

**XX** ENCONTRO NACIONAL DE  
FÍSICA DA MATERIA CONDENSADA

# RESUMOS



de 10 a 14 de junho de 1997  
Hotel Gloria  
Caxambu - MG

# XX ENCONTRO NACIONAL DE FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA

## COMISSÃO ORGANIZADORA

### COORDENAÇÃO GERAL

José Roberto Leite (IFUSP)

### COMITÊ REGIONAL

Luiz Carlos Sampaio Lima (CBPF)  
Leonardo Gregory Brunnet (UFRGS)  
Roberto Fernandes Silva Andrade (UFBA)  
Flávio Orlando Plentz Filho (UFMG)

### COMITÊ LOCAL

Antonio Martins Figueiredo Neto (IFUSP)  
Eduardo Abramof (INPE)  
Elisabeth Andreoli de Oliveira (IFUSP)  
Guilherme M.Sipahi (IFUSP)  
José Roberto Leite (IFUSP) - **Coordenador**  
Luiza Maria Ribeiro Scolfaro (IFUSP)  
Marco Aurelio Pinheiro Lima (IF-UNICAMP)  
Said R.Rabbani (IFUSP)  
Valmir Chitta (UFSCar)

### COMITÊ DE PROGRAMA

Amando Siuiti Ito (IFUSP)  
Antonio Carlos Hernandez (IFSC/USP)  
Armando Lopes de Oliveira (UFMG)  
Edson Sardella (UNESP-Bauru)  
Elisabeth Andreoli Oliveira (IFUSP)  
José D'Albuquerque e Castro (UFF)  
Luiz Davidovich (UFRJ) - **Coordenador**  
Roberto Fernandes Silva Andrade (UFBA)  
Sebastião de Pádua (UFMG)  
Sergio Teixeira (UFRGS)  
Sylvio Roberto Accioly Canuto (IFUSP)  
Valmir Chitta (UFSCAR)

## ÍNDICE GERAL DO LIVRO DE RESUMOS

### PALESTRAS PLENÁRIAS

|   |     |
|---|-----|
| <b>TIME-DEPENDENT ELECTRON NUCLEAR DYNAMICS (END)* THEORY</b><br>Y. Ohrn .....  | 39  |
| <b>HIGH RESOLUTION NEUTRON POWDER DIFFRACTION AT A MEDIUM FLUX RESEARCH REACTOR</b><br>William B. Yelon .....             | 181 |
| <b>VORTEX PINNING IN HIGH-TEMPERATURE SUPERCONDUCTORS</b><br>Ernst Helmut Brandt .....                                    | 360 |
| <b>HIGH ENERGY DENSITY BATTERIES, A KEY ISSUE FOR THE FUTURE</b><br>Michel Armand .....                                   | 304 |
| <b>FROM ANDERSON LOCALIZATION TO QUANTUM CHAOS</b><br>Boris Altshuler .....   | 249 |
| <b>HARD X-RAYS SYNCHROTRON RADIATION IMAGING: NEW FEATURES AND RESULTS</b><br>J. Baruchel .....                           | 189 |
| <b>PROPAGATION VERSUS EXTINCTION OF AN EPIDEMIC: A REACTION-DIFFUSION MODEL</b><br>H. J. Hilhorst .....                   | 65  |
| <b>OPTICAL NONLINEARITIES IN LIQUID CRYSTALS</b><br>P. Palffy-Muhoray .....   | 304 |
| <b>FROM THE DYNAMICS AND ENERGETICS OF SURFACE PROCESSES TO THE CONTROL OF CATALYTIC REACTIONS</b><br>David A. King ..... | 370 |
| <b>PROCESSAMENTO DE INFORMAÇÃO NO DUTO OPTICO DA MOSCA</b><br>Roland Koberle .....  | 5   |
| <b>PTHEORY OF THE TWO-CHANNEL KONDO LATTICE</b><br>D. L. Cox .....  | 142 |
| <b>BOSE-EINSTEIN CONDENSATION OF LITHIUM - IT'S NOT JUST ANOTHER CONDENSATE!</b><br>R. G. Hulet .....                     | 409 |

**BIOFÍSICA**

|   |    |
|---|----|
| Biofísica Molecular Experimental .....            | 22 |
| Biofísica Molecular Experimental[P] .....         | 17 |
| Biofísica Molecular Teórica[P] .....              | 6  |
| Biologia Molecular Teórica .....                  | 2  |
| Física Médica e Biologia Experimental .....       | 10 |
| Física Médica e Biologia Experimental[P] .....    | 13 |
| Instrumentação Biomédica e Biomagnetismo .....    | 28 |
| Instrumentação Biomédica e Biomagnetismo[P] ..... | 24 |
| Modelagem de Biomacromoléculas .....              | 1  |
| Simulações e Sistemas Complexos em Biologia ..... | 32 |
| Sistemas Complexos e Redes Neurais[P] .....       | 33 |

**FÍSICA ATÔMICA E MOLECULAR**

|   |        |
|---|--------|
| Colisão com Elétrons e Colisões Lentas .....                | 37     |
| Confinamento de Átomos e Colisões Frias, Íons Pesados ..... | 60     |
| Espectroscopia e Aplicações, Íons Pesados .....             | 56     |
| Física Atômica e Molecular[P] .....                         | 40, 46 |
| Novos Desenvolvimentos .....                                | 54     |
| Novos Modelos Teóricos e Aplicações .....                   | 52     |

**FÍSICA ESTATÍSTICA**

|   |          |
|---|----------|
| Redes Neurais[P] .....                                | 122      |
| Simulações e Sistemas Quânticos / Redes Neurais ..... | 98       |
| Simulações e Sistemas Quânticos[P] .....              | 100      |
| Sistemas Complexos .....                              | 110, 119 |
| Sistemas Complexos[P] .....                           | 113      |
| Sistemas Dinâmicos e Caos .....                       | 63       |
| Sistemas Dinâmicos e Caos[P] .....                    | 66       |
| Transições de Fase e Fenômenos Críticos .....         | 86, 89   |
| Transições de Fase e Fenômenos Críticos[P] .....      | 74, 92   |

**MAGNETISMO E MATERIAIS MAGNÉTICOS**

|  |     |
|--|-----|
| Excitações em Sistemas Magnéticos .....                                | 135 |
| Filmes Finos e Multicamadas Magnéticas .....                           | 164 |
| Filmes Finos e Multicamadas Magnéticas/Sistemas Granulares[P] .....    | 172 |
| Magnetismo e Materiais Magnéticos I .....                              | 124 |
| Magnetismo e Materiais Magnéticos I[P] .....                           | 126 |
| Magnetismo e Materiais Magnéticos II .....                             | 137 |
| Magnetismo e Materiais Magnéticos II[P] .....                          | 144 |
| Magnetismo e Materiais Magnéticos III .....                            | 139 |
| Magnetismo e Materiais Magnéticos III[P] .....                         | 158 |
| Sistemas Diluídos e Relaxação Magnética .....                          | 171 |
| Sistemas Diluídos e Relaxação Magnética/Excitações Magnéticas[P] ..... | 167 |
| Sistemas Granulares .....  | 155 |
| Técnicas de Preparação e Caracterização[P] .....                       | 149 |

**DESENVOLVIMENTO, CARACTERIZAÇÃO E PROPRIEDADES DE MATERIAIS**

|  |     |
|--|-----|
| Estrutura Cristalina/Transição de Fase ..... | 221 |
| Filmes e Metais[P] .....                     | 213 |
| Filmes Finos e Metais .....                  | 191 |
| Instrumentação/Materiais Amorfos .....       | 244 |

|  |     |
|--|-----|
| Materiais Amorfos, Mono e Policristalinos[P] .....                   | 181 |
| Propriedades Ópticas, Estrutura Cristalina e Instrumentação[P] ..... | 206 |
| Propriedades: Ópticas e Elétricas, Acústicas e Térmicas[P] .....     | 196 |
| Propriedades: Ópticas e Elétricas/Defeitos .....                     | 194 |
| Ressonância e Relaxação[P] .....                                     | 236 |
| Teoria .....   | 247 |
| Transições de Fase / Material Monocristalino .....                   | 232 |
| Transições de Fase e Defeitos[P] .....                               | 225 |

### **SEMICONDUCTORES**

|   |     |
|---|-----|
| Crescimento e Caracterização .....  | 249 |
| Crescimento e Caracterização, Defeitos, Superfícies e Interfaces[P] .....             | 254 |
| Dispositivos .....  | 292 |
| Dopagem Planar e Tunelamento Ressonante .....   | 289 |
| Fios e Pontos Quânticos e Estrutura Eletrônica .....                                  | 274 |
| Sistemas Mesoscópicos .....   | 252 |
| Sistemas Mesoscópicos, Dopagem Planar, Tunelamento Ressonante e Dispositivos[P] ..... | 265 |
| Superredes e Poços Quânticos .....  | 277 |
| Superredes, Poços, Fios e Pontos Quânticos[P] .....                                   | 279 |

### **SISTEMAS COMPLEXOS: POLÍMEROS E FLUÍDOS**

|   |          |
|---|----------|
| Caracterização, Aplicações Tecnológicas e RMN em Polímeros .....                            | 334      |
| Controle Molecular em Materiais Poliméricos .....   | 329      |
| Controle Molecular em Materiais Poliméricos[P] .....  | 331      |
| Cristais Líquidos e Polímeros .....   | 322      |
| Cristais Líquidos e Polímeros[P] .....  | 325      |
| Fluídos: Caracterização, Fluídos Magnéticos e Soluções[P] .....                             | 294      |
| Fluídos: Transição de Fase .....  | 319      |
| Mecânica Estatística de Polímeros .....   | 338      |
| Mecânica Estatística de Polímeros[P] .....  | 340      |
| Síntese e Caracterização de Polímeros .....   | 305, 307 |
| Síntese e Caracterização de Polímeros / Aplicações Tecnológicas e RMN de Polímeros[P] ..... | 310      |

### **SUPERCONDUTIVIDADE**

|                                  |               |
|----------------------------------|---------------|
| Experimental - Teoria .....      | 358, 360, 364 |
| Experimental .....               | 346, 354      |
| Experimental[P] .....            | 349           |
| Supercondutividade Teórica ..... | 361           |
| Teoria[P] .....                  | 365           |

