galvao, D. S.	8	3		269	Godinho, C. F. L.	8	3		15
Galvao, D. S.	9	3		49	Godinho, C. F. L.	8	3		15
Galzerani, J. C.	8	1	13	294	Goldman, C.	8	3		112
Galzerani, J. C.	8	3		301	Gomes Jr, S. R.	8	3		115
Galzerani, J. C.	8	3		302	Gomes, A. A.	9	1	10 (Palace)	213
Gama, E. A. R. M. da	7	3		193	Gomes, A. G.	9	3		221
Gama, S.	7	3		191	Gomes, A. M. de S.	7	3		191
Gama, S.	9	3		225	Gomes, A. M. de S.	7	3		191
Gama, S.	9	3		228	Gomes, L.	8	3		58
Gama, S.	9	3		229	Gomes, L.	8	3		58
Gama, S.	9	3		229	Gomes, L.	9	2	08	61
Gama, S.	9	3		230	Gomes, L.	8	2	08	57
Gama, S.	7	3		170	Gomes, L. L.	9	3		65
Gamba, Z.	9	3		180	Gomes, M. A. de F.	7	3		96
Gameiro, C. G.	7	1	04	306	Gomes, M. A. de F.	8	3		114
Gandra, F. C. G.	9	2	03	282	Gomes, M. A. de F.	7	3		97
Gandra, F. C. G.	9	2	09	216	Gomes, M. A. de F.	8	3		114
Garavelli, S. L.	9	1	04	325	Gomes, U. U.	8	1	07	172
Garbin, J. R.	7	3		153	Gomez-Polo, C.	9	2	09	215
Garcia Neto, A.	9	2	01	159	Gomide, J. V. B.	9	2	05	23
Garcia Neto, A.	7	3		151	Gomide, J. V. B.	9	3		24
Garcia, F.	7	3		194	Goncalves, E. G.	9	3		162
Garcia, P. M.	8	3		245	Goncalves, G. R. R.	9	2	11 (Palace)	138
Garland, M. T.	8	3		73	Goncalves, L. C. D.	8	3		303
Garland, M. T.	7	1	14	67	Goncalves, L. L.	9	3		125
Garlipp, W.	7	3		167	Goncalves, L. L.	9	2	10 (Palace)	217
Garrat, R.	8	1	14	72	Goncalves, L. L.	9	3		125
Gastelois, P. L.	8	3		299	Goncalves, L. L.	9	3		125
Gelfuso, V. C.	7	3		196	Goncalves, L. L.	7	3		89
Gervais, F.	7	1	08	52	Goncalves, N.	7	3		9
Gesland, J.	7	1	08	53	Goncalves, O. D.	7	3		9
Ghfari, M.	7	1	14	68	Goncalves, S.	9	3		123
Ghim, B.	7	4	13	357	Goncalves, W. M.	8	3		104
Ghim, B.	9	1	03	282	Goncalves, W. M.	8	3		104
Ghiner, A. V.	7	2	07	165	Goncalves, W. M.	8	3		107
Ghiner, A. V.	9	3		182	Goncalves, W. M.	8	3		107
Ghivelder, L.	8	1	04	315	Goncalves, W. M.	8	3		108
Giacometti, J. A.	9	1	08	270	Gontijo, L. C.	9	3		65
Giacometti, J. A.	8	2	11 (Palace)	266	Gonzaga, A.	9	3		163
Giacometti, J. A.	8	1	11 (Palace)	265	Gonzalez, G.	9	3		284
Giacometti, J. A.	7	3		260	Gonzalez, J. A.	8	3		103
Giannoni, R. A.	9	3		285	Gonzalez, J. M.	9	3		220
Giles, L. F.	8	3		176	Gonzalez, J. M.	9	3		221
Giordanengo, B.	7	3		312	Gonzalez, J. M.	9	3		222

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Gonzalez, J. M.	9	3		227	Guimaraes, A. P.	9	2	09	219
Gonzalez, O.	8	3		73	Guimaraes, A. P.	9	3		225
Gonzalez, O.	8	3		73	Guimaraes, A. P.	8	3		208
Gonzalez, O.	7	1	14	67	Guimaraes, A. P.	7	3		197
Gordiets, B.	7	2	05	7	Guimaraes, L. G.	9	3		254
Gorenstein, A.	7	2	14	69	Guimaraes, P. S. S.	8	3		303
Gorenstein, A.	8	2	06	339	Guimaraes, R. B.	7	3		259
Gorenstein, A.	7	3		336	Guimaraes, R. B.	9	3		219
Goulart, G.	7	1	08	52	Guldner, Y.	9	1	13	304
Gouvea, M. E. de	9	3		128	Gusmao, M. A. C.	8	3		207
Gouvea, M. E. de	7	3		86	Gusmao, M. A. C.	8	3		208
Gouveia Junior, M. E. H. de	9	3		162	Haanappel, E.	9	3		219
Gouveia Neto, A. S.	8	3		242	Haas, H.	9	3		228
Gouveia-Neto, A. S.	7	1	02	232	Haas, V. J.	7	3		98
Gouveia, E. A.	8	3		242	Haetinger, C. M.	9	3		223
Granado, E.	8	3		322	Hai, G. Q.	8	3		301
Granato, E.	9	1	04	326	Hakkarainen, T.	8	3		59
Granato, E.	7	3		95	Hallberg, K. A.	9	3		131
Grande, P. L.	7	3		8	Hallen, A.	9	3		272
Grande, P. L.	8	3		18	Hanamoto, L. K.	9	3		286
Grande, P. L.	7	3		11	Harboe, P. B.	8	3		244
Grandi, B. C. da S.	9	3		128	Haroche, S.	9	1	02	247
Grandini, C. R.	7	3		169	Hart, M.	8	4	12	358
Grandini, C. R.	7	3		199	Hase, Y.	9	3		27
Grandini, C. R.	7	3		262	Havill, R. L.	7	1	07	276
Grandini, C. R.	7	3		153	Hayashi, M. A.	8	2	13	297
Grandini, C. R.	8	3		211	Hayashi, M. A.	8	1	08	56
Grandi, T. A.	8	1	07	171	Helena, E. L. de S.	7	3		85
Grandi, T. A.	7	3		170	Henderson, J. A.	9	1	04	325
Grigoryan, L. S.	8	1	04	315	Henriques, A. B.	8	3		303
Grigoryan, L. S.	8	3		321	Henriques, V. B.	9	3		47
Grillo, M. L. N.	7	3		167	Henriques, V. B.	8	3		112
Grillon, M. P.	9	3		122	Henriques, V. B.	7	3		97
Groeneveld, K. O.	8	3		20	Herberts, M. R.	9	3		25
Groote, J. J. de	7	1	05	5	Hernandes-Calderon, I.	7	3		290
Gross, B.	7	3		199	Hernandes, A. C.	8	1	08	56
Gross, B.	7	1	11 (Palace)	257	Hernandes, A. C.	9	3		63
Gross, B.	7	1	11 (Palace)	257	Hernandes, A. C.	8	1	07	172
Grossinger, R.	9	3		220	Hernandes, A. C.	8	1	08	55
Grossinger, R.	9	2	09	217	Hernando, A.	9	2	09	215
Grossinger, R.	9	3		221	Herrmann, H.	7	3		92
Grossinger, R.	9	3		222	Herrmann, P. S. de P.	9	2	01	158
Grossmann, B.	7	4	12	358	Hessel, R.	7	3		199
Guedes, I.	9	1	05	21	Hessel, R.	7	1	11 (Palace)	257
Guedes, I.	9	1	05	22	Hessel, R.	7	1	11 (Palace)	257
Guenzburger, D.	7	3		311	Hickmann, J. M.	8	3		242
Guenzburger, D.	7	3		192	Hickmann, J. M.	8	1	02	240
Gueuvoghlianian, E. P.	7	3		94	Hickmann, J. M.	7	1	02	232
Guevara, J. A.	9	3		78	Hillberg, M.	9	1	10 (Palace)	214
Guilarducci, A.	9	2	05	23	Hillberg, M.	9	1	10 (Palace)	214
Guimaraes Neto, J. M.	9	3		179	Hillhorst, H. J.	8	3		115
Guimaraes Neto, J. M.	7	3		261	Hipolito, O.	8	3		300
Guimaraes, A. P.	9	3		224	Hipolito, O.	7	3		291
Guimaraes, A. P.	9	3		161	Hipolito, O.	8	3		300
Guimaraes, A. P.	9	3		225	Hoenicke, G. L.	8	3		105
Guimaraes, A. P.	9	3		225	Hollauer, G.	9	1	04	326

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Homar, L. I. B.	8	3	75	Japiassu, G. M.	8	3	211
Homem, M. G. P.	8	3	18	Jardim, R. de F.	8	3	319
Hornos, J. E. M.	7	1	05	5	Jardim, R. de F.	7	3	310
Hornos, J. E. M.	7	1	05	5	Jardim, R. de F.	7	1	04	307
Hornos, Y. M. M.	7	1	05	5	Jardim, R. F.	7	3	310
Horowicz, R.	9	2	02	250	Jardim, R. F.	8	1	04	317
Horowicz, R.	9	2	02	249	Jardim, R. F.	7	1	04	307
Horowicz, R.	9	3	252	Jardim, R. F.	7	3	191
Horowicz, R.	9	3	252	Jardim, R. F.	7	3	313
Horowicz, R.	9	1	05	20	Jardim, R. F.	8	2	04	318
Horsch, P.	9	3	131	Jauhainen, J.	9	2	05	23
Hoyos, F. J. de	9	3	229	Javorsky, C. de S.	7	3	169
Hummel, D. C. A.	7	1	14	66	Javorsky, C. de S.	7	3	150
Iamamoto, Y.	8	3	42	Jeronymo, J. M. F.	9	3	353
Iamamoto, Y.	8	1	03	38	Jesus, A. de	9	3	162
Iannarella, L.	9	3	225	Jesus, M. do C. A. N. V.	8	3	175
Iannarella, L.	9	2	09	219	Jesus, V. L. B.	9	3	161
Iga, I.	8	3	18	Jesus, W. D. P. de	8	3	43
Iglesias, J. R.	7	2	12	85	Jonen, S.	7	3	192
Iglesias, J. R.	9	3	123	Jordao, J. A. R.	7	3	169
Iglesias, J. R.	7	2	10 (Palace)	185	Joshi, H. C.	8	1	04	315
Iikawa, F.	8	3	301	Josiek, A.	7	3	292
Imaizumi, M.	8	3	205	Jr, A. P.	9	3	352
Imaizumi, M.	7	3	188	Juliani, L. P.	7	3	259
Imaizumi, M.	8	3	205	Juliao, J. F.	9	3	64
Imasato, H.	8	3	45	Jungermann, J.	8	1	09	200
Imasato, H.	8	3	45	Junior, E. F. S.	7	1	04	307
Imasato, H.	8	2	03	40	Jurelo, A. R.	8	3	324
Inamassu, R. Y.	9	2	01	158	Jurelo, A. R.	8	1	04	316
Inamasu, R.	9	2	01	158	Jyh, T. I.	8	3	114
Inamasu, R. Y.	7	2	01	147	Kabos, P.	9	2	10 (Palace)	215
Ioriatti Jr, L.	8	1	13	295	Kaga, H.	8	3	209
Ippen, E. P.	8	4	13	360	Kaiser, R.	9	3	252
Isikawa, Y.	7	3	192	Kaiser, R.	9	3	26
Isikawa, Y.	9	1	10 (Palace)	214	Kakar, S.	8	3	17
Isotani, S.	9	2	01	159	Kakar, S.	9	4	13	363
Isotani, S.	9	3	351	Kalbitzer, S.	7	3	8
Ito-Landers, K. M.	8	1	08	55	Kanashiro, L. S.	9	3	181
Ito, A. S.	8	3	40	Kanashiro, L. S.	7	2	07	166
Ito, A. S.	8	3	41	Kanashiro, L. S.	9	3	181
Ito, A. S.	9	3	47	Kanashiro, L. S.	7	3	152
Ito, A. S.	9	3	49	Kanda, D. H. F.	7	3	261
Ito, A. S.	9	3	50	Kaxiras, E.	9	3	131
Itri, R.	9	3	77	Keller, W. A.	9	3	79
Itri, R.	7	1	14	66	Keune, W.	9	2	06	348
Iwanowski, P. G.	7	3	198	Keune, W.	8	2	09	203
Izzo, D.	8	3	267	Keune, W.	9	1	06	347
Jacchieri, S.	9	3	50	Keune, W.	8	1	09	200
Jackson, R. A.	8	2	08	57	Khoury, A. Z.	7	3	234
Jackson, R. A.	8	2	08	56	Khoury, A. Z.	9	1	02	248
Jackson, R. A.	8	4	02	358	Kim, C.	9	3	225
Jalbert, G.	7	3	9	Kiminami, C. S.	7	3	200
Jalbert, G.	8	3	14	Kim, J. I.	9	3	129
Jalbert, G.	7	3	9	Kinouchi, O.	7	3	95
Jalbert, G.	8	3	14	Kinouchi, O.	7	2	12	84
Jamet, J. P.	8	2	09	202	Kinouchi, O.	8	3	106