### **SUPERFÍCIES E FILMES FINOS**

|  |     |
|--|-----|
| Filmes Finos: Diamante e Materiais Super-Duros .....                           | 383 |
| Filmes Finos: Diamante e Materiais Super-Duros[P] .....                        | 384 |
| Filmes Finos: Produção e Caracterização .....                                  | 395 |
| Filmes Finos: Produção e Caracterização[P] .....                               | 398 |
| Física de Superfícies .....  | 377 |
| Física de Superfícies[P] .....   | 379 |
| Implantação Iônica, Propriedades Mecânicas e Revestimentos Protetores .....    | 370 |
| Implantação Iônica, Propriedades Mecânicas e Revestimentos Protetores[P] ..... | 372 |
| Superfícies: Espectroscopia .....  | 389 |
| Superfícies: Espectroscopia[P] .....   | 392 |

## **ÓPTICA**

|   |          |
|---|----------|
| Espectroscopia Não-Linear em Sistemas Atômicos .....    | 433      |
| Espectroscopia Não-Linear em Sistemas Atômicos[P] ..... | 432      |
| Guias de Ondas e Fibras Ópticas .....                   | 421, 426 |
| Guias de Ondas e Fibras Ópticas[P] .....                | 423      |
| Imagens e Holografia .....                              | 435      |
| Instrumentação Óptica .....                             | 439      |
| Instrumentação Óptica[P] .....                          | 436      |
| Lasers .....  | 428      |
| Lasers[P] .....   | 430      |
| Óptica Não-Linear e Laser .....                         | 403      |
| Óptica Não-Linear[P] .....                              | 406      |
| Óptica Quântica .....                                   | 410, 412 |
| Óptica Quântica[P] .....                                | 414      |

## BIOFÍSICA (Biofísica Molecular Teórica e Modelagem)

### BIOFÍSICA (Modelagem de Biomacromoléculas) – 11/06/97

#### Simulação de espectros eletrônicos de biomacromoléculas.

MICHEL LOOS, AMANDO SIUITI ITO  
Grupo de Biofísica, Instituto de Física, USP  
WLADIA VIVIANI

*Departamento de Bioquímica, Instituto de Química, USP*

As propriedades espectroscópicas das biomacromoléculas tem origem na reorganização eletrônica, por isso estão fora de alcance dos softwares tradicionais de modelagem molecular. Por outro lado, o estudo com os programas tradicionais da química quântica também é impossível, devido ao tamanho das biomacromoléculas. Para viabilizar estudos envolvendo propriedades eletrônicas em sistemas desse tamanho, nós desenvolvemos um método híbrido de computação, CQFF, que se baseia na aproximação do cromóforo localizado, e combina as possibilidades dos dois métodos tradicionais: mecânica molecular por causa do tamanho do sistema e mecânica quântica para uma parte dos elétrons. Dessa forma, torna-se possível fazer uma descrição quântica dos elétrons do cromóforo, enquanto o resto da molécula é descrito de modo clássico como um conjunto de cargas e ligações. Para a computação do espectro eletrônico usamos a metodologia CIS com as parametrizações semi-empíricas CNDO/S ou INDO/S. A coerência desse esquema computacional híbrido com os métodos originais CIS semi-empíricos será comprovada pelo estudo comparativo de um sistema de tamanho compatível com a utilização dos dois tipos de computações. Vamos apresentar alguns aplicações desse esquema computacional para a escolha entre diferentes modelos teóricos da rodopsina humana, por meio da simulação do espectro de absorção desses modelos e sua comparação com dados experimentais.

#### MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS INVESTIGATING THE FOLDING BEHAVIOR OF AN ISOLATED RAGMENT OF BARNASE ADOPTING A $\beta$ -HAIRPIN CONFORMATION IN THE NATIVE STRUCTURE OF THE PROTEIN

MARTINE PRÉVOST  
*Université Libre de Bruxelles*  
ISABELLE ORTMANS  
*Universidade Federal do Rio de Janeiro*

Experimental evidence and theoretical models both suggest that protein folding is initiated within speci-

fic fragments which intermittently adopt conformations close to that found in the protein native structure. These folding initiation sites encompassing short portions of the protein are ideally suited for study in isolation by computational methods aimed at investigating the very early events of folding. We have used Molecular Dynamics (MD) simulations to study the behavior of an isolated protein fragment formed by residues 85 to 102 of barnase that folds into a  $\beta$ -hairpin in the native structure of the protein. Three independent MD simulations of 1.3 to 1.8 ns starting from unfolded conformations of the peptide gradually decreasing temperature. The conformational preferences adopted by the peptide in the course of the simulations were analyzed. Two of the unfolded peptide conformations fold into a hairpin characterized by native and a larger bulk of non-native interactions. Both refolding simulations substantiate the close relationship between inter-strand compactness and hydrogen bonding network involving backbone atoms. Indeed, persistent compactness witnessed by side-chain interactions always occurs concomitantly with the formation of backbone hydrogen bonds. No highly populated conformations generated in a third simulation starting from the most unfolded conformer relative to the native structure are observed. However non-native long-range and medium-range contacts with the aromatic moiety of Trp94 are spotted which are in fair agreement with a former NMR study of a denaturing solution of an isolated barnase fragment encompassing the  $\beta$ -hairpin. The results taken together lend reason to believe that the 85-102 barnase fragment is a strong initiation site for folding.

#### DINÂMICA MOLECULAR DE PEPTÍDEOS COM ATIVIDADE BIOLÓGICA

PEDRO G. PASCUTTI  
*Instituto de Biofísica - UFRJ*  
KLEBER C. MUNDIM  
*Instituto de Física - UFBA*  
AMANDO S. ITO  
*Instituto de Física - USP*  
PAULO M. BISCH  
*Instituto de Biofísica - UFRJ*

O desenvolvimento de técnicas de modelagem e dinâmica molecular está abrindo a perspectiva de um grande avanço na compreensão de processos biológicos em nível atômico-moleccompreensão de processos biológicos em nível atômico e molecular e na proposta de novas estruturas moleculares com elevada eficiência biológica. Estamos desenvolvendo um programa computacional para otimização de geometria e simulação de dinâmica molecular, baseado em um campo de forças clássicas parametrizado. No estágio

atual o programa é aplicável ao estudo de sistemas nos quais o solvente é representado por um contínuo eletrostático, estando em implantação a possibilidade de sua representação molecular explícita. Na aproximação do solvente como um contínuo as interfaces entre o meio aquoso e o interior de uma membrana são representadas por superfícies de descontinuidade dielétrica, tratadas pelo método das "imagens eletrostáticas". Diversos sistemas têm sido estudados, tanto em solvente contínuo como na presença de superfícies de descontinuidade. Foi demonstrado que a distribuição populacional dos rotâmeros do triptofano, bem como suas interconversões conformacionais, são compatíveis com observações experimentais de NMR e fluorescência resolvida no tempo. Frequentemente peptídeos biologicamente ativos não formam estruturas secundárias, ou terciárias, estáveis em solução aquosa. Porém, na interface biológica onde exerce sua funcionalidade, pode ocorrer sua estabilização conformacional, devido as forças que limitam seu movimento nessa região. Na presença da interface água-membrana, observou-se que peptídeos anfífilos estabilizam-se em um mínimo de energia sobre a interface. Em um estudo sobre o hormônio  $\alpha$ -MSH observou-se sua estabilização conformacional em dobra- $\beta$  no interior da membrana. Mostramos que a estabilidade dessa conformação é reforçada por pontes salinas entre resíduos aminoácidos carregados, formando um "carço" hidrofílico segregado dos resíduos hidrofóbicos, em um arranjo conformacional concordante com a estrutura biologicamente ativa proposta na literatura.

## BIOFÍSICA (Biologia Molecular Teórica) – 12/06/97

### REPRESENTAÇÃO DOS SINTOMAS MÉDICOS ATRAVÉS DE ONDAS SENOIDAIS AMORTECIDAS.

ROBERTO SILVA, ANTÔNIO CARLOS ROQUE DA SILVA  
*USP - Ribeirão Preto*

O diagnóstico clínico é um ponto importante na instituição de uma conduta terapêutica, pois aumenta as probabilidades de sucesso do tratamento. Um dos fatores que mais dificulta o diagnóstico clínico é a imprecisão inerente à expressão, através de linguagem natural, dos sintomas de um dado paciente. Neste trabalho desenvolvemos uma representação ondulatória de sintomas e sinais, aqui chamados de descritores. Em geral, a queixa de um paciente traz informação sobre o local e a natureza do processo fisiopatológico subjacente. Por exemplo, o sintoma cefaléia implica que o local é

a cabeça e o processo é sensorial, uma dor. Em nossa representação, cada descritor é classificado de acordo com um esquema tri-dimensional cujas dimensões são topografia, intensidade e natureza do processo. Este esquema é usado para construir uma onda senoidal amortecida representando o descritor. A amplitude da onda representa a intensidade do descritor, a frequência representa o local do corpo onde o descritor se manifesta e a constante de amortecimento representa a natureza do descritor. As frequências diminuem no sentido céfalocaudal. A constante de amortecimento é menor para descritores que representam lesões visíveis e bem definidas e maior para descritores que denotem essencialmente alterações sensoriais. Um programa de computador foi desenvolvido para implementar este esquema de representação para um conjunto de 36 doenças e seus 100 descritores mais frequentes. Todas as ondas associadas a um determinado diagnóstico são somadas resultando num padrão complexo que pode ser analisado por um programa de computador. O sistema permite a adição ou a retirada de descritores e a visualização das ondas e dos padrões resultantes das suas somas. Isto torna possível um processamento via técnicas de reconhecimento de padrões, enriquecendo o processo de avaliação do diagnóstico clínico.

### DISTRIBUIÇÃO TÉRMICA EM TECIDOS BIOLÓGICOS SUJEITOS À IRRADIAÇÃO POR LASER.

LANDULFO SILVEIRA JUNIOR, PAULO DAVID DE CASTRO LOBO, FRANCISCO MORAL, MARCOS TADEU T. PACHECO  
*UNIVAP*

A maioria das aplicações da irradiação por Laser em medicina envolve efeitos térmicos. As soluções para o cálculo da distribuição de temperatura em tecidos biológicos sujeitos à irradiação por laser normalmente requerem a introdução de aproximações nas equações que regem o fenômeno, ou o uso de métodos numéricos, pois as soluções analíticas só são possíveis para casos extremamente simples. Numa situação real, o aumento de temperatura pode resultar em desidratação, carbonização e vaporização dos tecidos. Nestas condições, as propriedades térmicas e ópticas do mesmo podem variar. Vários modelos matemáticos tem sido usados para estudar os processos térmicos envolvidos, entretanto a maioria deles são capazes apenas de fornecer estimativas aproximadas, e são limitados ao emprego em aplicações específicas. Mais recentemente, Sagi et al<sup>1</sup> desenvolveram um modelo com a característica de ser flexível o bastante para permitir modificações para várias geometrias e diferentes condições de irradiações. O presente trabalho usa a mesma filosofia e resolve a equação de condução de calor em tecidos biológicos usando a técnica de diferenças finitas. A equação é aplicada para o caso onde uma amostra de tecido co-

ronariano é irradiada com um laser de Ti:safira, com comprimento de onda de 830 nm, e potência aproximada de 120 mW. É usado um termômetro YSI modelo 4000A, com resolução de 0,02°C. A amostra preenche toda a área sensora do termômetro, de aproximadamente 15 mm<sup>2</sup>, e a radiação laser é distribuída por toda a área do tecido. A exposição do tecido à radiação laser ocorre em tempos de exposição desde 1 min a 30 min, viabilizando análises de tempos curtos e tempos longos de exposição. A solução numérica é comparada com a solução analítica para um caso aproximado. Comparações também são feitas com os resultados experimentais para o caso mais realístico em questão. [1] A. Sagi, A. Shitzer, A. Katzir e S. Akselrod, "Heating of Biological Tissue by Laser Irradiation: Theoretical Model", *Optical Engineering*, 31(7), 1417-1424 (1992).

### Transferência de prótons em filmes de Langmuir

VITOR BARBANTI PEREIRA LEITE

*Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos*

AILTON CAVALLI, OSVALDO NOVAIS DE OLIVEIRA JR  
*Depto. Física e Ciência dos Materiais, Instituto de Física de São Carlos - USP*

A transferência de prótons (TP) representa uma classe de reação que desempenha um papel fundamental em química e biologia. Há anos existe uma controvérsia com relação à possível condução protônica ao longo de membranas como aquelas simuladas por filmes de Langmuir de fosfolípidios. Demonstrou-se experimentalmente que a condução nestes filmes só aparece quando as moléculas estão empacotadas acima de uma densidade crítica. Analisamos resultados experimentais usando um modelo simples para a TP em pontes de hidrogênio [1]. Para que a TP ocorra, o intervalo de distância entre oxigênios é de  $R = 2.5 - 2.9 \text{ \AA}$ . Para  $R$  grande ( $> 2.8 \text{ \AA}$ ) a ponte de hidrogênio é considerada fraca, sendo difícil a TP. A parte polar das moléculas anfílicas se arranja em uma rede bidimensional triangular. A área crítica de condutância em filmes de ácidos graxos corresponde a uma distância de  $7 \text{ \AA}$  entre as cabeças polares. Segundo o nosso modelo geométrico simples, esta corresponde a uma distância de  $2.8 \text{ \AA}$  entre os oxigênios aceitador e doador, acima da qual não há formação eficaz de pontes de hidrogênio. Estas pontes fortes de hidrogênio explicam também o aumento drástico do potencial de superfície na área crítica, que está associado à diminuição da constante dielétrica e à organização da água na superfície. Apesar do modelo extremamente simples, a concordância com os resultados experimentais é surpreendente.

CNPq e FAPESP

Bibliografia

[1] P. M. Keifer, V.B.P. Leite e R.M. Whitnell, *Chem. Phys.*, 194, 33-44, 1995.

### ESTUDO DA DIFUSÃO DE RADIAÇÃO LASER EM TECIDOS BIOLÓGICOS POR SIMULAÇÃO DE MONTE CARLO

EGBERTO MUNIN, HASSAN SIDAOU, RENATO AMARO ZÁNGARO, MARCOS TADEU T. PACHECO  
*UNIVAP*

MAURICE DE KONING,  
*UNICAMP*

Neste trabalho utilizamos a técnica de Monte Carlo para estudar difusão de luz em meios turvos de interesse biológico. Foi desenvolvido um programa computacional, escrito em linguagem C. Para um meio espalhador de espessura pré definida, foram obtidas as distribuições espaciais da luz transmitida considerando-se diferentes valores para as constantes de espalhamento  $\mu_s$  e de absorção  $\mu_a$ . Na medida em que o coeficiente de absorção aumenta, observa-se um desfavorecimento na transmissão de fótons que se afastam da direção original do raio laser, com conseqüente diminuição na largura da distribuição espacial da luz transmitida. Estudamos também a dinâmica temporal da luz transmitida para valores diferentes das constantes de espalhamento  $\mu_s$  e de absorção  $\mu_a$ , para o caso de uma excitação óptica ultra rápida, da ordem de 4 picosegundos. Observa-se forte alargamento temporal do pulso para o caso de um meio exclusivamente espalhador, alargamento este que diminui na medida que a absorção do meio é incrementada. Este efeito é explicado com base no fato de que aqueles fótons que permanecem presos em eventos de múltiplos espalhamentos, e que portanto deveriam demorar um tempo maior para atingir o detector, têm menores chances de serem transmitidos pelo meio. O programa pode ser utilizado para extrair parâmetros de interesse em tecidos biológicos.

### Métodos de otimização de geometria via Algoritmo Genético e Recozimento Simulado.

CARLOS RENATO ZACHARIAS  
*UNESP - DFQ - Guaratinguetá*

RICHARD KOCH

*Lund Institute of Technology*

MAURÍCIO RUV LEMES, ARNALDO DAL PINO JR  
*ITA-CTA - São José dos Campos*

A determinação da geometria de moléculas de interesse biológico é fundamental para o estudo de seus mecanismos de ação e, em alguns casos, para o entendimento de sua formação a partir de subunidades menores. Os métodos de otimização da geometria de moléculas e aglomerados devem ser capazes de encontrar a solução correspondente ao extremo global (geometria de menor energia coesiva) no menor tempo possível. Para o estudo de moléculas de interesse biológico, essa tarefa pode ser inviabilizada pela existência de inúmeros extremos locais e pelo tempo

computacional requerido para tal finalidade. Duas técnicas frequentemente usadas são o Recozimento Simulado (SA) e o Algoritmo Genético (GA). O SA é capaz de encontrar a solução correspondente ao extremo global, usando uma estratégia de busca serial, desde que usados os parâmetros iniciais corretos e sem limitação de tempo computacional. O GA converge mais rapidamente, através de uma busca paralela, com baixa dependência dos parâmetros usados, porém, para uma solução próxima ao extremo global. Desenvolvemos, assim, um método híbrido que contempla as vantagens do SA e do GA, ou seja, rápida convergência ao extremo global, com baixa dependência dos parâmetros usados. Testamos o novo método em aglomerados atômicos descritos por um potencial tipo-Lennard-Jones. O método híbrido mostrou-se uma ordem de grandeza mais rápido que os anteriores, sendo praticamente independente dos parâmetros iniciais, mostrando-se potencialmente apto para o estudo de biomoléculas. Além disso, o uso de heurísticas adequadas é capaz de reduzir ainda mais o tempo computacional. Nesse sentido, discutimos as aplicações de nosso método ao estudo da geometria de proteínas e membranas biológicas.

#### DETERMINAÇÃO DE ESTRUTURA DE PEPTÍDEOS POR OTIMIZAÇÃO ESTOCÁSTICA (GSA)

MARCELO MORET

*Instituto de Biofísica - UFRJ Departamento de Ciências Exatas - UFFS*

PEDRO GERALDO PASCUTTI, PAULO MASCARELLO BISCH

*Instituto de Biofísica - UFRJ*

KLEBER CARLOS MUNDIM

*Instituto de Física - UFBA*

Nos últimos anos métodos para a obtenção de conformações estáveis de macromoléculas de interesse biotecnológico vêm sendo desenvolvidos. O problema da determinação de estruturas e enovelamento de proteínas (protein folding) está praticamente em aberto, devido ao elevado número de graus de liberdade e de mínimos de energia locais dessas cadeias polipeptídicas. A utilização do método Dinâmica Molecular para a obtenção de conformações com atividade biológica, partindo de conformações aleatórias dessas macromoléculas é inviável com os recursos computacionais disponíveis atualmente. O tempo característico de uma simulação de dinâmica está na ordem do nanosegundo enquanto o tempo para o enovelamento de proteínas pode passar de minutos. Um dos métodos que fornece indícios para o enovelamento é o Generalized Simulated Annealing (GSA), como apresentamos no encontro passado. Utilizamos nesse trabalho uma estratégia estocástica para estudar a hipersuperfície de potencial e as conformações, em particular as estáveis, de peptídeos em meio aquoso e em membranas. A

obtenção das estruturas e da hipersuperfície de potencial será discutida usando uma nova proposta para a utilização do acoplamento entre o campo clássico THOR com o GSA. Esses peptídeos serão analisados utilizando o diagrama de Ramachandran adaptado ao campo clássico THOR e as geometrias conformacionais serão sorteadas e/ou analisadas pela rotina GSA\_ND até que se obtenha informações sobre a hipersuperfície e as conformações estáveis desses peptídeos inclusive a com o mínimo global de energia. Uma estratégia para a limitação do número de graus de liberdade será a aplicação do método THOR-GSA em peptídeos com ação biológica na interface membrana-água. Essa interface é estabelecida no programa por uma superfície de descontinuidade dielétrica, tratada com o método das imagens eletrostáticas.

#### BIOFÍSICA DAS EUMELANINAS: UM ESTUDO GEOMÉTRICO E ESPECTROSÓPICO

LUZ ELENA BOLÍVAR-MARÍNEZ, DOUGLAS S.