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Kinouchi, O.	7	3	95	Lagos, R. E.	7	3	190
Kirilyuk, A.	8	2	09	202	Lagos, R. E.	7	2	10 (Palace)	186
Kirtman, B.	7	2	11 (Palace)	258	Laks, B.	8	3	205
Kirtman, B.	7	1	05	6	Laks, B.	7	3	188
Kiss, F. A. G.	9	3	27	Laks, B.	8	3	205
Kist, T. B. L.	7	3	234	Laks, B.	8	3	270
Kitano, C.	8	2	01	156	Laks, B.	7	3	197
Kivimaki, A.	9	2	05	23	Lamy-Freund, M. T.	8	3	40
Kiwi, M.	7	3	190	Lamy-Freund, M. T.	8	3	40
Klatt, C.	7	3	8	Lancarotte, M. S.	9	3	220
Klauss, H. H.	9	1	10 (Palace)	214	Landau, D.	9	2	10 (Palace)	218
Klauss, H. H.	9	1	10 (Palace)	214	Landers, R.	7	2	06	330
Klautau, A.	7	2	06	329	Landers, R.	7	3	333
Klautau, A. B.	9	3	222	Landers, R.	7	2	06	329
Kleemann, W.	7	1	09	183	Landers, R.	8	1	08	55
Kleiman, G. G.	7	2	06	330	Laper, F. V.	7	1	05	5
Kleiman, G. G.	7	3	333	Lara, D. P.	7	3	87
Kleiman, G. G.	7	2	06	329	Lara, D. P.	7	3	88
Kleinke, M.	9	2	06	349	Lara, M. C. F. L. E.	8	3	43
Kleinke, M. U.	8	3	107	Lara, M. C. F. L. E.	9	3	142
Klenke, J.	9	1	10 (Palace)	214	Lara, M. C. F. L. E.	9	3	143
Knobel, M.	9	2	09	215	Larica, C.	9	3	224
Knobel, M.	9	2	09	218	Larica, C.	9	3	224
Knobel, M.	7	1	14	66	Lariucci, C.	8	3	75
Koide, K.	9	3	353	Las, W. C.	8	2	07	174
Kokshenev, V. B.	9	3	121	Latge, A.	7	3	293
Kokshenev, V. B.	7	3	94	Latge, A.	9	3	230
Kokshenev, V. B.	9	3	129	Lattermann, G.	7	3	10
Kokshenev, V. B.	9	3	129	Laureto, E.	8	2	13	297
Kokshenev, V. B.	7	3	168	Laureto, E.	8	3	302
Kokshenev, V. B.	7	3	168	Lavras, L. C. M.	7	3	311
Kolobov, M.	9	1	02	248	Lavras, L. C. M.	9	3	350
Konzen, F.	7	2	09	186	Leao, G. de C.	9	3	351
Kopelevich, Y.	8	3	319	Leao, S.	8	3	300
Korenko, H.	7	3	32	Leao, S. A.	7	3	291
Kosterlitz, J. M.	7	4	12	358	Leao, S. A.	7	3	291
Koutstaal, K. W. M.	7	2	06	331	Lebeyec, Y.	9	3	353
Kou, X. C.	9	3	220	Lee, M. J. G.	8	3	321
Kou, X. C.	9	3	222	Lee, M. T.	8	3	18
Krause, J. C.	8	3	210	Legoas, S. B.	8	3	209
Krause, J. C.	8	3	210	Leitao, U. A.	8	1	02	240
Krebs, G.	8	3	20	Leitao, U. A.	7	2	09	186
Krebs, P. R.	7	3	99	Leite Filho, C. V. D. B.	7	2	05	7
Kremer, G. M.	7	3	86	Leite, A. B.	7	1	04	306
Kremers, M.	9	3	80	Leite, A. B.	7	1	04	307
Kretly, L. C.	8	1	08	56	Leite, C. A. P.	9	1	08	271
Kroin, T.	8	3	19	Leite, E.	8	3	321
Kshir, A. H. S.	9	3	284	Leite, E.	7	1	04	306
Kunzler, J. V.	8	3	324	Leite, E.	7	3	313
Kuratani, N.	9	3	351	Leite, E.	8	3	323
Kuzel, M.	8	3	20	Leite, E.	8	3	323
Lacerda, A.	9	3	219	Leite, J. R.	8	2	13	298
Lacerda, A.	7	3	190	Leite, J. R.	8	1	13	294
Lacerda, M. de M.	8	3	345	Leite, J. R.	8	2	13	297
Lacroix, C.	7	2	10 (Palace)	185	Leite, J. R.	8	3	301
Ladeira, L. O.	9	3	226	Leite, J. R.	8	3	302

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Leite, J. R.	7	3		292	Lima, M. A. P.	8	1	05	12
Leite, J. R.	7	1	13	288	Lima, M. B. S.	7	3		235
Leite, M. A. S.	7	1	07	276	Lima, M. C. A.	7	3		292
Leite, N. F.	8	3		340	Lima, M. S. F. de	8	2	07	175
Leite, N. F.	8	3		341	Lima, N. F.	7	1	03	29
Leite, N. F.	8	3		175	Lima, O. F.	7	3		191
Leite, N. F.	8	3		342	Lima, O. F. de	8	1	04	317
Lemaire, T. J.	7	1	14	67	Lima, O. F. de	8	1	04	316
Lemaire, T. J.	8	1	02	240	Lima, O. F. de	8	3		320
Leme, D. G.	9	3		351	Lima, O. F. de	7	3		312
Lemes, M. R.	7	3		11	Lima, O. F. de	8	3		323
Lemes, M. R.	7	3		11	Lima, O. F. de	7	3		312
Lemos, V.	7	2	07	165	Lima, O. F. de	8	2	04	318
Leon, J. V.	8	3		277	Lima, V. M. F. de	9	3		49
Lepienski, C. M.	7	2	11 (Palace)	259	Lima, W. M.	9	3		353
Lepienski, C. M.	9	2	07	178	Lindquist, L. N.	8	1	01	154
Lerner, E.	9	3		349	Linhares, M. P.	8	3		41
Lerner, E.	7	3		190	Linhares, M. P.	8	3		42
Lerner, E.	9	3		351	Linhares, M. P.	8	3		43
Lesche, B.	8	3		243	Lino, A. T.	8	3		302
Lesche, B.	7	3		238	Lino, J. L. da S.	8	3		15
Levine, A.	8	3		302	Lisba, J. A.	9	3		354
Levin, Y.	7	1	12	83	Lisboa Filho, P. N.	8	3		321
Levin, Y.	7	2	12	83	Lisboa Filho, P. N.	7	3		313
Levy, F.	9	2	05	23	Lisboa Filho, P. N.	8	3		323
Li-Kao, J.	7	1	14	67	Litterst, F. J.	9	1	10 (Palace)	214
Libero, V.	9	3		130	Litterst, F. J.	9	1	10 (Palace)	214
Libero, V. L.	8	3		204	Litterst, F. J.	7	3		10
Libero, V. L.	8	3		205	Liu, Y.	9	3		250
Licinio, P.	8	2	12	101	Liu, Y.	9	3		251
Licinio, P.	9	2	11 (Palace)	139	Liu, Y.	7	3		234
Li, M. S.	7	3		293	Liu, Y.	7	3		234
Lima, A. F. de	7	3		236	Livi, R. P.	9	3		272
Lima, A. F. de	7	3		237	Li, X.	7	1	12	83
Lima, C. A. S.	7	3		235	Loefken, O.	8	3		17
Lima, C. J.	9	3		63	Longa, L.	8	1	10 (Palace)	134
Lima, C. R. A.	8	2	02	242	Longa, L.	8	1	10 (Palace)	134
Lima, C. R. A.	8	2	02	242	Longa, L.	9	4	09	360
Lima, E. G.	9	1	05	21	Longo, E.	9	3		78
Lima, I.	8	3		113	Longo, E.	8	3		321
Lima, J. F. de	8	3		60	Longo, E.	7	1	04	306
Lima, J. F. de	9	3		65	Longo, E.	7	3		313
Lima, J. B. de	9	2	03	282	Longo, E.	8	3		323
Lima, J. C. de	7	3		195	Longo, E.	8	3		323
Lima, J. C. de	8	1	07	171	Lopes, F. J. P.	7	3		35
Lima, J. C. de	7	3		170	Lopes, M. de F.	7	3		167
Lima, J. C. de	9	3		230	Lopez-Quintela, M.	8	1	09	202
Lima, J. F. de	8	2	08	57	Lopez, J. V.	8	3		344
Lima, J. F. de	8	3		60	Lorenzo Filho, O.	9	3		255
Lima, J. F. de	8	3		60	Lorenzo Filho, O.	9	1	05	21
Lima, J. P. de	9	2	10 (Palace)	217	Lourenco, A.	7	3		336
Lima, J. P. de	7	3		89	Louro, S. R. W.	8	3		44
Lima, K. A.	7	3		190	Lubyshev, D. I.	8	1	13	294
Lima, M. A. P.	8	3		15	Lubyshev, D. I.	8	3		301
Lima, M. A. P.	7	2	05	8	Lucas, C. A.	8	3		17
Lima, M. A. P.	7	2	05	8	Lucena, L. dos S.	8	1	12	101

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Lucena, L. dos S.	8	3	115	Mammana, A. P.	9	3	49
Lucena, L. dos S.	8	3	116	Mammana, A. P.	8	1	10 (Palace)	134
Luis, G. M. R. de S.	7	3	235	Mammana, A. P.	9	3	143
Luna, F. R. T.	9	2	05	23	Mammana, C. I. Z.	8	3	344
Luna, F. R. T.	9	3	24	Mammana, C. I. Z.	8	3	343
Luna, H. M. R. de	7	3	9	Mammana, C. I. Z.	9	3	49
Lutterbach, L. G. C. P.	7	3	236	Mammaua, V. P.	7	3	334
Luz, D. M.	9	3	133	Mamontov, I. V.	9	2	12	120
Luz, E. M. de S.	9	3	125	Mana, G.	9	3	129
Luzzi, R.	7	3	97	Manganote, E. J. T.	7	2	02	233
Lyra, M. L.	9	1	02	248	Manganote, E. J. T.	9	3	350
Lyra, M. L.	8	3	110	Manghi, F.	9	2	06	349
Lyra, M. L.	8	3	243	Manneville, P.	8	3	107
M. Filho, J.	7	2	08	54	Manoel, E. R.	9	3	63
M. Neto, A. J.	9	3	226	Manor, R.	8	2	13	296
Maali, A.	9	1	02	247	Manta, E.	8	3	73
Macdiarmid, A. G.	7	3	262	Manzoli, J. E.	8	3	300
Macedo, A. M. S.	7	3	91	Manzur, J.	8	3	73
Macedo, L. G.	9	1	11 (Palace)	138	Maple, M. B.	8	1	04	317
Macedo, M. A.	9	3	354	Maple, M. B.	7	1	04	307
Macedo, W. A. de A.	9	2	06	348	Marcassa, L. G.	9	2	02	250
Macedo, W. A. de A.	8	2	09	203	Marcassa, L. G.	9	2	02	249
Machado, A. J. da S.	8	3	319	Marcassa, L. G.	9	2	02	250
Machado, A. J. da S.	7	3	314	Marcassa, L. G.	9	3	253
Machado, E. A. M.	7	3	332	Marcassa, L. G.	9	3	253
Machado, F. L. A.	8	2	09	203	Marcassa, L. G.	9	1	05	20
Machado, F. L. A.	9	3	226	Marchetti, D. H. U.	7	3	89
Machado, F. L. de A.	9	2	09	215	Marchioli, M. A.	9	3	126
Machado, K. D.	8	3	115	Margulis, W.	8	3	243
Machado, L. E.	8	3	16	Margulis, W.	8	3	243
Machado, L. E.	8	3	19	Margulis, W.	7	1	02	231
Machado, L. E.	8	3	19	Mariezcurrena, R.	8	3	73
Magalhaes, A. C. N. de	8	3	109	Mariezcurrena, R.	7	1	14	67
Magalhaes, A. C. N. de	7	3	86	Marinez, L. E. B.	9	3	48
Magalhaes, C. S. de	8	3	343	Marinez, L. E. B.	8	3	269
Magalhaes, C. S. de	9	3	49	Marinho, R. R. T.	9	3	25
Magalhaes, D. V.	9	1	05	21	Marin, P.	9	2	09	215
Magalhaes, M.	9	3	141	Mariotto, G.	8	2	06	338
Magalhaes, N. S. S.	7	3	260	Mariotto, G.	8	2	06	338
Magnani, R.	7	3	166	Mariotto, G.	8	2	07	174
Magnani, R.	7	1	04	306	Mariz, A. M.	8	3	105
Magno, W. C.	9	2	02	249	Mariz, A. M.	8	3	106
Magon, C.	7	1	07	276	Marletta, A.	7	3	149
Magon, C.	9	1	08	271	Marotti, R. E.	7	3	290
Magon, C. J.	9	3	273	Marques, C. M.	8	3	267
Magon, C. J.	7	3	192	Marques, D. C. M.	9	3	230
Magri, R.	9	2	06	349	Marques, F. das C.	8	3	344
Mahajan, S.	8	1	08	55	Marques, G. da C.	7	3	236
Maia Neto, P. A.	9	1	02	248	Marques, G. da C.	7	3	237
Maior, R. S.	7	3	260	Marques, G. E.	8	3	299
Majlis, N.	9	3	127	Martin Neto, L.	9	1	01	156
Makler, S. S.	9	1	13	303	Martin, A. A.	8	3	321
Maldonado, E. P.	7	3	238	Martin, C.	8	3	280
Maltez, R. L.	8	1	07	172	Martinez, G.	9	3	131
Mammana, A. P.	8	3	343	Martinez, G.	9	3	123
Mammana, A. P.	8	3	344	Martins, C. S.	9	3	226