GALVÃO

UNICAMP

MARÍLIA J. CALDAS

USP

As eumelaninas são uma subclasse de pigmentos biológicos que apresentam a fotoproteção, contra a devastação bioquímica produzida pela exposição à radiação solar, como sua função básica. De um modo geral, elas são derivadas da tirosina, 3,4Dihidroxifenilalanina (Dopa) ou 3,4Dihidrofeniletilamina (Dopamina). Exemplos típicos se encontram na pele e cabelos humanos e em alguns tumores malignos de pele. No entanto, a presença de melanina em regiões não iluminadas do corpo, como por exemplo, no cérebro e uma aparente destruição preferencial de células que contém melanina em doenças como o mal de Parkinson, tem levado à especulação de que existem outras funções biológicas associadas com as melaninas além da fotoproteção. Tem sido proposto que as eumelaninas poderiam funcionar como desativadores de radicais livres potencialmente citotóxicos, produzidos ou não por radiação ionizante, através do processo de captura eletrônica. Estruturalmente pouco se conhece sobre as eumelaninas, em parte pode ser devido ao fato de que elas são insolúveis na maioria dos solventes orgânicos e porque está sempre associada com uma matriz protéica bastante sensível à tratamentos com ácidos fortes. Embora a estrutura e caracterização das eumelaninas não possam determinar qual é o monômero constituinte e como estes estão interligados, existem fortes evidências de que a 5,6Indolquinona e suas formas reduzidas, semiquinona e hidroquinona, formam a maior parte do pigmento biologicamente ativo. Neste trabalho temos investigado a estrutura eletrônica dos monômeros e dímeros das eumelaninas, analisando todos os possíveis caminhos de

polimerização baseados na indolquinona e suas formas reduzidas. Os aspectos geométricos e espectroscópicos foram investigados usando os métodos semiempíricos Pm3 (Parametric method 3) e Zindo/S-CI, respectivamente. Nossos resultados indicam que em termos de custo energético de polimerização, estas estruturas não tem uma direção preferencial, sendo ela provavelmente amorfa. Nossos resultados também mostram que estes compostos são aceitadores de elétrons, neste sentido eles poderiam trabalhar como desativadores de radicais livres, como já se tinha proposto. Finalmente, os resultados espectroscópicos mostram um forte suporte do modelo de semicondutor proposto para as eumelaninas.

**ESTUDO DAS CORRELAÇÕES  
ESTRUTURA-ATIVIDADE DE  
COMPOSTOS ANÁLOGOS AO  
TAMOXIFENO E À MITOMICINA-C.**

LARISSA LIMA DO ESPÍRITO SANTO, DOUGLAS  
SOARES GALVÃO

*Instituto de Física Gleb Wataghan - Unicamp*

Determinados compostos estruturalmente relacionados e que possuem uma potente ação hormonal, incluindo tanto efeitos estrogênicos quanto antiestrogênicos, têm se mostrado bastante eficazes no tratamento de algumas displasias. Dentre eles destacamos o tamoxifeno ( $C_{26}H_{29}NO$ ), que é um composto antiestrogênico, da classe dos trifeniletílenos, amplamente utilizado no tratamento do câncer de mama. Vários compostos derivados do tamoxifeno têm sido sintetizados com intuito de se encontrar aqueles com maior atividade biológica

e menores efeitos colaterais. Esses compostos diferem entre si basicamente no que diz respeito à cadeia lateral aminoalquil e aos substituintes na posição 4. As estruturas do tamoxifeno e de seus derivados foram inicialmente otimizadas pelo método de mecânica molecular MM+. Os resultados obtidos foram submetidos a otimização pelos métodos semi-empíricos AM1 e PM3. Comparações do desempenho desses dois métodos foram feitas. Barreiras rotacionais foram estimadas para as espécies cis-tamoxifeno (biologicamente inativa) e trans-tamoxifeno (biologicamente ativa), tanto com AM1 quanto com PM3. Espectros de absorção óptica desses compostos foram obtidos pelo método ZINDO/S. De posse desse conjunto de dados correlacionamos a atividade biológica desses compostos (afinidade de ligação aos receptores de hormônio e antagonismo à calmodulina) com suas diferentes conformações. O mesmo tipo de estudo foi estendido a uma série de compostos análogos à mitomicinaC ( $C_{15}H_{18}N_4O_5$ ), que é um antibiótico com ação anticancerígena, o que nos permitiu chegar as correlações estrutura-atividade também para esses compostos.

**Palestra Convidada – 13/06/97**

**PROCESSAMENTO DE INFORMAÇÃO NO DUTO OPTICO DA MOSCA**

ROLAND KOBERLE

IFSC

No passado recente temos visto uma invasão crescente de áreas de pesquisa em biologia pelas assim chamadas *ciências exatas*, como física, matemática e ciências da computação, evidenciando, que um grande número delas está maduro para uma abordagem mais quantitativa, que é a base do tremendo sucesso das ciências físicas. Isto parece aplicar-se especialmente a Neurociência.

A dificuldade consiste em escolher o preparado biológico mais adequado. Escolhemos a mosca - membro do filo de maior sucesso na terra - por ser muito mais simples, que primatas, mas ainda assim de tremenda complexidade.

A anatomia e os trajetos por onde passa a informação visual da mosca estão relativamente bem estabelecidos. Em particular, os neurônios da *lobula plate* - tres ou quatro sinapses depois do olho composto e por isto correspondendo ao que seria o cortex dos primatas - responsáveis pelo controle e estabilização do vôo, foram todos classificados. Um deles, o neurônio gigante de largo campo H1 é responsável pela integração dos estímulos gerados pela movimentação em torno de um eixo vertical, gera pulsos identicos - com precisão de fração de milisegundos.

Discutimos técnicas teóricas e experimentais para extrair *in vivo* a informação transmitida por este neurônio sobre o mundo exterior. A finalidade dos experimentos é registrar os tempos de chegada dos pulsos identicos gerados por H1. A análise teórica é guiada por princípios de otimização, extremamente atrativos do ponto de vista teórico e bem fundamentados biologicamente.

## BIOFÍSICA (Biofísica Molecular Teórica) – 13/06/97

### CARACTERIZAÇÃO DE UMA DINÂMICA NÃO LINEAR EM RITMOS CARDÍACOS

ANTÔNIO CARLOS DA SILVA FILHO  
FFCLRP - USP

LOURENÇO GALLO JÚNIOR  
FMRP - USP

FÁTIMA MARIA HELENA SIMÕES PEREIRA DA SILVA  
FCFRP - USP

Os Registros cardíacos apresentam flutuações. A questão que se coloca é a de saber se estas flutuações são o resultado de perturbações imprevisíveis ou se são a consequência de uma dinâmica cardíaca associada a um atrator caótico ou, então, a ambos os fatores. A fim de se discriminar entre ruído e caos, lança-se mão de medidas qualitativas (como: análise espectral, função de autocorrelação temporal, reconstrução de espaço de fases) e quantitativas (como: dimensão de correlação, expoentes de Lyapunov e entropia de Kolmogorov-Sinai). As experiências, nesta fase, foram conduzidas com pacientes normais e com portadores de algumas patologias cardíacas. Todos são submetidos a teste de esforço numa bicicleta ergométrica regulada para várias resistências e é registrado o intervalo R-R dos eletrocardiogramas. Os protocolos dos exercícios variam, mas são, essencialmente, divididos em duas classes: esforço contínuo e descontínuo. O objetivo é verificar se existe uma dinâmica não-linear de baixa dimensão no funcionamento do coração e usá-la para distinguir os diferentes estados, ou seja, como método diagnóstico. Como parâmetros a serem medidos selecionamos a dimensão de correlação, a entropia de Kolmogorov-Sinai e os expoentes de Lyapunov. Coletamos séries temporais de onze pacientes, sendo quatro do sexo masculino saudáveis, cinco do sexo feminino saudáveis e dois do sexo masculino com doença pulmonar obstrutiva crônica (DPOC). O principal problema enfrentado neste tipo de trabalho é o da pequena quantidade de pontos experimentais, pois temos, a cada cinco minutos, entre trezentos e seiscentos pontos, o que faz com que, mesmo no caso de protocolo contínuo, com meia hora seguida de exercício, não tenhamos mais do que cinco mil pontos. Apesar disso, obtivemos alguns resultados satisfatórios, que apontam para a possibilidade de se usar os parâmetros acima como método diagnóstico entre indivíduos normais e indivíduos com as patologias citadas.

### ANÁLISE CONFORMACIONAL ESTOCÁSTICA DE INIBIDORES USANDO GENERALIZED SIMULATED ANNEALING

- GSA

MARCELO MORET

Instituto de Biofísica - UFRJ Departamento de Ciências Exatas - UFFS

LAURENT EMMANUEL DARDENNE, PEDRO PASCUTTI, PAULO MASCARELLO BISCH

Instituto de Biofísica - UFRJ

A análise das possíveis conformações preferenciais de moléculas que atuam como inibidores enzimáticos é uma etapa importante para a compreensão dos mecanismos envolvidos nos processos de inibição. Os métodos tradicionais ditos de "força bruta" sejam eles utilizando um campo de força clássico ou cálculos quânticos são bastante custosos computacionalmente e na maioria das vezes inviáveis quando cresce a complexidade da molécula a ser investigada. Deste modo a busca de métodos e metodologias alternativas, de menor custo computacional, constitui-se numa necessidade. Desenvolvemos neste trabalho uma estratégia estocástica para estudar a hipersuperfície de potencial de dois inibidores. O aléido peptídico Leupeptina (Ac-Leu-Leu-arginal) que é um inibidor de várias cisteino-proteases e que tem sido utilizada para investigar o possível papel de proteases na invasão e metástase de células cancerígenas, síntese de proteínas e distrofia muscular. A segunda molécula estudada (Thaps-gargin) é um inibidor específico de ATPase de transporte responsável pela manutenção dos níveis intracelulares de  $Ca^{2+}$ . A estratégia utilizada está baseada no método de otimização de processos Generalized Simulated Annealing (GSA), acoplado a um campo de força clássico (código computacional THOR). Em uma primeira etapa utilizamos o GSA para otimizar os principais diedros das moléculas mantendo as distâncias e ângulos de ligação fixos. Em uma segunda etapa a molécula toda é relaxada utilizando-se o método gradiente (Steepest Descent) tomando-se como ponto de partida os mínimos conformacionais encontrados na etapa anterior, via campo de força clássico. Finalmente utilizando as conformações finais da etapa dois, recalculamos as cargas atômicas dessas conformações, via cálculo quântico (método semi-empírico AM1), no intuito de refinarmos os resultados, obtidos classicamente.