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Martins, E.	9	2	08	62	Mattoso, L. H. C.	7	3		262
Martins, E.	7	1	08	53	Mattoso, L. H. C.	7	3		259
Martins, G. B.	8	3		277	Mattoso, L. H. C.	7	3		262
Martins, G. B.	8	3		322	Mattoso, L. H. C.	9	3		272
Martins, G. O.	8	3		60	Mattoso, L. H. C.	7	3		263
Martins, G. O.	9	3		65	Mattoso, L. H. C.	7	1	11 (Palace)	257
Martins, J. A.	7	3		95	Mattoso, L. H. C.	7	3		263
Martins, J. E. M. P.	9	2	01	159	Mattoso, L. H. C.	7	3		261
Martins, J. V.	9	1	01	158	Mattoso, L. H. C.	7	3		264
Martins, M. D.	8	3		43	Matuo, C. Y.	9	3		142
Martins, M. L.	7	3		98	Mayer, C.	7	3		315
Martins, M. L.	7	3		98	Mazzali, C.	7	1	02	232
Martins, M. L.	7	3		34	Mazzaro, I.	7	2	14	70
Martins, O. G.	7	3		334	Mazzaro, I.	7	2	14	69
Martins, R. B.	8	2	01	155	Mazzocchi, V. L.	7	2	14	68
Marville, V.	9	3		132	Mazzocchi, V. L.	9	3		78
Mascarenhas, S.	7	1	01	145	Mazzoni, M. S. C.	7	1	05	5
Mascarenhas, S.	7	1	01	146	Mcweeny, R.	8	2	05	14
Mascarenhas, Y. P.	9	3		78	Medeiros, J. P. de	9	3		65
Mascarenhas, Y. P.	8	3		43	Medeiros, N. G. F. de	9	3		130
Mascarenhas, Y. P.	8	3		74	Medina, A. N.	9	2	03	282
Mascarenhas, Y. P.	8	1	07	172	Medina, A. N.	9	2	09	216
Mascarenhas, Y. P.	9	3		285	Medrano, R. E.	7	3		150
Mascarenhas, Y. P.	8	3		75	Meekes, H.	9	3		80
Mascarenhas, Y. P.	8	3		75	Meirelles, N. C.	7	1	03	30
Masetti, E.	9	3		179	Meirelles, N. C.	8	1	03	37
Masili, M.	7	1	05	5	Mello, B. de A.	9	3		251
Massalami, M. E.	7	3		312	Mello, D. F. de	8	3		208
Massalami, M. E.	7	1	04	308	Mello, E. B. de	9	3		131
Massalami, M. E.	7	3		193	Mello, E. V. L. de	9	1	04	325
Massalami, M. E.	7	3		312	Mello, L. A. de	7	2	10 (Palace)	186
Massalami, M. E.	7	3		193	Mello, N.	9	3		284
Massalami, M. E.	7	3		194	Mello, N. C.	9	3		274
Massalami, M. E.	8	3		322	Mello, S. V.	9	3		272
Massalami, M. E.	7	3		196	Melo Jr, R. P. de	7	1	02	231
Massalami, M. E.	8	2	04	319	Melo, A. P. de	8	3		60
Massone, C. A.	9	3		24	Melo, C. P. de	7	3		260
Massone, C. A.	7	3		9	Melo, C. P. de	7	2	11 (Palace)	258
Massot, M.	9	3		178	Melo, C. P. de	8	1	11 (Palace)	265
Mastelaro, V.	7	2	07	166	Melo, C. P. de	7	1	05	6
Mastelaro, V. R.	7	1	14	68	Melo, E. G.	7	3		168
Mastrella, C. F.	8	3		58	Melo, F. E. A.	7	2	08	54
Mastro, N. L. D.	8	3		278	Melo, F. E. A.	9	2	08	60
Matias, J. G. N.	9	3		64	Melo, F. E. de A.	8	1	08	56
Matinaga, F. M.	8	3		298	Melo, L. G. C.	8	2	09	203
Matos, J. M. O.	8	3		105	Melo, M. A. C. de	9	1	10 (Palace)	214
Matos, M.	7	3		334	Melo, M. A. C. de	9	1	10 (Palace)	214
Matsuda, K.	8	2	02	241	Melo, O. de	7	3		290
Matsuda, K.	8	2	02	241	Melo, W. de S.	7	2	05	7
Matsumoto, F.	8	2	01	154	Melo, W. L. de B.	7	1	11 (Palace)	257
Matsuoka, M.	9	3		179	Melo, W. L. de B.	7	2	08	54
Matsuoka, M.	9	3		351	Melo, W. S.	7	2	05	6
Mattievich, E.	9	3		219	Melo, W. S.	7	2	05	6
Mattioli, M. P.	9	3		283	Mendes Filho, J.	8	1	08	56
Mattioli, M. P.	9	3		284	Mendes Filho, J.	8	2	08	57
Mattoso, L. H.	9	3		274	Mendes Filho, J.	9	2	08	60
					Mendes Jr, E.	8	3		267

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Mendes, K. C.	9	2	09	215	Miyake, S.	9	3		351
Mendes, K. do C.	9	3		133	Miyao, S.	9	3		143
Mendonca, C.	8	3		279	Miyao, Y.	8	2	06	339
Mendonca, C.	7	3		151	Miyao, Y.	8	3		343
Mendonca, C.	9	3		287	Miyao, Y.	9	3		143
Mendonca, C.	9	2	03	283	Mizrahi, S. S.	9	3		131
Mendonca, C. R.	9	3		253	Mizukami, A.	8	2	02	241
Meneses, E. A.	8	2	13	297	Mocellin, A.	7	3		331
Meneses, E. A.	8	3		302	Mocellin, A.	7	3		336
Menezes, F. S. de	7	3		98	Moehlecke, S.	7	3		310
Menezes, L. S.	8	1	02	239	Moehlecke, S.	8	3		319
Merchancano, S. T. P.	7	3		291	Moehlecke, S.	7	3		311
Mergulhao Jr, C.	7	3		87	Moehlecke, S.	7	3		314
Mergulhao, S.	8	3		344	Moeller, T.	8	3		17
Mesquita, O. N.	8	2	12	101	Mohallem, J. R.	8	2	05	14
Messaddeq, Y.	9	3		253	Mohallem, J. R.	7	3		10
Messaddeq, Y.	8	1	02	239	Mohallem, N. D. S.	8	3		58
Messaddeq, Y.	7	1	07	276	Mokross, B. J.	9	3		182
Messaddeq, Y.	9	3		256	Molinari, E.	8	1	13	296
Mestnik Filho, J.	9	3		80	Mollicone, M. M.	9	2	06	349
Metairon, S.	9	3		78	Momburu, A.	8	3		73
Metran, A.	8	3		75	Momburu, A. W.	7	3		189
Michelin, S. E.	8	3		19	Monceau, P.	9	2	05	23
Micklitz, H.	9	1	04	326	Mondragon, J. C.	7	3		312
Miglio, H. S.	8	3		18	Mondragon, J. C.	7	3		194
Miguel, O. G.	8	3		76	Mondragon, J. C.	8	3		322
Milori, D.	9	1	05	20	Montalvao, R. W.	7	2	01	148
Milori, D. M. B. P.	9	3		252	Monte, A. F. G. do	9	3		255
Milori, D. M. B. P.	9	3		252	Montecchi, M.	9	3		179
Milori, D. M. B. P.	9	3		252	Monteiro, C. A.	8	3		279
Milori, D. M. B. P.	9	3		253	Monteiro, E. C.	7	3		148
Milori, D. M. P.	9	3		253	Monteiro, E. C.	8	2	01	156
Miola, E. J.	9	1	10 (Palace)	213	Montenegro, E.	8	3		18
Mirage, A.	9	2	02	249	Montenegro, E. C.	7	2	05	6
Mirage, A.	9	3		255	Montenegro, E. C.	7	2	05	7
Miranda, J. R. A.	7	3		35	Montenegro, F. C.	7	3		189
Miranda, L. C. B.	7	3		92	Montenegro, F. C.	7	3		190
Miranda, M. G. M.	7	3		195	Montenegro, F. C.	9	2	09	215
Miranda, M. G. M.	7	3		195	Montenegro, F. C.	8	3		280
Miranda, M. G. M.	9	3		352	Monti, G.	8	3		317
Miranda, R. M. N.	9	3		352	Moori, M. K.	8	1	04	33
Miranda, R. M. N.	9	3		352	Moraes Junior, A. V. de	7	3		35
Miskys, C. R.	9	3		64	Moraes, E. R.	7	3		35
Misoguti, L.	8	3		243	Moraes, F.	9	3		122
Misoguti, L.	8	3		253	Moraes, F.	9	3		131
Misoguti, L.	8	3		342	Moraes, F.	8	2	05	14
Missell, F. P.	9	3		220	Moraes, J. N. B. de	9	3		128
Missell, F. P.	9	3		221	Moraes, M. A. B. de	8	3		340
Missell, F. P.	9	3		222	Moraes, M. A. B. de	8	3		341
Missell, F. P.	9	2	09	215	Moraes, M. A. B. de	8	3		342
Missell, F. P.	8	1	09	202	Moraes, M. B. de	9	3		274
Missell, F. P.	9	3		226	Morais, E. de	9	3		228
Missio, E.	8	2	02	242	Morais, J.	8	1	13	295
Mitani, S. E.	9	3		351	Morais, J.	7	3		294
Mitros, C.	7	3		189	Morais, M. A. A. de	9	3		25
Miwa, R. H.	8	2	13	298	Morais, M. M. de	7	3		260
					Morais, P. C.	9	3		142

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Morais, P. C.	9	3	143	Motisque, P.	8	2	13 297
Morais, P. C.	9	1	11 (Palace)	138	Moura, A. P. S. de	7	2	01 147
Morais, P. C. de	9	2	11 (Palace)	138	Moura, J. I. de	9	3	 80
Morais, P. C. de	9	3	142	Moura, M. A. de	8	3	 246
Morato, S. P.	9	2	08 61	Moura, M. C. de	8	1	09 201
Morato, S. P.	8	2	08 57	Mu-Tao, L.	8	3	 16
Morato, S. P.	9	3	63	Mu-Tao, L.	8	3	 19
Morato, S. P.	8	3	58	Mulato, M.	8	3	 340
Morato, S. P.	8	3	58	Mulato, M.	8	3	 342
Moreira, A. G.	8	3	108	Muller, I. L.	8	1	07 172
Moreira, D.	9	3	180	Mundim, K. C.	8	2	10 (Palace)	135
Moreira, E. N.	7	2	08 54	Mundim, K. C.	9	3	 49
Moreira, F. G. B.	8	3	106	Munin, E.	9	3	 251
Moreira, F. G. B.	9	3	122	Munin, E.	7	3	 235
Moreira, F. G. B.	9	2	12 118	Muniz, R. B.	7	3	 188
Moreira, F. G. B.	9	3	122	Muniz, S.	9	3	 253
Moreira, F. M. A.	9	3	274	Muniz, S. R.	9	2	02 250
Moreira, F. M. A.	8	3	321	Muniz, S. R.	9	3	 26
Moreira, F. M. A.	7	1	04 306	Muniz, S. R.	9	1	05 20
Moreira, F. M. A.	7	3	312	Munte, C. E.	9	3	 283
Moreira, F. M. A.	8	3	323	Munte, C. E.	9	3	 283
Moreira, F. M. A.	7	3	312	Muramatsu, M.	8	2	02 241
Moreira, F. M. A.	7	3	313	Muramatsu, M.	8	2	02 241
Moreira, F. M. A.	8	3	323	Murta, L. O.	7	3	 34
Moreira, F. M. A.	8	3	323	Murta, L. O.	7	3	 35
Moreira, J. E.	9	2	08 60	Nader, G.	8	3	 243
Moreira, J. G.	7	3	93	Nagai, E. Y.	9	3	 26
Moreira, J. G.	8	3	104	Nagashima, H. N.	7	3	 261
Moreira, J. G.	8	3	113	Nahorny, J.	9	3	 27
Moreira, J. G.	8	3	108	Nahorny, J.	7	2	05 7
Moreira, L. F.	9	3	219	Nakagaito, A. N.	9	3	 253
Moreira, L. F. E.	9	3	226	Nakagoito, A. N.	8	3	 342
Moreira, M.	7	3	34	Nakamura, O.	9	3	 179
Moreira, M. V. B.	8	3	303	Nakamura, O.	9	3	 180
Moreira, M. V. B.	8	3	298	Nascente, P. A. de P.	7	2	06 330
Moreira, M. V. B.	8	3	299	Nascente, P. A. de P.	7	2	07 165
Moreira, R. L.	7	1	08 53	Nascimento, G. C. do	9	2	03 282
Moreira, R. L.	9	2	08 61	Nascimento, J. F.	9	3	 273
Moreira, S. G. C.	7	2	08 54	Nascimento, M. A. C.	8	1	05 13
Moreira, J. E.	7	2	08 54	Nascimento, O. R.	8	3	 40
Morelhaio, S. L.	8	3	59	Nascimento, O. R.	8	3	 42
Moreno-Gobbi, A. O.	9	2	07 177	Nascimento, O. R.	8	3	 42
Moreno, A. J. D.	9	2	08 60	Nascimento, O. R.	9	3	 283
Moreno, N. O.	7	3	189	Nascimento, O. R.	9	3	 283
Moreno, R. A.	8	3	270	Nascimento, O. R.	9	3	 284
Moreno, Y.	8	3	73	Nascimento, O. R.	8	3	 43
Morgado, W. A. M.	8	3	104	Nascimento, O. R.	8	3	 279
Morgoon, V. N.	7	3	313	Nascimento, V. B.	7	3	 335
Morgoon, V. N.	8	3	324	Natalense, A. P. P.	7	2	05 8
Moscati, G.	8	2	06 339	Naufal Jr, J. K.	7	3	 332
Moscati, G.	9	4	02 361	Nazareno, H. N.	7	3	 310
Moscoso, A. G.	7	3	315	Nazareno, H. N.	8	3	 206
Moshegov, N. T.	8	3	302	Negreira, C. A.	9	3	 182
Mota, R.	9	1	04 326	Negreira, C. A.	7	3	 170
Mota, R. P.	8	1	11 (Palace)	264	Neirotti, J. P.	9	3	 130
Motisque, P.	7	3	290	Nemes, M. C.	9	3	 129

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Nemes, M. C.	9	3		129	Ogata, K.	9	3		351
Neri, J. W.	9	3		255	Ogata, K.	8	2	06	338
Nero, J. D.	8	3		270	Ohmura, Y.	9	1	04	325
Nery, J. G.	8	3		75	Oiwa, N.	9	3		126
Neto, A. L. B.	8	3		346	Oiwa, N. N.	8	3		103
Neto, A. L. B.	8	3		346	Oliva, G.	8	1	14	72
Netto, P. E. A.	9	1	01	158	Olivares, R.	8	3		245
Netto, T. G.	8	2	01	156	Oliveira Jr, O. N.	7	3		259
Neumann, S.	8	1	09	200	Oliveira Jr, O. N.	7	3		262
Neves, A.	8	3		75	Oliveira Jr, O. N.	9	3		272
Neves, M. A.	7	3		312	Oliveira Jr, O. N.	7	3		263
Neves, U. P. da C.	8	2	12	101	Oliveira Jr, O. N.	9	3		350
Neves, U. P. da C.	8	3		110	Oliveira Jr, O. N.	7	3		263
Niarchos, D.	7	3		189	Oliveira Jr, O. N.	7	1	03	30
Nicola, E. M. D.	7	3		36	Oliveira Jr, O. N.	8	3		46
Nicola, E. M. D.	7	3		36	Oliveira, A.	9	3		25
Nicola, J. H.	8	3		341	Oliveira, A. C. de	9	3		25
Nicola, J. H.	7	3		36	Oliveira, A. C. de	7	2	01	148
Nicola, J. H.	7	3		36	Oliveira, A. C. de	8	3		321
Nicolisky, R.	7	3		314	Oliveira, A. C. de	8	3		322
Niehuis, H.	9	2	06	348	Oliveira, A. C. de	8	3		324
Niehuis, H.	9	3		354	Oliveira, A. G. de	8	3		298
Nishimura, K.	7	3		192	Oliveira, A. G. de	8	3		299
Nishimura, K.	9	1	10 (Palace)	214	Oliveira, A. G. de	7	1	13	289
Nobre, E. F.	8	3		206	Oliveira, A. J.	7	2	05	8
Nobre, F. D.	8	3		105	Oliveira, A. J. A. de	7	3		191
Nobre, F. D.	9	3		124	Oliveira, A. J. A. de	9	3		274
Nobre, F. D.	9	3		124	Oliveira, A. L. de	9	1	08	272
Nogueira Jr, E.	9	3		124	Oliveira, A. L. de	8	2	11 (Palace)	266
Nogueira Jr, E.	9	3		124	Oliveira, A. L. de	7	3		33
Nogueira, A. de F.	7	3		293	Oliveira, A. L. de	8	2	11 (Palace)	266
Nogueira, J. C.	8	3		18	Oliveira, A. L. de	8	2	11 (Palace)	267
Nogueira, J. de S.	7	1	11 (Palace)	257	Oliveira, C. E. M. D.	9	3		64
Nogueira, J. de S.	7	2	11 (Palace)	259	Oliveira, C. E. M. de	9	3		64
Nogueira, J. de S.	7	3		264	Oliveira, C. R. M. de	8	3		299
Nogueira, R. N.	7	2	10 (Palace)	187	Oliveira, C. R. M. de	8	1	13	296
Novaes, A. B.	9	1	12	116	Oliveira, E. A.	9	3		140
Novak, M. A.	7	3		191	Oliveira, E. A. de	9	2	11 (Palace)	139
Novak, M. A.	7	3		191	Oliveira, E. A. de	9	3		141
Novak, M. A.	7	1	09	184	Oliveira, E. A. de	9	3		141
Nunes, A. C.	8	3		19	Oliveira, E. N. de	8	3		278
Nunes, E.	9	3		224	Oliveira, F. A.	7	3		331
Nunes, F. D.	8	1	08	56	Oliveira, F. A.	7	3		96
Nunes, F. D.	9	3		253	Oliveira, F. A. de	8	3		105
Nunes, F. D.	8	2	08	57	Oliveira, F. A. de	9	2	12	119
Nunes, F. D.	9	2	08	60	Oliveira, F. A. de	7	3		333
Nunes, L. A. de O.	9	3		253	Oliveira, G. C.	8	3		75
Nunes, L. A. de O.	8	1	13	295	Oliveira, I. G. de	7	3		309
Nunes, L. A. de O.	9	3		161	Oliveira, I. S.	9	3		161
Nunes, L. A. de O.	9	3		285	Oliveira, I. S.	7	3		192
Nunes, L. A. de O.	9	3		286	Oliveira, I. S.	9	1	10 (Palace)	214
Nunes, L. A. O.	9	3		256	Oliveira, J. B.	8	3		302
Nunes, L. O.	7	2	02	234	Oliveira, J. B. B. de	8	2	13	297
Nussenzveig, H. M.	9	1	02	248	Oliveira, J. de	7	3		169
Nussenzveig, P. A.	9	1	02	247	Oliveira, J. E. B.	7	3		148
O'Handley, R. C.	9	3		225	Oliveira, J. E. B.	8	2	01	156

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Oliveira, J. J. de	9	3		80	Pacheco, M. T. T.	8	3		321
Oliveira, J. R. de	8	3		246	Pacheco, M. T. T.	8	2	01	155
Oliveira, L.	7	3		291	Pacheco, M. T. T.	7	3		150
Oliveira, L. de	7	3		293	Pacheco, M. T. T.	7	3		150
Oliveira, L. E.	8	3		300	Pacheco, M. T. T.	9	3		162
Oliveira, L. N.	9	1	08	271	Pacheco, M. T. T.	8	2	01	155
Oliveira, L. S. de	8	1	07	171	Pacobahyba, J. T. M.	9	3		254
Oliveira, L. S. de	7	3		170	Pacobahyba, L. H.	9	2	03	282
Oliveira, M. A. S.	7	2	08	53	Padua, A. de	8	2	05	14
Oliveira, M. C. de	8	3		109	Paduan-Filho, A.	7	2	09	187
Oliveira, M. J. de	9	3		130	Paduan-Filho, A.	9	1	10 (Palace)	213
Oliveira, M. J. de	8	1	12	100	Paduan-Filho, A.	9	1	10 (Palace)	212
Oliveira, M. J. de	9	3		132	Paduani, C.	7	3		195
Oliveira, N. A. de	8	3		210	Paduani, C.	7	3		197
Oliveira, N. A. de	8	3		210	Paduani, C.	8	3		210
Oliveira, N. A. de	8	3		210	Paduani, C.	8	3		210
Oliveira, N. A. de	9	1	10 (Palace)	213	Paduani, C.	8	1	07	171
Oliveira, P. M. C. de	8	3		110	Paduani, C.	8	3		211
Oliveira, P. M. C. de	9	3		133	Paduani, C.	7	3		170
Oliveira, S. M. de	7	2	12	83	Paduani, C.	9	3		230
Oliveira, S. M. M. de	9	3		133	Padua, S.	9	3		251
Oliveira, T. R. de	8	3		343	Padua, S.	7	3		237
Oliveira, V. M. de	8	3		114	Padua, S. de	8	1	02	238
Olzon-Dionysio, M.	7	2	10 (Palace)	187	Padua, S. de	9	1	02	247
Olzon-Dionysio, M.	7	3		192	Paesano Jr, A.	9	3		353
Olzon-Dionysio, M.	9	1	10 (Palace)	213	Pagliuso, P. G.	8	3		322
Onmori, R. K.	7	3		261	Pagliuso, P. J. G.	8	3		319
Onody, R. N.	8	2	12	101	Pagnez, L. E. M.	8	3		107
Onody, R. N.	8	3		110	Pagnon, D.	9	3		27
Onody, R. N.	8	2	12	102	Paiva-Santos, C. de O.	9	3		78
Oppenheim, I. C.	8	1	09	202	Paiva, G. de	7	1	05	5
Oppenheim, P. I.	8	3		104	Paiva, J. A. C. de	8	2	07	173
Oria, M.	7	2	02	233	Paiva, J. A. C. de	8	2	07	173
Oria, M.	9	1	05	21	Paiva, T. C. de L.	7	3		188
Ortiz, W. A.	8	3		207	Paixao, F. J. da	8	3		17
Ortiz, W. A.	7	3		191	Pakter, R.	7	2	02	233
Ortiz, W. A.	9	3		274	Pakter, R.	8	3		106
Ortiz, W. A.	8	3		321	Palacio, F.	7	2	09	187
Ortiz, W. A.	7	1	04	306	Palacio, F.	9	1	10 (Palace)	212
Ortiz, W. A.	7	3		196	Palacio, F.	7	2	09	184
Ortiz, W. A.	7	3		312	Palacio, F.	9	1	10 (Palace)	212
Ortiz, W. A.	8	3		323	Palacios, H. T.	9	3		79
Ortiz, W. A.	7	3		312	Palangana, A. J.	9	1	11 (Palace)	136
Ortiz, W. A.	7	3		313	Palangana, A. J.	9	3		140
Ortiz, W. A.	8	3		323	Palangana, A. J.	9	3		353
Ortiz, W. A.	8	3		323	Palangana, A. J.	8	2	10 (Palace)	135
Osborne, S. J.	9	2	05	23	Palange, E.	8	1	02	239
Oseroff, S.	8	3		277	Palermo, L.	8	3		210
Oseroff, S.	8	3		322	Palermo, L.	8	3		210
Osorio, F. A. P.	8	3		300	Palermo, L.	8	3		210
Ossicini, S.	8	1	13	296	Palma, P. M. L.	7	1	04	307
Ota, A. T.	8	3		41	Panaccione, G.	9	2	06	348
Ouriques, G. R.	9	3		143	Panaccione, G.	8	2	09	203
Ouriques, G. R.	9	3		143	Panepucci, H.	9	3		284
Pacheco, J. G.	9	3		162	Panepucci, H.	9	1	08	271
Pacheco, M. T. T.	8	1	04	315	Panepucci, H.	8	3		278