### Modelo de Controle de Memória em canais Iônicos

R. CÁSSIA-MOURA  
*Universidade de Pernambuco*  
 ISAAC DE MELO XAVIER JR  
*UFPE*

A análise da cinética dos canais iônicos é de fundamental importância para o entendimento da fisiologia e dos processos patológicos em seres vivos. Neste trabalho foram analisados 2870 gráficos da corrente iônica em função do tempo, obtidos de medidas feitas em 55 membranas artificiais, com o objetivo de estudar o controle da memória dos canais iônicos formados pela colicina Ia. Verificou-se que a aplicação de pulsos elétricos retangulares com amplitude variando de 50 a 90 mV, produz um aumento exponencial da corrente iônica que atravessa a membrana artificial. Para cada membrana fabricada existe um tempo crítico inferior a 120 s, de resposta aos estímulos produzidos por dois pulsos elétricos intercalados por um período de repouso. Para o caso em que a estimulação ocorre apenas durante o tempo crítico, a corrente iônica medida apresenta um comportamento exponencial simples. Entretanto, no caso da estimulação intercalada por um período de repouso superior ao tempo crítico, a corrente iônica apresenta inicialmente um comportamento exponencial múltiplo, sem especificidade nem proporcionalidade ao estímulo aplicado anteriormente. Como decorrência das condições específicas utilizadas no modelo, pode-se inferir que o comportamento do canal iônico seja uma consequência do efeito de memória do mesmo, fazendo com que a taxa de abertura do canal seja inversamente proporcional ao tempo em que este permaneceu fechado. No entanto, modificando-se estas condições, os canais podem comportar-se de forma completamente independente do ocorrido anteriormente, sem a memória das condições aplicadas no último estímulo.

### Simulações do modelo de rede de cauda dupla e simples utilizando o método de Monte Carlo

CLÁUDIO SABURO SHIDA, VERA BOHOMOLETZ  
 HENRIQUES  
*Instituto de Física - USP*

Membranas modelo e micelas estão entre os principais sistemas utilizados para estudar as membranas biológicas. As membranas biológicas são organizações supramoleculares onde o componente estrutural principal é constituído de moléculas anfífilas de cauda dupla, chamadas de fosfolípidios, que são responsáveis por formarem bicamadas seletivamente permeáveis, requisito essencial para a existência de uma célula e, por consequência, a vida. As micelas são, também, organizações supramoleculares constituídas, em geral, por moléculas anfífilas de uma única cauda, que podem ser detergentes, ácidos graxos ou mesmo fosfolípidios, e formam, a baixas concentrações, estruturas aproxima-

mente esféricas (no caso dos detergentes mais estudados). Os algoritmos utilizados para a simulação baseiam-se no conhecido método de Monte Carlo com probabilidade de Metropolis. As simulações são realizadas num modelo de rede bidimensional para uma solução de moléculas anfífilas em "água". Este trabalho é a continuação daquele apresentado no XIX ENFMC (página 502). O anfílico estilizado é definido como um conjunto de N sítios da rede que estão permanentemente ligados de um modo bem definido (para cauda dupla  $N=11$  e para cauda simples  $N=4$ ). Estes anfílicos apresentam a mesma característica qualitativa de um anfílico real, ou seja, uma região hidrofílica (cabeça polar) e outra hidrofóbica (cauda). O objetivo é estudar a formação de estruturas do tipo membranas e micelas nos dois modelos e, então, comparar as respectivas propriedades no equilíbrio térmico. Resultados obtidos para redes  $L=200$  e  $L=400$  com 100 e 400 anfílicos, respectivamente, mostram que existem diferenças entre os modelos. Diferenças no calor específico e na fração volumétrica, por exemplo, indicam que o processo de agregação do modelo de cauda dupla ocorre numa temperatura menor que o de cauda simples. Este resultado está de acordo, qualitativamente, com dados experimentais.

### EFEITO DE LIGAÇÕES FRACAS (CROSS-LINKS) NA POLIMERIZAÇÃO AUTOCATALÍTICA DE CADEIAS TIPO ARN

LADÁRIO DA SILVA, CONSTANTINO TSALLIS  
*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF)*

Apresentamos simulações computacionais para a polimerização autocatalítica de cadeias auto-replicas tipo ARN, partindo de uma coleção de oligômeros, usando um processo em equilíbrio. Nas simulações estudamos principalmente o efeito de ligações fracas (ligações entre e dentro os polímeros que chamamos "cross-links") no comprimento médio dos polímeros. Iniciamos a simulação em uma rede quadrada cujos vértices ou são ocupados com uma das quatro bases nucleotídicas (A, U, C e G) ou estão vazios. No início todos os dímeros possíveis também estão presentes. As ligações covalentes são formadas ou destruídas respeitando o balanço detalhado e as regras de complementaridade de Crick-Watson. Admitimos que mesmo um monômero pode catalizar a formação e quebra de ligações covalentes de outros oligômeros. Este comportamento catalítico por parte do ARN tem sido verificado experimentalmente para pequenas seqüências de bases presentes no mesmo (Joyce, 1989). As rotinas básicas da simulação são a difusão dos polímeros e a tentativa de formação/quebra de ligações (covalentes e ligações fracas). Cada passo de evolução é caracterizado por uma tentativa de difusão e uma tentativa

de formação/quebra de ligações. Estas operações são repetidas por cerca até 5.000 passos de evolução dependendo do tamanho de rede simulado ( $N = 18, 36$  e  $72$ ). Apresentamos comprimento médio dos polímeros versus passos de evolução e a distribuição dos tamanhos da cadeia no equilíbrio.

Nós mostramos que as ligações fracas (cross-links) favorecem o aparecimento de cadeias maiores e comparamos a nossa distribuição de tamanhos da cadeia com resultados experimentais com os quais se verifica uma boa concordância: conseguimos ajustar uma distribuição de tamanhos experimental (Visscher & Schwartz, 1989) com uma combinação de parâmetros do nosso modelo e a curva do comprimento medio dos polímeros apresenta características similares às descritas em sínteses de oligômeros (Kanavarioti et al, 1990).

### ELECTRICAL FLUCTUATIONS IN COLLOID AND IONIC SOLUTIONS

JOSÉ ANTONIO FORNÉS

UFG

The importance of local fluctuations in biological systems was raised by several authors: Weaver and Astumian (1990) have presented a calculation of the effects of weak fields upon cells. Procopio and Fornés (1995), using the fluctuation-dissipation theorem (FDT), have presented a calculation of the voltage fluctuations across cell membranes. Protonic fluctuations could be the cause of the dielectric increment of proteins in solution (Kirkwood and Shumaker, 1952 and Schwarz, 1972). Also local fluctuations can influence chemical reactions (Astumian and Bier, 1994). Oosawa (1973) has calculated the magnitude of fluctuating voltage and field across different points of an electrolyte solution constituted of puntual ions using the method of the mode expansion. A method is developed here in order to determine the natural electrical thermal fluctuations and its spectral distribution across two points of a solution of ions or spherical charged particles immersed in an ionic solutions. The electrical equivalent between two points of a solution is considered as a capacitor and a resistor in parallel. The method is applied within the Debye-Hückel approximation (linearized Poisson-Boltzmann equation), although it is valid in general. Among the results is the diminution of electrical fluctuations as particle sizes increase; as a consequence, large particles produce electrical stabilization in their neighborhood. It can also be observed that fluctuations are not quite sensitive to ionic concentrations for large particles. When the size of the particles become negligible we obtain similar results with the already obtained using the method of the mode expansion.

### Análise conformacional do ácido galacturônico - um estudo por dinâmica molecular

MURILO TÁPARO, JOSÉ ROBERTO RUGGIERO

Departamento de física - IBILCE - UNESP - S. J. do Rio Preto

Em anos recentes a estrutura e dinâmica de polipéptidos, proteínas e ácido nucleicos tem recebido atenção considerável tanto na forma experimental quanto teórica. A mais abundante das moléculas biológicas, os carboidratos, não tem sido o foco de um estudo intensivo. O objetivo deste trabalho é elucidar o comportamento dinâmico do monômero, dímero e trímero do ácido  $\alpha$ -D-Galacturônico, tendo como conformação de partida a cadeia do tipo carbono 1-4, obtido através do MOPAC, submetido a um determinado campo de força através do estudo por dinâmica molecular usando os programas: THOR e GROMOS. As unidades: monomérica e dimérica foram simuladas com constantes dielétricas 2,0 e 3,5 com a finalidade de verificar a contribuição da força coulombiana na energia potencial e com isso "imitar" em parte o efeito da água. Foram analisados os ângulos torcionais do anel piranosídico e dos grupos exocíclicos no intuito de avaliar tanto a estabilidade da geometria do anel como a formação de pontes de hidrogênio. Para o trímero os mesmos parâmetros foram avaliados, mas somente com constante dielétrica 2,0 devido as complexidades dos cálculos das interações não ligadas acarretando num longo tempo de simulação. Dos resultados obtidos com o trímero verificou-se a não formação de pontes de hidrogênio, indicando a necessidade de novas simulações, pois no dímero ocorreu a formação de pontes de hidrogênio.

### Análise Conformacional de grupos exocíclicos associados ao carbono $C_5$ da $\alpha$ e $\beta$ -D-Glucopiranosose e Oligômeros.