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Panepucci, H.	9	3	273	Pendl Jr, W.	9	1	10 (Palace)	213
Panepucci, H.	8	2	11 (Palace)	266	Pendl Jr, W.	9	3	228
Panepucci, H.	7	1	11 (Palace)	257	Pendl Junior, W.	9	3	80
Panepucci, H.	7	3	260	Penna, A. F.	9	3	26
Panepucci, H.	9	3	274	Penna, T. J. P.	7	1	12	82
Panepucci, H.	9	1	03	281	Penna, T. J. P.	7	3	94
Panepucci, H. C.	8	3	277	Penna, T. J. P.	7	2	12	83
Paoli, M. A. de	7	3	260	Pepe, I.	9	1	05	22
Papaleo, R. M.	9	3	272	Pereira Filho, M. de S.	7	3	169
Parente, C. B. R.	7	2	14	68	Pereira Junior, J. M.	7	3	293
Parente, C. B. R.	9	3	78	Pereira Neto, J. R.	7	2	11 (Palace)	258
Pariona, M. M.	8	1	07	172	Pereira, A. R.	9	3	128
Pariona, M. M.	7	3	200	Pereira, D.	7	2	02	232
Parra, R.	8	1	11 (Palace)	264	Pereira, D.	9	3	160
Parreira, J. R.	9	3	126	Pereira, D.	7	3	235
Partiti, C. S. de M.	9	3	286	Pereira, D.	7	3	235
Partiti, C. S. de M.	9	3	227	Pereira, D.	7	3	235
Pasa, A. A.	8	1	07	171	Pereira, E. C.	9	3	274
Pasa, A. A.	7	3	170	Pereira, J. A. A. M.	9	3	224
Paschoal, C. W. de A.	9	1	05	21	Pereira, J. A. M.	9	3	353
Pascoal, H.	7	3	151	Pereira, J. S.	8	2	01	154
Pascoal, H. B.	8	3	279	Pereira, L. A. A.	7	3	314
Pascoal, H. B.	9	3	287	Pereira, L. G.	9	2	09	215
Pascoal, H. B.	9	2	03	283	Pereira, L. G.	8	1	09	201
Pascual, M. F.	7	3	90	Pereira, L. G.	8	1	09	201
Pascual, M. F.	7	3	91	Pereira, R. B.	8	3	19
Pascutti, P. G.	8	3	41	Pereyra, I.	8	3	176
Pascutti, P. G.	9	3	49	Pereyra, I.	8	3	176
Passamani, E. C.	9	3	227	Perez, J. F.	7	3	89
Passamani, E. C.	9	3	353	Perez, J. L. J.	7	3	235
Passos, A. C.	8	3	58	Perez, O. A. G.	9	3	162
Passos, W. de A. C.	8	3	323	Persiano, A. I. C.	9	3	226
Passy, R.	8	3	246	Persiano, A. I. C.	8	3	209
Passy, R.	7	1	02	231	Persiano, A. I. C.	9	3	227
Patta, M. A.	9	3	141	Pessoa, L. S.	9	2	02	249
Patton, C. E.	9	2	10 (Palace)	215	Petrick, S.	7	3	167
Paula, A. M. de	8	3	299	Petrilli, H. M.	7	2	10 (Palace)	187
Paula, A. M. de	7	1	02	232	Petrov, D.	8	3	244
Paula, A. M. de	8	1	13	296	Petrov, D.	8	3	244
Paul, D.	9	1	05	22	Petrov, D. V.	7	1	02	232
Paulin Filho, P. I.	7	1	14	68	Petrov, D. V.	7	1	02	231
Pavao, A. C.	8	2	05	14	Pfannes, H.	9	3	227
Pavao, A. C.	7	1	04	307	Pfannes, H. D.	8	3	43
Pavao, S.	9	2	01	158	Pickholz, M.	9	3	180
Pawlicka, A.	9	3	274	Pilla, O.	7	2	07	165
Pawlicka, A.	8	3	279	Pilli, R. A.	8	3	75
Payne, D. N.	7	4	12	356	Pimenta, A. F.	8	1	07	171
Paz, S. M.	9	1	01	157	Pimenta, A. F.	7	3	170
Pedroso, C. B.	9	3	251	Pimenta, M. A.	9	3	76
Peduto, P. R.	7	2	06	329	Pimenta, M. A.	7	1	08	53
Peeters, F. M.	8	3	301	Pimenta, M. A.	9	3	273
Peiro, G. P.	8	2	08	57	Pimenta, M. A.	9	2	08	61
Pela, C. A.	7	3	33	Pimenta, M. A.	7	2	08	53
Pela, C. A.	8	2	01	156	Pimenta, M. A.	7	1	08	52
Pelegriani, F.	8	3	277	Pimenta, M. A.	8	2	11 (Palace)	267
Pelegriani, F.	9	2	11 (Palace)	138	Pimentel, L. M.	7	3	12

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Pinatti, D. G.	8	3	320	Pureur, P.	8	3	324
Pinheiro, C. B.	7	1	14	67	Pureur, P.	8	1	04	316
Pinheiro, C. da S.	8	3	268	Pureur, P.	9	3	230
Pinheiro, E.	7	3	334	Pusep, Y. A.	8	1	13	294
Pino Jr, A. D.	7	3	335	Pusep, Y. A.	8	3	301
Pino Junior, A. D.	7	3	11	Pusep, Y. A.	8	3	302
Pino Junior, A. D.	7	3	11	Queiroz, F. C. P. de	9	1	12	116
Pintao, C. A. F.	7	3	199	Quintao, A. D.	7	3	10
Pintao, C. A. F.	7	1	11 (Palace)	257	Quintella, C. da M.	9	3	180
Pintao, C. A. F.	7	1	11 (Palace)	257	Quivy, A.	8	3	302
Pinto, N. M. A. da C. C.	9	3	50	Quivy, A. A.	7	3	332
Pinto, R. D.	8	3	104	Quivy, A. A.	8	2	13	297
Pinto, R. D.	8	3	104	R. Filho, J.	7	2	02	233
Pinto, R. D.	8	3	107	R. Filho, J.	9	3	350
Pinto, R. D.	8	3	107	Rabbani, S.	8	3	279
Pinto, R. D.	8	3	108	Rabbani, S.	7	3	151
Piquini, P. C.	7	3	335	Rabbani, S. R.	8	1	08	55
Pires, A. S. T.	7	3	86	Rabbani, S. R.	8	3	280
Pires, M. A.	8	3	277	Rabbani, S. R.	9	3	286
Pires, M. A.	8	3	278	Rabbani, S. R.	9	3	287
Piro, O. E.	8	3	76	Rabbani, S. R.	9	2	03	283
Pissas, M.	7	3	189	Rabello, L. M.	9	2	01	160
Pitanga, P. C. G. L.	8	2	10 (Palace)	135	Rabelo, J. N. T.	7	2	06	330
Pittella, J. E. H.	7	3	34	Ragazzo, C. G.	7	3	89
Pizzolatti, M. G.	8	3	76	Raimond, J.	9	1	02	247
Planas, S. A.	8	1	11 (Palace)	265	Rakennus, K.	8	3	59
Plascak, J. A.	7	3	87	Ramos, A. S.	8	1	04	316
Plascak, J. A.	9	3	122	Ramos, A. Y.	7	1	14	66
Plascak, J. A.	7	3	89	Ramos, J. A. P.	7	3	98
Pompei, R. C.	8	3	345	Rancourt, D.	9	3	27
Ponce, F. F.	9	3	161	Rangel, E. C.	8	3	340
Pontes, J.	9	3	180	Rangel, E. C.	8	3	341
Pontes, R. S.	7	3	263	Rangel, E. C.	8	3	342
Ponti, S.	8	2	10 (Palace)	135	Ranieri, I. M.	8	3	58
Pontuschka, W. M.	9	3	181	Ranieri, I. M.	8	3	58
Pontuschka, W. M.	7	2	07	166	Ranke, P. J. V.	8	3	210
Pontuschka, W. M.	9	3	181	Ranke, P. J. V.	8	3	210
Pontuschka, W. M.	7	3	152	Ranke, P. J. V.	8	3	210
Portezani, P.	9	3	285	Rao, D.	8	3	277
Portezani, P. J.	8	3	74	Raposo, E. C. P.	8	3	269
Porto, A. J. V.	8	1	01	154	Raposo, E. C. P.	7	1	12	82
Posadas, A. N. D.	8	2	12	102	Raposo, M.	8	2	11 (Palace)	266
Povoa, J. M.	7	3	151	Raposo, M.	8	1	11 (Palace)	265
Prado, O. E.	7	3	32	Raposo, M.	7	3	263
Prandi, C.	8	3	73	Rappl, P. H. O.	7	3	290
Prassides, K.	7	3	189	Rappl, P. H. O.	8	2	13	297
Prataviera, G. A.	9	3	131	Rapp, R. E.	9	3	351
Prazeres, G. M. P.	8	3	43	Rasnik, I.	8	3	245
Priante, M. A.	8	1	11 (Palace)	264	Rechenberg, H. R.	9	3	220
Pricels, R.	9	1	05	22	Rechenberg, H. R.	7	3	192
Procopio, J.	9	3	46	Rechenberg, H. R.	7	3	193
Procopio, J.	8	3	44	Rechenberg, H. R.	9	3	227
Prudente, F. V.	8	3	16	Redinz, J. A.	8	3	109
Pudenzi, M. A. A.	8	1	08	55	Reigada, D. C.	8	3	243
Pureur, P.	8	1	04	315	Reis, F. D. A. A.	8	3	110
Pureur, P.	8	1	04	317	Reis, F. D. A. A.	8	3	111

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Reis, F. D. A. A.	8	3	112	Rocha, A. P. G.	7	3	32
Reis, L. M. dos	8	3	113	Rocha, L. F. O.	9	3	132
Reis, L. M. dos	9	3	48	Rocha, M. S. F. da	8	3	108
Renard, D.	8	2	09	202	Rodrigues Jr, D.	7	3	313
Rettori, C.	8	3	277	Rodrigues Jr, J. J.	9	3	253
Rettori, C.	8	3	319	Rodrigues Junior, D.	8	3	320
Rettori, C.	8	3	278	Rodrigues Junior, D.	7	3	314
Rettori, C.	8	3	322	Rodrigues Junior, J. J.	8	1	08	56
Rettori, O.	7	3	36	Rodrigues Neto, C.	9	1	11 (Palace)	137
Reynoso, V. C. S.	9	3	250	Rodrigues, C. G.	7	3	90
Reynoso, V. C. S.	9	3	251	Rodrigues, C. W.	8	1	13	296
Reynoso, V. C. S.	9	3	64	Rodrigues, J. B.	8	3	175
Rezende, M. de F. S.	8	3	209	Rodrigues, J. de A.	8	1	06	337
Rezende, S.	8	2	09	203	Rodrigues, M. G.	7	2	01	146
Rezende, S.	8	1	09	201	Rodrigues, N. A. S.	7	3	311
Rezende, S. M.	9	2	09	215	Rodrigues, N. A. S.	9	3	255
Rezende, S. M.	8	1	09	201	Rodrigues, N. A. S.	9	3	255
Rezende, S. M.	9	2	10 (Palace)	216	Rodrigues, P. J. C.	7	3	148
Rezende, S. M.	9	3	226	Rodrigues, R. G. de S.	8	2	01	156
Ribas, A. M.	9	3	140	Rodrigues, S. C. P.	8	3	301
Ribeiro, C. A.	9	3	228	Rodrigues, V. A.	7	1	14	68
Ribeiro, C. A.	9	3	229	Rodrigues, W. N.	8	2	13	298
Ribeiro, C. A.	9	3	230	Rodrigues, W. N.	9	2	06	348
Ribeiro, C. T. M.	9	3	253	Rodrigues, W. N.	8	2	09	203
Ribeiro, E.	8	1	13	295	Rodrigues, W. N.	9	2	06	348
Ribeiro, E. M. S.	8	3	16	Rodriguez-Carvajal, J.	9	1	10 (Palace)	212
Ribeiro, P. A.	8	2	11 (Palace)	266	Rodriguez, A. R.	7	3	169
Ribeiro, P. A.	8	1	11 (Palace)	265	Rodriguez, G. J. B.	7	3	195
Ribeiro, P. H. S.	9	3	251	Rodriguez, G. J. B.	7	3	195
Ribeiro, P. H. S.	8	1	02	238	Rodriguez, V. A. P.	9	3	353
Ribeiro, P. H. S.	9	1	02	247	Rojas, J. R.	7	3	310
Ribeiro, P. H. S.	7	3	237	Rojas, R. F. C.	9	3	250
Ribeiro, R. M.	8	3	243	Rojas, R. F. C.	9	3	251
Ricci, T. F.	8	2	12	102	Rojdestvenski, I.	9	1	12	118
Richa, G.	9	3	161	Rojdestvenski, I.	8	3	103
Richomme, F.	8	1	09	200	Rolim, A. L. V.	7	1	04	307
Riera, R.	7	3	92	Rosa Jr, S. G.	9	3	120
Riera, R.	8	3	112	Rosa-Fox, N. de L.	7	1	14	66
Riesz, F.	8	3	59	Rosa, A. L. da	7	3	91
Righi, A.	9	2	08	61	Rosenblatt, J.	8	3	324
Rino, J. P.	8	3	111	Rossi, A. M.	8	3	277
Rino, J. P.	8	3	109	Rossi, A. M.	7	3	167
Rino, J. P.	8	3	109	Rossi, A. M.	8	3	278
Riske, K. A.	8	3	40	Rossi, A. M.	9	3	284
Riul Jr, A.	9	3	272	Rossi, A. M.	9	3	285
Riul Jr, A.	7	3	263	Rossi, A. M.	8	3	280
Riva, R.	9	3	255	Rossi, G.	9	2	06	348
Rivas, J.	8	1	09	202	Rossi, G.	8	2	09	203
Rivera, M. A. F.	8	3	46	Rossignol, M. F.	9	3	220
Rizzato, F.	8	3	107	Rossi, W. de	9	3	351
Rizzato, F. B.	7	2	02	233	Rossler, J.	7	3	190
Rizzato, F. B.	8	3	106	Rotta, R. T.	7	2	01	147
Rizzo, F. C.	7	1	14	68	Roversi, J. A.	7	3	236
Rizzo, P.	7	3	152	Roversi, J. A.	7	3	236
Rocco, M. L. M.	8	3	17	Rovira, P. I.	8	3	342
Rocha Filho, T. M. da	8	3	16	Rubim, J. C.	8	3	341

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Rubo, E. A. A.	7	3		313	Santinho, A. M.	7	3		200
Ruckert, T.	8	1	09	200	Santo, A. M. do E.	9	3		63
Ruggiero Neto, J.	8	3		74	Santos Filho, A. R. G. dos	7	3		237
Russo, L. C.	8	3		58	Santos Jr, D. S.	7	3		260
Saavedra, A.	7	2	07	166	Santos, A. C. F. dos	7	2	05	6
Sacchi, M.	7	2	06	330	Santos, A. C. F. dos	7	2	05	7
Saikawa, T.	8	3		209	Santos, A. D.	9	3		226
Sairanen, O. P.	9	2	05	23	Santos, A. D. dos	8	1	09	201
Saito, M.	8	2	13	298	Santos, A. D. dos	9	3		223
Saitovitch, E. B.	7	3		311	Santos, A. D. dos	8	2	09	203
Saitovitch, E. M. B.	7	3		311	Santos, A. D. dos	9	3		224
Saitovitch, E. M. B.	7	3		192	Santos, A. M. dos	9	3		25
Saitovitch, H.	7	2	14	70	Santos, A. V. dos	9	3		220
Sakamoto, W. K.	7	3		261	Santos, A. V. dos	7	3		190
Sakane, K. K.	9	3		27	Santos, C. A. dos	8	1	06	337
Sakata, W. T.	7	3		148	Santos, C. A. dos	9	3		350
Salazar, D. G. P.	9	3		49	Santos, C. A. M. dos	8	3		319
Salen-Sugui Jr, S.	9	2	09	216	Santos, C. A. M. dos	7	3		310
Salinas, S. R.	9	2	12	118	Santos, D. I. dos	7	3		313
Salinas, S. R. A.	7	3		95	Santos, D. R. dos	7	1	14	66
Salinas, S. R. A.	7	3		88	Santos, F. P.	8	3		20
Salles, E. R.	9	1	11 (Palace)	137	Santos, G. M. dos	9	3		24
Salles, E. R.	9	3		141	Santos, G. M. dos	7	3		9
Salvadori, M. C.	8	3		341	Santos, J. G. dos	8	3		280
Salvadori, M. C.	8	2	06	339	Santos, J. G. dos	9	3		286
Salvadori, M. C.	7	3		334	Santos, J. G. dos	9	3		181
Salva, H.	9	2	05	23	Santos, J. G. dos	7	2	07	166
Samad, R. E.	9	3		251	Santos, J. G. dos	9	3		181
Sampaio, A. J. da C.	8	2	10 (Palace)	136	Santos, J. G. dos	7	3		152
Sampaio, L. C.	7	1	09	184	Santos, J. H. R. dos	7	3		8
Sampaio, L. C.	7	3		197	Santos, J. H. R. dos	7	3		11
Sanches, M. P. R.	8	1	11 (Palace)	265	Santos, L. E. R. dos	7	2	01	148
Sanchez, A.	8	3		73	Santos, M. C. dos	8	3		269
Sanchez, J. F.	9	2	12	119	Santos, N. C.	8	3		75
Sanchez, J. F.	7	3		89	Santos, O. J. dos	9	3		353
Sanchez, J. F.	7	3		90	Santos, P. A. M. dos	8	3		243
Sanchez, J. L.	7	2	09	185	Santos, R. A.	8	3		346
Sanchez, J. P.	8	1	09	200	Santos, R. M. Z. dos	9	1	12	116
Sanchez, M. L.	9	2	09	215	Santos, R. R. dos	7	3		188
Sanchez, M. M.	8	1	11 (Palace)	265	Santos, R. R. dos	9	3		120
Sanchez, R. D.	8	1	09	202	Santos, R. R. dos	9	3		133
Sander, R. B.	9	3		143	Santos, R. R. dos	8	1	12	100
Sander, R. B.	9	3		143	Santos, R. R. dos	7	2	04	309
Sandim, M. J. R.	7	3		310	Santos, S. F. dos	8	3		75
Sangiorgio, C. L.	9	1	08	272	Santos, V. H. F. dos	8	1	07	171
Sangiorgio, C. L.	8	2	11 (Palace)	266	Santos, V. H. F. dos	7	3		170
Sangiorgio, C. L.	8	2	11 (Palace)	267	Santos, W. M. S.	7	3		152
Sanjurjo, J. A.	8	3		321	Sant'anna, M. M.	7	2	05	7
Sanjurjo, J. A.	8	3		322	Sa, P. C. A.	7	1	04	307
Sanjurjo, N. L.	9	3		228	Saraiva, A. M.	9	1	01	157
Sanjurjo, N. L.	9	3		230	Sardella, E.	7	2	04	309
Sanjurjo, N. L.	7	3		170	Sarthour, R.	9	3		161
Sanjurro, A.	9	2	08	60	Sarthour, R.	9	3		225
Sant'Anna, M. M.	7	2	05	6	Sartorelli, J. C.	8	3		104
Santa Ana, M.	9	3		284	Sartorelli, J. C.	8	3		104
Santi, C. E.	9	3		224	Sartorelli, J. C.	8	3		107

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Sartorelli, J. C.	8	3	107	Schreiner, M. A.	9	3	143
Sartorelli, J. C.	8	3	108	Schreiner, W. H.	9	3	352
Sartori, C. S.	7	2	05	8	Schreiner, W. H.	8	1	06	336
Sartori, J.	9	3	161	Schreiner, W. S.	8	1	04	317
Sartori, J. C.	7	2	01	147	Schulz, P.	8	3	301
Sasaki, J. M.	7	2	14	68	Schwab, C.	9	2	02	249
Sasaki, J. M.	8	1	08	56	Scolfaro, L. M. R.	8	1	13	294
Sathaiah, S.	8	1	04	315	Scolfaro, L. M. R.	8	2	13	297
Sathaiah, S.	8	3	321	Scolfaro, L. M. R.	8	3	301
Sato, E. M.	8	3	345	Scolfaro, L. M. R.	8	3	302
Satori, J.	7	2	02	234	Scolfaro, L. M. R.	7	3	292
Sauerwein, R. A.	9	3	132	Scorzelli, R. B.	7	3	311
Saxena, R. N.	9	1	10 (Palace)	213	Scorzelli, R. B.	7	3	167
Saxena, R. N.	9	3	80	Scorzelli, R. B.	7	3	168
Saxena, R. N.	9	3	228	Scorzelli, R. B.	7	3	169
Scalabrin, A.	7	2	02	232	Segundo, P. C. S.	9	1	05	21
Scalabrin, A.	9	3	160	Seiter, M.	9	1	03	281
Scalabrin, A.	7	3	235	Seligman, L.	9	3	354
Scalabrin, A.	7	3	235	Selzer, S.	9	3	127
Scalabrin, A.	7	3	235	Sen, M.	9	3	181
Scalvi, L. V. de A.	7	3	293	Sen, M.	7	2	07	166
Scarminio, J.	8	2	06	339	Sen, M.	9	3	181
Scarminio, J.	9	3	229	Sen, M.	7	3	152
Scarminio, J.	7	3	336	Senna, L. F. de	9	3	355
Scarpato, M. A. F.	9	3	26	Sen, S.	9	2	10 (Palace)	219
Scarpato, M. A. F.	8	3	18	Serra, P.	7	3	93
Scarpato, M. A. F.	9	3	26	Setsuhara, Y.	9	3	351
Schaff, J.	7	3	198	Shapir, Y.	9	3	121
Schaf, J.	8	1	04	316	Shibli, S. M.	9	3	141
Schaf, J.	9	3	230	Shibli, S. M.	9	1	11 (Palace)	137
Schatz, A.	9	2	06	348	Shibli, S. M.	9	3	140
Schatz, A.	8	2	09	203	Shida, C. S.	9	3	47
Schatz, A.	9	1	06	347	Shida, C. S.	7	3	97
Schatz, A.	8	1	09	200	Shirai, T.	8	2	02	241
Scheffer, C. B.	9	3	123	Shukla, M. M.	7	3	199
Scheid, V. H. B.	9	3	25	Shukla, M. M.	8	3	211
Schellhuber, H.	9	1	12	116	Siervo, A. de	7	3	331
Schellhuber, H.	9	3	129	Sigaud, G. M.	8	3	18
Schepke, M.	9	1	10 (Palace)	214	Sigaud, G. M.	7	2	05	6
Scherer, C.	9	2	07	177	Sigaud, G. M.	8	3	20
Scherer, C.	7	3	332	Sigaud, G. M.	7	2	05	7
Scherer, C.	8	2	12	102	Silva Filho, A. C. da	7	3	33
Schikora, D.	7	3	292	Silva Filho, A. C. R. da	9	3	47
Schilling Neto, O. F.	8	1	07	171	Silva Filho, H. F.	8	2	08	57
Schilling Neto, O. F.	7	3	170	Silva Jr, E. F. da	8	3	344
Schilling, O. F.	8	1	04	315	Silva Jr, E. F. da	7	1	02	231
Schiwietz, G.	8	3	18	Silva Neto, O. D. da	9	3	123
Schiwietz, G.	7	3	11	Silva-Jr, E. F. da	7	1	02	232
Schmidt-Kaler, F.	9	1	02	247	Silva, A. C. L.	8	3	58
Schneider, J.	8	3	74	Silva, A. L.	9	1	08	272
Schneider, J. F.	9	3	285	Silva, A. L.	8	2	11 (Palace)	266
Schneider, J. F.	9	3	286	Silva, A. L. V. da C. e	8	1	07	171
Scholz, B.	8	1	09	200	Silva, A. M. M. D.	7	3	169
Schramm, D. U.	8	3	280	Silva, A. M. M. da	7	3	150
Schreiner, M. A.	8	3	344	Silva, A. T. C.	7	3	97
Schreiner, M. A.	9	3	49	Silva, A. V. C. de C. E	8	3	108