ALEXANDRE TESO, JOSÉ ROBERTO RUGGIERO

UNESP-Rio Preto

Carboidratos representam um dos mais abundantes constituintes do sistema biológicos. Desempenham várias funções como, por exemplo, reservatório energético nas plantas e animais, sendo encontrado também no líquido sinovial das junções onde, provavelmente, atuam como lubrificantes. Presentes na membrana celular atuam como receptores externos. Essa diversidade de funções estão diretamente relacionadas com a diversidade de espécies encontradas na natureza, mas principalmente, com as possíveis conformações desses carboidratos. Estudos recentes tem mostrado a im-

portância da conformação dos grupos exocíclicos da celulose e do aparente desacordo entre os resultados experimentais e teóricos. Neste trabalho propomos um estudo, usando a Dinâmica Molecular (Código Computacional THOR) em um meio com constante dielétrica simulando um contínuo, sobre a influência do grupo exocíclico, associado ao carbono  $C_5$  na estabilidade conformacional de monômeros e dímeros e trimeros da Celulose( $\beta$ -D-Glucopiranosse)(GlcA), Amilose ( $\alpha$ -D-Glucopiranosse) e Amilose C6-Oxidase(C6-Amy). A geometria do resíduo central, obtido a partir dos resul-

tados para o trímero, considera o efeito da interação de resíduos vizinhos na conformação do anel e do grupo exocíclico ligado ao  $C_5$ . Essa geometria, é então usada para o cálculo das propriedades médias(razão característica, comprimento de persistência, e distância entre extremos; que nos permite inferir acerca da importância da conformação do grupo exocíclico na estabilidade dessas cadeias polissacarídicas.

---

## BIOFÍSICA (Física Médica e Biologia Experimental)

### BIOFÍSICA (Física Médica e Biologia Experimental) – 11/06/97

#### ESTUDO EXPERIMENTAL DE ABLAÇÃO EM TECIDOS CORONARIANOS UTILIZANDO RADIAÇÃO UV

SANDRO SILVA FERREIRA PINTO, EGBERTO MUNIN, TEREZINHA DE OLIVEIRA NOGUEIRA, ROSELENE FERNANDES DA ROCHA, MOACYR NOVELLI, RENATO AMARO ZÁNGARO, MARCOS TADEU T. PACHECO  
UNIVAP

Os Estudos de ablação realizados no nosso laboratório utiliza a terceira harmônica de um laser de Nd:YAG, e amostras de coronárias humanas, cedidas pelo In-Cor/SP. Foram observados os efeitos ablativos para diversas sequências de pulsos, procurando se estabelecer o efeito isolado de cada pulso e seu efeito combinado, levando-se em conta a variação de geometria da região atingida e estado de temperatura. A determinação da quantidade de matéria removida em função da densidade de potência entregue ao tecido, é essencial para o estudo da dosimetria de radiação laser a ser aplicada na terapia de doenças cardiovasculares. Técnicas histológicas tem sido frequentemente utilizadas para quantificar o volume de material retirado, volume este que pode ser correlacionado com a massa ablada, e avaliar a eficiência do processo de ablação propriamente dito. Entretanto, a fixação e processamento do tecido para análise microscópica altera o volume do tecido, podendo resultar em erros significativos de medida. O processo de fixação tem diferentes efeitos no volume de diferentes tecidos, com grandes variações de caso a caso e esses efeitos devem ser considerados para se obter uma análise precisa.

#### DETERMINAÇÃO DA CONCENTRAÇÃO DE ANALÍTICOS SANGUÍNEOS UTILIZANDO ESPECTROSCOPIA RAMAN

PAULO R. BARGO, MARCOS TADEU T. PACHECO  
UNIVAP

Neste trabalho é apresentada uma técnica para a determinação da concentração de analíticos do sangue humano, através da utilização da espectroscopia Raman. A determinação da concentração de analíticos do soro humano (sangue desprovido de seus elementos figurados e proteínas coagulantes), tais como, glicose, proteína total, creatinina e uréia, *in vitro* é um primeiro passo para implementação de uma técnica transcútânea de análise sanguínea. Foram utilizadas amostras de soro previamente caracterizadas por técnicas bi-

químicas convencionais. Espectros Raman das amostras foram obtidos com tempo de exposição de 100s. O sistema Raman utilizado tem como fonte de excitação, um laser de Ti:Safira sintonizado em 830nm, bombeado por um laser de Argônio. Diversos dispositivos compõem o sistema tais como: óptica de filtragem do feixe de excitação, posicionador para amostras, óptica de coleção e filtragem do sinal espalhado, detetor do tipo CCD "Deep Depletion" refrigerado por N<sub>2</sub> líquido e microcomputador para o controle do detetor e armazenamento dos espectros. Um algoritmo de PLS (Partial Least Square) foi desenvolvido para realização da análise dos espectros. Este algoritmo permite reconhecer o padrão de um determinado analítico e determinar sua concentração comparando intensidades com espectros de concentração conhecidas. Os resultados mostram que é possível a determinação da concentração de alguns analíticos, com erro dentro de padrões clínicos aceitáveis. A otimização da relação sinal/ruído através da melhoria da óptica de coleta do sinal permite minimizar a margem de erro da técnica, conseqüentemente permitindo a análise de outros analíticos.

#### IMAGENS EM CAMPOS ULTRA-BAIXOS POR RESSONÂNCIA DUPLA ELÉTRON-PRÓTON. EFEITO DA MOBILIDADE MOLECULAR.

PAULO LOUREIRO DE SOUSA, RICARDO EMMANUEL DE SOUZA, MARIO ENGELSBERG, MARCONDES AZEVEDO MATOS

*Departamento de Física, Univ. Federal de Pernambuco, Recife, PE.*

LUIZ A. COLNAGO

*EMBRAPA-CNPDIA, São Carlos, SP.*

Apesar do grande aumento da sensibilidade teoricamente possível mediante a utilização do efeito Overhauser, que torna a técnica denominada PEDRI [1] (Proton-Electron Double Resonance Imaging), bastante atrativa, várias limitações reduzem o ganho disponível na prática, no caso de possíveis aplicações biomédicas. Uma das preocupações é a taxa específica de absorção - SAR (Specific Absorption Rate) -, que aumenta com o quadrado da frequência, ditando um limite superior para a intensidade do campo magnético de aproximadamente 10 militesla para que não seja excedido o limite de deposição de energia de RF ao saturar a ressonância eletrônica. Uma outra preocupação é a concentração necessária de radical livre para um dado aumento de sensibilidade e a toxicidade associada.

Empregamos um sistema de imagens por RMN para corpo inteiro, previamente desenvolvido [2], que opera num campo magnético de 16 militesla, para determinar o aumento possível na relação sinal/ruído em função da

potência de EPR (403 MHz) e da concentração de radical livre (TEMPO) neste valor do campo magnético que permite imagens iniciais com melhor definição. Os experimentos foram realizados utilizando uma bobina de cabeça que também foi utilizada para obter imagens convencionais (sem PEDRI). Uma estimativa realista do potencial desta região de campo magnético deve incluir também o efeito da mobilidade molecular no aumento da sensibilidade. Este aspecto foi estudado detalhadamente, em forma teórica e experimental, utilizando *phantoms* com várias concentrações de radical livre em meios de viscosidade variável. Os resultados permitem estabelecer critérios sobre os tempos de correlação dos movimentos para que a técnica PEDRI permita um aumento substancial na sensibilidade.

1. Lurie, D.J.; Bussel, D.M; Bell, L.H.; Mallard, J.R; *J.Magn.Reson.* **76** , 366 (1988).
2. G.C. do Nascimento, M.Engelsberg and R.E. de Souza, *Meas.Sci.Technol.* **3** , 370 (1992).

#### MAPA DA DISTRIBUIÇÃO DE TEMPERATURA USANDO UM SISTEMA DE BAIXO CAMPO MAGNÉTICO

D. TOMASI, H. PANEPUCCI, E. L. VIDOTO, A. J. G. CONDE

*Universidade de São Paulo, Instituto de Física de São Carlos*

A dependência do tempo de relaxação longitudinal  $T_1$  com a temperatura (que pode ser aproximada por uma relação linear para temperaturas próximas à temperatura ambiente), pode ser aproveitada para produzir um mapa de temperaturas da amostra. Recentes avanços em métodos de termometria não invasiva, tem sido desenvolvidos utilizando tomógrafos de alto campo magnético [1,2]. Este trabalho mostra a dependência do contraste na imagem com a diferença de temperatura entre amostras. As medidas foram feitas utilizando um tomógrafo de baixo campo magnético (550 Gauss) e uma sequência convencional de spin-echo. O phantom utilizado contém duas soluções de  $CuSO_4$  a 1 mM e 2 mM a temperatura ambiente, e outras duas soluções (1 mM e 2 mM) a uma temperatura variável. A perda do sinal devido ao aumento do  $T_1$  com a temperatura faz que as regiões quentes apareçam escuras nas imagens e as frias brilhantes. A sensibilidade do método depende do tecido biológico e pode ser controlada por meio do tempo de repetição  $TR$ , já que é possível obter um contraste linear com a temperatura desde que  $TR \ll T_1$ .

#### Seleção de volumes para Espectroscopia in vivo por RMN em $C^{13}$

BERND FOERSTER

*Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo*

Vamos apresentar experimentos de espectroscopia localizada em carbono  $^{13}C$  obtidos no German Cancer Research Center (Deutsches Krebsforschungszentrum - DKFZ). O propósito da espectroscopia localizada é de adquirir a informação espectral do deslocamento químico de volumes bem definidos em determinadas regiões da amostra. O espectro revela informações sobre processos bioquímicos que ocorrem nas regiões investigadas. Na pesquisa sobre câncer é interessante obter informações sobre o metabolismo de tecidos danificados como por exemplo monitorar o efeito de quimioterapia através dos produtos de decomposição. No caso de câncer cerebral muitas vezes é difícil investigar tais processos de decomposição porque muitas substâncias químicas não passam pela barreira cerebral. Assim surgiu o interesse de estudar o metabolismo de glicose, já que essa é uma molécula suficientemente pequena para passar pela barreira cerebral que é o principal fornecedor de energia e portanto deve acumular e metabolizar mais rapidamente em tecidos cancerígenos. No entanto o estudo do metabolismo da glicose em  $^1H$  é impossível porque os sinais fracos da glicose são sobrepostos por linhas mais fortes, sendo as da lactose e de água. Alternativamente glicose facilmente pode ser observada em espectros de  $C^{13}$ . Levando em conta a baixa sensibilidade de  $C^{13}$  e sua larga faixa de deslocamento químico vamos apresentar três abordagens para obter informação espectral localizada sendo *chemical shift selective imaging*, *chemical shift imaging (CSI)* e *STEAM*. A primeira sofre por baixa relação sinal-ruído (SNR) devido a TE longo, a última por artefatos de localização, achamos assim CSI a técnica a mais indicada para espectroscopia localizada em  $C^{13}$ .