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Silva, C. A. . A. da	8	3		206	Silva, S. R. P.	8	3		343
Silva, C. A. P. da	9	3		125	Silva, S. W. da	8	1	13	294
Silva, C. M. da	9	3		221	Silva, S. W. da	8	3		301
Silva, C. R. da	7	3		92	Silva, T. de L.	8	3		116
Silva, C. R. M. da	8	2	01	156	Silva, T. J. da	8	3		104
Silva, C. R. S. da	9	2	07	177	Silva, X. A. da	8	3		208
Silva, C. R. S. da	7	3		332	Silveira Jr, L.	7	3		150
Silva, E. C. F. da	8	2	13	297	Silveira Jr, L.	9	3		162
Silva, E. C. F. da	8	3		302	Silveira, E. F. da	7	3		334
Silva, E. de P. da	9	3		121	Silveira, E. F. da	9	3		353
Silva, E. G. da	7	3		197	Silveira, H. V. da	9	3		132
Silva, E. P. da	9	3		163	Silveira, H. V. da	8	3		109
Silva, E. Z. da	8	3		208	Silveira, M. F. da	7	3		312
Silva, F. C. S. da	9	2	10 (Palace)	216	Silveira, P. M. da	9	2	01	158
Silva, F. L. B. da	8	3		113	Simao, R. A.	9	3		354
Silva, F. W. O. da	9	3		77	Simoes Filho, M.	8	2	10 (Palace)	135
Silva, G. G.	9	3		273	Simoes, A. S. da R.	8	3		106
Silva, G. G.	8	2	11 (Palace)	266	Simon, G.	9	3		350
Silva, G. G.	8	2	11 (Palace)	267	Simon, G.	8	1	06	337
Silva, G. J. da	9	3		143	Sinnecker, E. H. de C. P.	9	3		220
Silva, G. M. E	8	3		268	Sinnecker, E. H. de C. P.	9	3		222
Silva, G. M. e	8	3		268	Sinnecker, J. P.	9	2	09	217
Silva, J. G. M. da	8	3		104	Sinnecker, J. P.	9	3		221
Silva, J. K. L.	9	1	12	117	Sipahi, G. M.	8	1	13	294
Silva, J. K. L.	8	3		108	Siqueira, A. F.	8	3		112
Silva, J. K. L.	8	2	12	101	Siqueira, A. F.	9	3		275
Silva, J. K. L.	7	3		89	Siqueira, A. F.	9	3		125
Silva, L. C. da	8	3		109	Siqueira, A. F.	9	3		126
Silva, L. da	8	3		103	Siqueira, A. F.	8	3		59
Silva, L. R. da	8	1	12	101	Siqueira, A. F.	8	3		115
Silva, L. R. da	8	3		115	Sirotti, F.	9	2	06	348
Silva, L. R. da	8	3		116	Sirotti, F.	8	2	09	203
Silva, M. A. A.	7	3		290	Skorvanek, I.	9	2	09	219
Silva, M. A. A.	8	2	13	296	Soares Neto, J. J.	8	3		16
Silva, M. A. A. da	7	3		98	Soares Neto, J. J.	8	3		16
Silva, M. A. A. da	9	3		132	Soares Neto, J. J.	8	3		16
Silva, M. A. A. da	8	3		114	Soares, D. M.	7	3		333
Silva, M. A. A. da	8	3		115	Soares, E. A.	7	3		335
Silva, M. A. P. da	9	3		182	Soares, I. M.	9	1	05	22
Silva, M. C. da	7	2	12	84	Soares, J. A. N. T.	8	2	13	298
Silva, M. C. L. da	7	3		92	Soares, K. M.	9	3		50
Silva, M. P. da	9	3		179	Soares, M.	8	1	06	337
Silva, M. R. S. da	7	3		194	Soares, M. R. F.	9	3		350
Silva, M. S. F. da	8	3		205	Soares, M. S.	9	1	12	117
Silva, M. T. O.	8	3		302	Soares, M. S.	8	3		108
Silva, N. C. da	7	3		36	Soares, T. T.	7	3		169
Silva, P. R.	9	1	08	272	Soares, T. T.	7	3		150
Silva, P. R. J.	9	3		219	Sobral, L. A. C.	9	3		65
Silva, P. R. J.	7	2	14	70	Sobral, R. R.	8	3		208
Silva, P. S. da	9	3		254	Soila, R. G.	8	3		42
Silva, R. A. da	9	3		273	Sokal, A. D.	9	3		129
Silva, R. B. da	7	3		150	Soler, M. A. G.	8	3		345
Silva, R. B. da	9	3		162	Solomon, I.	8	2	06	339
Silva, R. C. da	7	3		332	Soltz, D.	9	2	06	349
Silva, R. M. da	8	2	11 (Palace)	267	Sombra, A. S. B.	8	2	07	173
Silva, S. da	9	3		141	Sombra, A. S. B.	8	2	07	173

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Sombra, A. S. B.	7	2	07	165	Stone, N. J.	9	1	10 (Palace)	214
Sombra, A. S. B.	9	3		182	Stosic, B.	9	2	12	119
Sordo, J.	8	3		73	Stosic, T.	9	2	12	119
Sosman, L. P.	9	3		254	Strecker, K.	8	3		319
Souche, Y.	8	2	09	203	Stroud, D.	8	1	04	317
Sousa, A. de O.	8	3		112	Studart, N.	8	3		301
Sousa, A. de O.	9	3		126	Studart, N.	8	3		109
Sousa, A. de O.	8	3		115	Studart, N.	9	3		132
Sousa, E. S. de	8	3		105	Studart, N.	8	3		109
Sousa, J. R. de	9	3		124	Stultz, R. D.	7	3		238
Sousa, K. M. O. de	8	3		44	Suarez, N.	7	2	09	185
Sousa, M. H.	9	1	11 (Palace)	138	Suescun, L.	8	3		73
Sousa, S. J. de F. e	7	3		149	Suguio, K.	9	3		179
Souto, S.	9	3		178	Sulpice, A.	7	3		312
Souza, A. J. F. de	9	3		122	Sulpice, A.	7	3		193
Souza, A. L. de	7	3		168	Sulpice, A.	7	3		194
Souza, A. M. C. de	7	3		93	Sundqvist, B. U. R.	9	3		272
Souza, A. M. C. de	9	3		47	Surdutovich, G.	9	1	05	21
Souza, A. R. de	8	3		113	Surdutovich, G.	7	3		331
Souza, C. F. de	8	1	08	55	Surdutovich, G. I.	7	2	07	165
Souza, D. do N.	8	3		60	Suzuki, P. A.	7	3		310
Souza, E. R. de	9	3		50	Suzuki, P. A.	7	1	04	307
Souza, G. G. B. de	8	3		17	Suzuki, P. A.	7	3		310
Souza, J. R.	8	3		244	Suzuki, P. A.	7	3		191
Souza, J. R.	8	3		245	Svensson, S.	9	2	05	23
Souza, M. A. R.	9	1	13	304	Szeinfeld, R. I. N.	9	3		47
Souza, P. H. de	9	3		273	Tabak, M.	8	3		41
Souza, P. L. de	8	3		303	Tabak, M.	7	1	03	30
Souza, P. L. de	7	1	13	288	Tabak, M.	8	3		45
Souza, R. E. de	9	2	03	282	Tabak, M.	8	3		45
Souza, R. E. de	7	1	07	276	Tabak, M.	8	2	03	40
Souza, R. F. de	7	1	02	232	Tabak, M.	7	1	03	30
Souza, R. R. de	7	3		192	Tabak, M.	8	3		46
Souza, S. D.	7	2	10 (Palace)	187	Tabata, A.	8	2	13	297
Souza, S. D. de	7	3		192	Tabosa, J. W. R.	9	2	02	249
Souza, S. D. de	9	1	10 (Palace)	213	Tabosa, J. W. R.	7	2	02	233
Souza, S. J. de F. E	7	2	01	146	Tabosa, J. W. R.	9	2	02	249
Souza, S. J. de F. E	7	2	01	147	Tabosa, J. W. R.	9	3		255
Souza, T. M. de	8	3		342	Tagliaferri, A. A.	8	3		243
Spagnol, P. D.	8	2	07	174	Takahashi, E. K.	8	3		302
Speziali, N. L.	9	3		76	Takatohi, U. E.	9	3		180
Speziali, N. L.	7	1	14	67	Takeuchi, A. Y.	7	3		194
Spodine, E.	8	3		73	Takeuchi, A. Y.	7	3		194
Stamps, R. L.	8	1	09	200	Tamargo, M. C.	8	1	13	294
Stantero, A.	9	2	09	218	Tamarit, F. A.	8	3		103
Stariolo, D. A.	7	3		93	Tamarit, F. A.	7	3		92
Stariolo, D. A.	7	3		97	Tamarit, F. A.	7	3		93
Stauffer, D.	7	2	12	83	Tamarit, F. A.	7	3		97
Stauffer, D.	9	3		133	Tamashiro, M.	9	2	12	118
Stebani, U.	7	3		10	Tamashiro, M. N.	7	3		95
Stefani, V.	7	3		10	Tamashiro, M. N.	7	3		88
Stein-Barana, A. C. M.	7	3		190	Tamura, E.	9	2	01	159
Stein-Barana, A. C. M.	7	2	10 (Palace)	186	Tannus, A.	8	3		277
Stilck, J. F.	8	3		114	Tannus, A.	8	3		278
Stilck, J. F.	8	3		115	Tapia, E. C. T.	9	3		230
Stoll, R.	7	3		8	Tappert, J.	8	1	09	200

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Tarelho, L. V. G.	8	3		58	Torriani, I. L.	8	3		343
Tarelho, L. V. G.	9	2	08	61	Torriani, I. L.	7	1	14	66
Tarelho, L. V. G.	8	2	08	57	Torriani, I. L.	7	2	14	70
Tatumi, S. H.	9	3		179	Torriani, I. L.	7	1	14	66
Taylor, D. W.	9	3		220	Torriani, I. L.	8	1	14	71
Teixeira, P. C. N.	9	3		76	Tourinho, F. A.	9	2	11 (Palace)	138
Teixeira, S. R.	8	1	09	201	Tourinho, F. A.	9	3		142
Teixeira, S. R.	9	3		353	Tourinho, F. A.	9	3		142
Tejima, H.	7	3		169	Tourinho, F. A.	9	3		143
Tejima, H.	7	3		199	Tourinho, F. A.	9	1	11 (Palace)	138
Teles, L. K.	7	3		292	Touzeau, M.	9	3		27
Telles, E. M.	7	2	02	232	Tragtenberg, M. H. R.	7	3		85
Telles, E. M.	9	3		160	Tragtenberg, M. H. R.	8	3		106
Telles, E. M.	7	3		235	Traina, A. J. M.	7	2	01	148
Telles, E. M.	7	3		235	Trava-Airoldi, V. J.	8	3		340
Telles, G. D.	9	3		272	Trava-Airoldi, V. J.	8	3		341
Telles, G. D.	7	3		263	Trava-Airoldi, V. J.	8	3		342
Tellez, J. C.	7	2	09	185	Tretiakov, N. P.	9	3		130
Tenan, M. A.	9	1	11 (Palace)	137	Tretiakov, N. P.	9	2	12	119
Terra, J.	9	3		27	Tretiakov, N. P.	7	3		89
Terrile, M. C.	9	3		283	Tretiakov, N. P.	7	3		90
Teschke, O.	8	1	08	55	Tretiakov, N. P.	7	3		90
Tessler, L. R.	8	2	06	339	Tretiakov, N. P.	7	2	06	330
Thaocelito, E.	9	1	05	22	Tretiakov, N. P.	7	3		91
Theumann, A.	7	2	12	84	Tribuzy, C. V. B.	9	3		224
Theumann, A.	9	3		127	Tribuzy, C. V. B.	9	3		161
Theumann, A.	7	3		93	Trigueiros, A. G.	9	2	05	23
Theumann, W. K.	7	3		95	Trigueiros, A. G.	9	3		24
Theumann, W. K.	7	2	12	84	Trippe, S. C.	8	3		341
Theumann, W. K.	7	3		99	Troper, A.	8	3		211
Thieghi, L. T.	9	3		140	Troper, A.	9	1	10 (Palace)	213
Thieme, C. L. H.	8	3		320	Trulove, P. C.	9	4	12	362
Tiberto, P.	9	2	09	218	Trzesniak, P.	9	2	08	62
Timm, C. A.	9	3		223	Tsallis, C.	8	1	12	101
Titman, J. M.	7	1	07	276	Tsuda, S.	7	3		290
Toledano, P.	9	2	11 (Palace)	138	Tsu, R.	8	1	13	295
Toledo, A. O. de	9	3		25	Tsu, R.	7	3		294
Tolentino, H.	9	2	01	159	Tuboy, A. M.	9	3		252
Tolentino, H.	7	3		334	Tuboy, A. M.	9	3		252
Tolentino, H.	7	2	06	330	Tuboy, A. M.	9	3		252
Tolentino, H.	7	2	14	70	Tuboy, A. M.	9	3		253
Tome, T.	9	1	12	117	Tuboy, A. M.	9	3		253
Tome, T.	9	1	12	117	Tufaile, A.	8	3		104
Tome, T.	7	3		94	Tufaile, A. P. B.	9	3		223
Tominaga, T. T.	8	3		43	Turchiello, R. de F.	9	2	11 (Palace)	139
Tominaga, T. T.	8	3		45	Turtelli, R. S.	9	2	09	217
Tominaga, T. T.	8	3		45	Turtelli, R. S.	9	3		221
Tominaga, T. T.	8	2	03	40	Tuyarot, D. E.	9	1	13	303
Toropov, A. I.	8	3		302	Udron, D.	7	2	14	69
Torre Neto, A.	9	2	01	158	Urbano, A.	9	3		229
Torres-Tapia, E. C.	9	3		77	Urenda, P. A. V.	8	3		277
Torres-Tapia, E. C.	9	3		226	V-Sivakov, A.	7	3		313
Torres, B. C. M.	7	3		190	Valadares, E. C.	8	3		298
Torresi, R. M.	7	3		260	Valadares, E. C.	8	3		299
Torriani, I.	8	3		322	Valarelli, J. V.	9	3		219
Torriani, I. L.	7	3		310	Valcanover, J. A.	7	3		195

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Valcanover, J. A.	9	3		230	Vieira Jr, N. D.	7	1	08	53
Valente, G. C.	8	3		58	Vieira Jr, N. D.	9	2	08	62
Valerio, M. E. G.	8	2	08	57	Vieira Junior, N. D.	9	3		251
Valerio, M. E. G.	8	3		60	Vieira Junior, N. D.	7	3		238
Valerio, M. E. G.	8	3		60	Vieira, A. C. I.	9	3		123
Valerio, M. E. G.	8	3		60	Vieira, A. de P.	9	3		125
Valerio, M. E. G.	9	3		65	Vieira, C. A.	9	3		26
Vallat, A.	7	4	12	358	Vieira, C. A.	8	3		18
Vanin, V. R.	7	2	10 (Palace)	187	Vieira, C. A.	9	3		26
Vanoni, W.	8	3		322	Vieira, F. de M. C.	7	3		85
Varela, A. T.	9	3		253	Vieira, F. de M. C.	8	3		111
Varela, J. A.	9	3		78	Vieira, M. da C. de S.	7	3		92
Varela, J. A.	8	2	07	174	Vieira, M. M. F.	9	2	08	62
Varela, J. M.	8	3		73	Vieira, M. M. F.	7	1	08	53
Varriale, M. C.	9	3		127	Vieira, V.	7	3		168
Vasconcellos, A. R.	7	3		97	Vieira, V. W. A.	9	3		224
Vasconcellos, E. da C. C.	7	2	02	233	Villani, M. F.	8	1	11 (Palace)	265
Vasconcellos, J. I. C.	8	2	10 (Palace)	136	Villas-Boas, V.	9	3		220
Vasconcellos, M. A. Z.	9	3		350	Villaverde, A. G. J. B.	9	3		251
Vasconcellos, M. A. Z.	7	3		169	Villaverde, A. G. J. B.	7	3		235
Vasconcellos, M. A. Z.	7	3		150	Vinai, F.	9	2	09	218
Vasconcellos, M. A. Z.	9	3		352	Vitlina, R.	9	1	05	21
Vasconcellos, M. A. Z.	9	3		352	Vitlina, R.	7	3		331
Vasconcellos, M. A. Z. de	8	1	06	337	Voiron, J.	7	3		193
Vasconcelos, D. S. de	9	3		79	Vollet, D. R.	9	3		178
Vasconcelos, E. A. de	8	3		344	Vollet, D. R.	9	3		178
Vasilevskiy, M. I.	9	1	13	303	Vugman, N. V.	9	3		285
Vasquez, S.	8	3		343	Vugman, N. V.	7	1	07	276
Vassini, E. J.	8	3		76	Vugman, N. V.	9	3		285
Vazquez, M.	9	2	09	215	Vulliet, P.	8	1	09	200
Vega, L.	8	3		280	Vyas, R.	9	1	02	248
Vencato, I.	8	3		75	Wajnberg, E.	8	3		41
Vencato, I.	8	3		76	Wajnberg, E.	8	3		43
Venegas, P. A.	7	3		196	Wajnberg, E.	8	3		44
Venezuela, P.	7	1	05	5	Wajnberg, E.	8	3		46
Venezuela, P. P. de M.	7	3		292	Walf, G. H.	7	3		10
Ventura, D. R.	9	3		76	Walmsley, L.	9	3		274
Ventura, L.	7	2	01	146	Walmsley, L.	8	3		279
Ventura, L.	7	2	01	147	Ward, R. J.	8	3		74
Venturini, Y. R.	9	3		164	Watanabe, M. M.	8	1	09	202
Verde, E. L.	8	3		279	Watanabe, S.	9	3		179
Verheijen, M. A.	9	3		80	Watanabe, S.	9	3		351
Verheijen, M. A.	7	2	06	331	Watanabe, S.	8	2	06	338
Viana, L.	7	2	02	233	Watanabe, S.	9	3		180
Vianna, R. O.	8	2	05	14	Watanabe, S.	9	3		181
Vianna, R. O.	7	3		10	Watanabe, S.	9	3		181
Vianna, S. S.	9	2	02	249	Watari, K.	7	3		333
Vianna, S. S.	7	2	02	233	Weber, G.	8	2	13	297
Vianna, S. S.	9	2	02	249	Weber, G.	8	3		300
Vianna, S. S.	9	3		255	Weberszpil, J.	7	3		293
Vicentin, F. C.	7	2	06	330	Weid, J. P. V. D.	8	3		246
Vidoto, E. L. G.	9	3		273	Weid, J. P. V. D.	7	1	02	231
Vidoto, E. L. G.	8	2	11 (Palace)	266	Weid, J. P. V. D.	7	1	13	288
Vidoto, E. L. G.	7	3		260	Weightman, P.	7	1	06	328
Vidoto, E. L. G.	9	3		274	Weinketz, S.	8	3		108
Viegas, A. da C.	9	3		223	Weissmuller, G.	7	1	03	29

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Wellstood, F.	8	4	12	359	Zappa, F.	8	3		15
Westphal, C. H.	7	3		191	Zebende, G. F.	8	3		110
Wiese, G.	9	2	10 (Palace)	215	Zerbetto, S. C.	7	2	02	233
Wilmers, K.	8	1	09	200	Zeri, L. M.	7	2	02	234
Wolfenson, A.	8	3		74	Zhiyao, Z.	9	3		26
Wolfenson, A. E.	7	3		260	Zhiyao, Z.	8	3		18
Wolfenson, A. E.	9	3		285	Zhiyao, Z.	9	3		26
Wolfenson, A. E.	9	3		286	Zhi, Z.	7	3		311
Wolney Filho, W.	8	3		279	Zhi, Z.	7	3		192
Wolney Filho, W.	7	1	07	276	Ziemath, E. C.	9	3		63
Wolney Filho, W.	9	3		284	Zilio, J. W. S. C.	9	2	02	249
Wolney Filho, W.	8	3		279	Zilio, S. C.	9	3		253
Xavier Junior, I. de M.	8	2	05	14	Zilio, S. C.	8	1	08	56
Xavier, J. C.	7	3		88	Zilio, S. C.	9	3		251
Xavier, W. S.	9	3		227	Zilio, S. C.	9	2	02	250
Xia, S.	7	1	14	68	Zilio, S. C.	9	3		252
Yakushi, K.	8	1	04	315	Zilio, S. C.	9	2	02	250
Yakushi, K.	8	3		321	Zilio, S. C.	9	3		252
Yavich, B.	8	3		303	Zilio, S. C.	9	3		252
Yavich, B.	7	1	13	288	Zilio, S. C.	9	3		253
Ying, S. C.	8	3		113	Zilio, S. C.	9	1	05	20
Ying, S. C.	7	3		95	Zilio, S. C.	8	2	08	57
Yokaichiya, F.	9	3		163	Zink, L. R.	7	2	02	233
Yokoi, C. S. O.	7	3		87	Zubov, V. I.	9	2	12	119
Yonamine, T.	8	1	09	201	Zubov, V. I.	7	3		89
Yukimitu, K.	9	3		161	Zubov, V. I.	7	3		90
Yunes, R. A.	8	3		76	Zubov, V. I.	7	3		90
Yushmanov, V. E.	8	2	03	40	Zubov, V. I.	7	2	06	330
Zacharias, C. R.	7	3		11	Zubov, V. I.	7	3		90
Zaghete, M. A.	9	3		78	Zubov, V. I.	7	3		91
Zaghete, M. A.	8	2	07	174	Zubov, V. I.	9	2	12	120
Zanchet, D.	7	3		334	Zucchi, M. do R.	9	3		283
Zangaro, R. A.	8	1	04	315	Zucolotto, V.	7	3		262
Zangaro, R. A.	8	3		321	Zukerman-Schpector, J.	8	3		73
Zangaro, R. A.	7	3		150	Zukoski, A.	8	3		212
Zangaro, R. A.	8	2	01	155	Zuriaga, M.	8	3		280
Zangaro, R. A.	9	3		162	Zuriaga, M. J.	9	3		286
Zanon, R. A. de S.	7	3		33					
Zanotto, E. D.	9	3		63					

ERRATA

- Por falha de impressão, no livro de resumos do XVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, página 39, o resumo abaixo foi omitido:

TRANSFERÊNCIA DE ENERGIA E DETERMINAÇÃO DE DISTÂNCIAS INTRAMOLECULARES EM PEPTÍDEOS

A. S. Ito

Instituto de Física da USP

J. R. Chagas, L. Juliano

Escola Paulista de Medicina

Experimentos de supressão de fluorescência foram realizados para a determinação de distâncias intramoleculares em peptídeos da família das bradicininas, as quais atuam como vaso dilatadores na regulação da pressão arterial. Foram sintetizados peptídeos com diversos comprimentos, contendo de 6 a 13 amino-ácidos, aos quais foram ligados, no terminal amina, o fluoróforo o-amino benzoil (Abz) e, no terminal carboxila, o supressor N-(2,4-dinitrofenil) etilenodiamina (EDDnP). A fluorescência do Abz é suprimida pela EDDnP por processos de transferência de energia de fluorescência e a eficiência da supressão foi medida para os diversos peptídeos. Usando o formalismo de Forster para transferência de excitação, determinamos a distância entre os grupos Abz e EDDnP nos peptídeos, supondo que a mesma não variou durante o tempo de vida do estado excitado da Abz. Obtivemos valores no intervalo de 18Å a 25Å, observando que a distância não cresce linearmente com o número de amino-ácidos, devido à estrutura secundária dos peptídeos. Os resultados sugerem a ocorrência de dobramentos em posições específicas na seqüência de amino-ácidos dos peptídeos, relevantes para a formação de conformações adequadas à interação com enzimas proteolíticas.

- Por falha de impressão, no livro de resumos do XVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, página 49, o resumo abaixo foi omitido:

MODELAGEM MOLECULAR DE PROTEÍNAS POR HOMOLOGIA - ALGUNS EXEMPLOS E APLICAÇÕES

Richard Garratt, Glaucius Oliva, Ezequiel Panepucci, João Alexandre Barbosa,
Alexandre Delben & Rodrigo Neves

*Grupo de Cristalografia, Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, C.P. 369, São Carlos,
13560-970, SP.*

Sem qualquer dúvida as técnicas experimentais que têm revelado os detalhes atômicos da estrutura tridimensional de proteínas têm sido central para o nosso conhecimento atual da função de tais moléculas. A técnica de difração de raios-X por monocristais de proteínas tem sido fundamental neste aspecto. Porém, freqüentemente a própria cristalização e a produção de derivados de átomos pesados representam pontos de estrangulamentos no processo da determinação de uma estrutura. Este problema é aparentemente acentuado quando comparamos o crescimento do número de estruturas tridimensionais determinadas com a verdadeira revolução no sequenciamento de cDNA e por conseqüência o número de estruturas primárias conhecidas. Essa revolução é responsável pelo fato que atualmente conhecemos aproximadamente 50 vezes mais seqüências do que estruturas. Porém essa desigualdade é menos severa do que parece porque muitas das seqüências são homólogas de proteínas cujas estrutura já foram resolvidas, e portanto adotam conformações parecidas. Essa observação é a justificativa para a modelagem de estruturas baseada em proteínas homólogas de estrutura conhecida. Evidentemente, a modelagem molecular jamais substituirá a determinação de uma estrutura experimentalmente, pois sempre existirá dúvidas a respeito da precisão e validade do modelo. Porém, em compensação, o processo de modelagem é geralmente mais rápido e portanto pode trazer informações valiosas no curto prazo que servem para orientar futuros experimentos. Por isso, no grupo de cristalografia do IFSC trabalhamos tanto com a parte de modelagem quanto na parte experimental paralelamente na maioria dos projetos. Serão discutidos aplicações da modelagem molecular em várias áreas da biologia molecular. Na área da ciência básica a modelagem de enzimas da família de endopeptidases glutamato-específicas foi utilizada para prever a origem da especificidade catalítica. A determinação posterior de uma estrutura cristalográfica demonstrou o sucesso do processo. Na área médica estudos de proteínas de parasitas, tais como a proteína de ligação de ácidos graxos de *Schistosoma* e a enzima gliceraleido-3- fosfato desidrogenase estão sendo utilizados para o desenvolvimento de novas vacinas e planejamento de drogas. Os resultados destes estudos serão utilizados para demonstrar algumas das possíveis aplicações da técnica.