#### CARACTERIZANDO A REGIÃO ÓTIMA DE EQUIPAMENTOS MAMOGRAFICOS POR SIMULAÇÃO DA FUNÇÃO DE TRANSFERÊNCIA DE MODULAÇÃO

HOMERO SCHIABEL, ISAURA N. S. OLIVEIRA, ANNIE

F. FRÈRE

*EESC/USP & IFSC/USP*

PAULO M. AZEVEDO MARQUES

*FMRP/USP*

Em pesquisas anteriores, definimos a Região Ótima do campo de equipamentos de raios-X destinados à mamografia como a faixa do plano imagem onde o sistema apresenta sua melhor performance. Nesse trabalho, investigamos essa região por meio da associação de dois

[1]C. Schwarzbauer et al, *J. Magn. Res.* **B106**, 178-180 (1995) [2]J.A. de Zwart et al, *J. Magn. Res.* **B112**, 86-90 (1996)

métodos de avaliação de sistemas radiográficos que empregam simulação computacional para determinar as funções de transferência de modulação (FTMs) devidas ao ponto focal em diversas orientações e posições do campo. Propomos, desse modo, um método para prever a existência e extensão da Região Ótima, bem como seu significado prático para a nitidez da imagem mamográfica e para a utilização de equipamentos mamográficos não isotrópicos. Para isso, foi feita uma análise comparativa entre os dois modelos de simulação e desenvolvido um procedimento computacional para fornecer resultados quantitativos das avaliações das FTMs. Os resultados das simulações foram comparados com imagens radiográficas de objetos de testes ("phantoms") especialmente elaborados para avaliação de resolução e também com mamogramas reais. A boa concordância entre essas comparações permitiu concluir pela viabilidade em utilizar a simulação computacional da FTM para prever e caracterizar a Região Ótima de equipamentos mamográficos, possibilitando a escolha de faixas do campo pelo radiologista para obtenção de imagens de melhor qualidade.

#### DETERMINAÇÃO DE UM COEFICIENTE DE ATENUAÇÃO EFETIVO E SUA APLICAÇÃO AO ESTUDO DO ESVAZIAMENTO GÁSTRICO

SÉRGIO QUERINO BRUNETTO

*Centro de Engenharia Biomédica, UNICAMP*

*Departamento de Física e Matemática - FFCLRP - USP*

EDUARDO TINOIS DA SILVA

*Centro de Engenharia Biomédica, UNICAMP*

Com a introdução, em 1976, do estudo do esvaziamento gástrico em diabéticos, o uso das técnicas cintilográficas passou a ser largamente empregado na avaliação das alterações funcionais produzidas pelas doenças gastrintestinais. O estudo cintilográfico, estático e dinâmico, permite avaliar a taxa de esvaziamento gástrico (TEG) e associá-la a dinâmica motora do antro gástrico. Entretanto, os resultados dependem do tipo de alimento, da sua composição, das técnicas empregadas na obtenção e processamento das imagens e da correção da atenuação. Neste trabalho, analisaremos a influência do fenômeno da atenuação na quantificação do radiofármaco contido no estômago do paciente. Usualmente, a variação temporal da quantidade de radiofármaco é obtida através da média geométrica das imagens anterior e posterior. Esta técnica não contempla os efeitos devidos a atenuação, mascarando a fase de retenção do alimento logo após a ingestão (*lag-phase*). Utilizando simuladores (*phantoms*) e uma câmara de cintilação de dois detetores, determinamos o coeficiente de atenuação efetivo para o abdome superior:  $0.125\text{cm}^{-1}$ . O algoritmo de correção da atenuação foi aplicado em 10 estudos clínicos. Foram obtidas imagens estáticas simultâneas na incidência anterior e posterior

do abdome superior, por 60 segundos. A primeira foi obtida imediatamente após o término da refeição, sendo que as demais se sucederam a cada 10 minutos até o término do estudo, 100 minutos mais tarde. Aplicou-se o algoritmo de correção da atenuação às imagens e, determinando uma região de interesse (ROI) através da técnica de isocontorno (10%), foi possível quantificar o radiofármaco presente no estomago e estabelecer uma relação funcional para a sua variação temporal. Analisamos também a eficácia do algoritmo de correção da atenuação nas aquisições anteriores e posteriores. Notamos que, ao contrário do resultado obtido com as aquisições anteriores, as imagens posteriores não apresentam a *lag-phase*, sugerindo que a atenuação diferencial produzida pela coluna vertebral deve ser considerada.

#### UTILIZAÇÃO DE UM NOVO MÉTODO DE DETECÇÃO DE CONTORNOS NO ALGORITMO (MÉTODO DAS PROJEÇÕES) DE DETECÇÃO DE MOVIMENTO EM SPECT CEREBRAL

EDUARDO TINOIS DA SILVA

*Centro de Engenharia Biomédica, UNICAMP*

GERMANO PINTO GUEDES

*Departamento de Física e Matemática - FFCLRP - USP*

SÉRGIO QUERINO BRUNETTO

*Centro de Engenharia Biomédica, UNICAMP*

*Departamento de Física e Matemática - FFCLRP - USP*

O SPECT é um método diagnóstico tomográfico, e como tal, pressupõe imobilidade do objeto de estudo. O movimento acarreta formação de artefatos no processo de reconstrução. Para detectar, e se possível corrigir a ocorrência de movimento, foram criadas diversas técnicas de detecção de movimento. Entre elas, foi desenvolvida a Técnica das Projeções, a qual determina os comprimentos das projeções tomográficas em suas direções principais, em função do ângulo de aquisição. Para determinação dos comprimentos, é necessário obter os contornos do cérebro em cada uma das projeções. Atualmente isto é feito por meio de um filtro recursivo (Difference Recursive Filter). Neste trabalho utilizamos um novo algoritmo de segmentação de imagens por "threshold", baseado no histograma de cada projeção. Este algoritmo considera as diferentes características de contagem obtidas em cada projeção, que são provenientes de diversos fatores, entre eles, a distância fonte-colimador. A detecção de movimento baseia-se na análise das curvas do comprimento da projeção em função do ângulo de aquisição. O movimento é detectado pela presença de descontinuidades ou alterações no comportamento das curvas. No trabalho original, nenhum tratamento foi dispensado a estas curvas. No presente trabalho, também introduzimos um processamento das curvas, suavizando-as por meio de dois filtros passa-baixa: média de três pontos e Butterworth. Tes-

tamos estas implementações em 31 cérebros adquiridos com colimador de septos paralelos e 32 cérebros adquiridos com colimador Fan-beam. A utilização deste algoritmo de segmentação acarretou em melhor definição dos contornos, e juntamente com o tratamento das curvas, obtivemos aumento na sensibilidade do método de detecção de movimento.

## BIOFÍSICA (Física Médica e Biologia Experimental) – 12/06/97

### AVALIAÇÃO E COMPARAÇÃO DE QUATRO MÉTODOS DE CORREÇÃO DE ESPALHAMENTO EM SPECT.

WIETSKÉ INEKE MEYERING

*Departamento de Física e Matemática - FFCLRP - USP*

SÉRGIO QUERINO BRUNETTO

*Centro de Engenharia Biomédica - UNICAMP*

*Departamento de Física e Matemática - FFCLRP - USP*

As tomografias cerebrais SPECT (Single Photon Emission Computed Tomography) permitem analisar os processos fisiológicos, tornando possível detectar disfunções cerebrais. As técnicas de quantificação pressupõem que toda a radiação emitida pela região de interesse, e que dirige-se ao sistema detector, contribua na formação da imagem. Porém parte dessa radiação não é detectada devido à atenuação e ao espalhamento, fato que compromete a quantificação do radiofármaco existente nas regiões de interesse. O intuito deste trabalho foi o de avaliar e comparar, com relação aos estudos não corrigidos por espalhamento, os efeitos causados na quantificação de radiofármaco quando aplicamos algumas técnicas de correção de espalhamento no domínio de energia. Os métodos comparados foram: DW - método de correção de espalhamento utilizando janela dupla; DPW - método de correção de espalhamento utilizando janela dupla de fotopico; TW - método de correção de espalhamento utilizando janela tripla; CR - método de correção de espalhamento utilizando razão de canal. As imagens foram adquiridas utilizando as câmaras de cintilação: Elscint APEX SP6 e Sophy Camera DST, do serviço de Medicina Nuclear HC/UNICAMP. As imagens tomográficas foram adquiridas utilizando 60 projeções, matriz [64x64], colimador de baixa energia e alta resolução e reconstruídas utilizando FBP e filtro rampa. A análise das imagens foi efetuada no ambiente KHOROS 2.0 instalado em uma estação de trabalho Sun Sparc 20 e nas próprias câmaras de cintilação. Foram feitas imagens planares afim de realizar uma pré-avaliação dos métodos de correção de espalhamento e imagens tomográficas utilizando "phantom", sendo estas corrigi-

das por atenuação utilizando-se o método de Chang de primeira ordem. As imagens foram comparadas com as imagens não corrigidas por espalhamento, quanto a quantificação, ao contraste e a qualidade de imagem e os dados obtidos indicam que todas as técnicas avaliadas influenciam as componentes acima citadas, tanto nas imagens planares como nas imagens tomográficas.

### Determinação de um Coeficiente de Atenuação Efetivo para Tomografias Cerebrais SPECT

MÁRCIO TOKARSKI PEREIRA, SÉRGIO SANTOS

MÜLLEN

*Departamento de Engenharia Biomédica - FEEC -*

*Unicamp, Centro de Engenharia Biomédica - Unicamp*

SÉRGIO QUERINO BRUNETTO

*Centro de Engenharia Biomédica - Unicamp,*

*Departamento de Física e Matemática - FFCLRP - USP*

Tomografias por emissão de fóton único (*Single Photon Emission Computed Tomography* - SPECT) permitem uma avaliação quantitativa, com as contagens/pixel da imagem reconstruída relacionando-se aos mCi/g do radiofármaco administrado ao paciente. A atenuação é o principal limitante da quantificação em SPECT, afetando também a qualidade das imagens, pois reduz o contraste e produz artefatos de bordas quentes. Portanto, deve-se compensar a atenuação para garantir quantificações precisas e aprimorar a qualidade das imagens. Para tanto, vários métodos foram propostos (Sorenson, Chang de 1ª ordem, e outros). Embora alguns não utilizem um coeficiente de atenuação constante, a maioria em uso nas aplicações clínicas emprega um coeficiente de atenuação médio estimado, tal como o método de Chang de 1ª ordem. Nas imagens cerebrais, o radiofármaco está contido num meio homogêneo (tecido cerebral), completamente envolvido por um meio de composição diferente (crânio), sendo que ambos atenuarão a radiação emitida. Neste trabalho, propomos um método para determinar um coeficiente de atenuação efetivo, que considere a atenuação do tecido cerebral e do osso, para ser usado em algoritmos que considerem o meio homogêneo, como o de Chang de 1ª ordem. Para isso, foram feitas imagens de uma fonte pontual ( $^{99m}\text{Tc}$ ) em várias posições no interior de um *phantom* cilíndrico, preenchido com água e envolto por alumínio (0.48 a 0.51 cm) para simular o osso. Ajustando a curva "contagens relativas" X "distância" em coordenadas semilogarítmicas, o coeficiente de atenuação efetivo é obtido do coeficiente angular da reta resultante. Os valores obtidos variaram entre 0.09 e 0.12  $\text{cm}^{-1}$ . Para avaliar o método, foram feitas aquisições tomográficas com 60 *frames* a intervalos de 6°, zoom 1.5, matriz 64x64 e colimadores de alta resolução. As imagens tomográficas foram reconstruídas utilizando-se o algoritmo de Retro-Projeção Filtrada (com filtro rampa), sendo então aplicado o método de correção de Chang de 1ª ordem.

### EFEITOS DO TEMPO DE VÔO DOS SPINS EM IMAGENS POR RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR EM BAIXO CAMPO MAGNÉTICO.

E. RIBEIRO AZEVEDO, H. PANEPPIUCCI, D. TOMASI,  
E. L. VIDOTO

*Universidade de São Paulo, Instituto de Física de São Carlos*

A influência do movimento dos spins em imagens por Ressonância Magnética Nuclear, tem sido bastante estudada nos últimos anos. Com isso vem sendo desenvolvidas várias técnicas que exploram tais efeitos. Algumas dessas técnicas visam evidenciar os tecidos em movimento (técnicas de angiografia e codificação de fluxo) e outras visam suprimir os artefatos nas imagens causados pelos efeitos do movimento (técnicas de supressão de movimento).

Neste trabalho estudamos o efeito do tempo de vôo dos spins em seqüências convencionais de MRI (Spin-Echo, Inversion Recovery e Gradient Recolled Echo) sem a presença gradientes compensados, objetivando futuras aplicações. Os estudos foram feitos em um Tomógrafo de baixo campo (500 Gauss), utilizando uma phantom de fluxo (solução de  $\text{CuSO}_4$  em  $\text{H}_2\text{O}$  com uma faixa de velocidades variada).

Os resultados mostram o efeito de intensificação do sinal devido a entrada e saída dos spins no plano selecionado durante a aplicação da seqüência. A dependência do sinal foi estudada como função da velocidade do fluxo e dos parâmetros usuais de imagens (tempo de repetição, tempo ao eco e tempo de inversão). Os dados obtidos na Seqüência Spin-Echo foram interpretados a partir de um modelo teórico simples. Efeitos de artefatos de fluxo e perda de sinal devido a altas velocidades foram observados em todas as seqüências.

### INFLUÊNCIA DE MÉTODOS DE CORREÇÃO DE ATENUAÇÃO E ESPALHAMENTO NA QUANTIFICAÇÃO DE IMAGENS DE TOMOGRAFIAS CEREBRAIS - SPECT

LORENA POZZO

*Instituto de Física Gleb Wataghin - Universidade Estadual de Campinas*

WIETSKÉ INEKE MEYERING

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

SÉRGIO QUERINO BRUNETTO

*Centro de Engenharia Biomédica - Faculdade de Engenharia Elétrica - UNICAMP*

A quantificação de imagens tomográficas, utilizada para obtenção de diagnósticos clínicos (perfusão cerebral e do miocárdio, p.e.), está baseada na relação entre atividade/ $\text{cm}^3$ , no paciente, e contagens/pixel no corte tomográfico. Entretanto, o feixe de raios  $\gamma$  proveniente do órgão de interesse está sujeito a perdas devido

à interação deste com o corpo do paciente através de efeito fotoelétrico (absorção) e de espalhamento Compton, comprometendo a qualidade e a quantificação da imagem possibilitando a ocorrência de diagnósticos imprecisos. Para corrigir a atenuação (absorção e espalhamento do feixe) utilizou-se o método de pós-correção de Chang de 1ª ordem. Para a correção do espalhamento de  $\gamma$ 's detectados em posição incorreta (poucas interações e ângulo pequeno) foram utilizados dois métodos de exclusão destes  $\gamma$ 's (no domínio da energia): Janela Dupla do Fotopico e Janela Tripla de aquisição. Para calibração dos métodos foram feitas aquisições planares de um "phantom" cilíndrico preenchido com água (meio atenuador/espalhador) e uma fonte linear em várias posições em seu interior. Para as correções foram feitas aquisições tomográficas com 60 "frames", com intervalo de 6°, zomm 1.5, matriz de 64x64 e colimador de alta resolução e baixa energia, "phantom" com e sem diluição de  $\text{Tc}^{99m}$  com 3 fontes cilíndricas de tamanhos diferentes e mesma concentração de atividade. As imagens das fontes foram reconstruídas com filtro Rampa e depois foram quantificadas e comparadas. Para a aquisição foi utilizada uma câmara de cintilação Elscint SP/6 e para implementação dos métodos e reconstrução foi utilizada uma câmara de cintilação Sophy DST de duas cabeças.

### Sistema Computadorizado para o Acompanhamento da Qualidade de Imagem em Filmes Radiológicos

JOSÉ VEGA RAMÍREZ, CARLOS ALBERTO PELÁ  
F.F.C.L.R.P. - USP

Neste trabalho têm-se desenvolvido uma forma inovadora de fazer controle de qualidade, em aparelhos de raios-x em radiologia, pela utilização de um filme radiográfico que permite obter parâmetros físicos como kVp, camada semi-redutora, filtro e exposição. O método consiste em obter uma sensibilização escalonada no filme mediante uma cunha de degraus metálica colocada num cassete intensificador de imagem Kodak Lanex Regular ( $\text{Gd}_2\text{O}_2\text{S:Tb}$ ), que utiliza duas telas intensificadoras com filme de dupla emulsão sensível à luz verde, a radiação-x transmitida através da cunha de degraus sensibiliza o filme por intermédio da tela intensificadora (écran) e as densidades óticas medidas no filme de raios-x permite construir curvas de calibração, que são usadas para comparação com as diferentes técnicas usadas do controle de qualidade em radiologia. O sistema de leitura consiste de um densitômetro óptico conectado a um conversor analógico-digital num microcomputador o Software construído por nós permite obter os parâmetros físicos de forma rápida e precisa, para todo o controle de qualidade em uma rotina radiológica. O método mencionado é diferente dos métodos tradicionais utilizando-se inclusive processos de simulação para

gerar as curvas de densidades ópticas, o que facilita o processo de calibração do sistema.

### COEFICIENTE DE ATENUAÇÃO LINEAR DO COMPÓSITO "CONCISE"

J. E. RODAS DURAN

*Departamento de Física e Matemática - FFCLRP-USP*

Os compósitos são materiais utilizados nas áreas tecnológicas e da saúde. Em particular no meio odontológico são conhecidos como resinas compostas. Neste trabalho, como parte de caracterização física do compósito Concise (3M do Brasil Ltda), foram feitas medidas que nos permitiram calcular seu coeficiente de atenuação linear ( $\mu$ ). O material foi analisado em seu estado puro e misturado em percentuais diferentes com pó de esmalte dentário humano e quartzo branco em pó. Com as medidas de  $\mu$ , foram feitas estimativas da profundidade efetiva de penetração dos raios X nessas amostras. Utilizamos para irradiar as amostras o tubo de raios X com alvo metálico de Cobre, do difratômetro universal de raios x, modelo HGZ 4 VEB Carl Zeiss. Para caracterizar os raios X, determinando sua camada semi-redutora (CSR) utilizamos o Alumínio como material padrão, para obtermos sua energia equivalente. Variamos as espessuras das amostras, juntando várias delas. Foram realizadas dez contagens para cada espessura; com os valores médios dessas leituras traçamos a curva do Ln da intensidade dos raios X transmitidos em função da espessura do atenuador. A média das contagens, o traçado dos gráficos e as aproximações exponenciais de onde obtivemos os valores da intensidade inicial  $I_0$  e de  $\mu$ , foram realizados com um micro computador. Determinamos que a energia efetiva dos raios X emitido pelo tubo com alvo de Cu (36 KV -20 mA) foi 20,4 KeV. Os valores encontrados para  $\mu$  variam de  $4,13 \text{ cm}^{-1}$  (Concise puro) a  $4,54 \text{ cm}^{-1}$  (Concise + 7,5% pó de esmalte). Esses valores foram comparados com os calculados pela relação:  $\mu = \rho \sum \%P_i (\mu/\rho)_i$ , onde  $\rho$  é a densidade da amostra;  $\%P_i$  e  $(\mu/\rho)_i$  são respectivamente a fração em peso e coeficiente de atenuação de massa do constituinte  $i$  da amostra. Esta comparação entre os valores experimentais e teóricos deu erros relativos entre 0,5% e 5,2%. As profundidades efetivas calculadas a partir da relação:  $x = -(\text{sen}\theta/2\mu) \text{Ln}(1 - G_x)$  com  $G_x = 0,999$ ,  $\theta = 13,35^\circ$  e os valores experimentais, deu valores entre 1,76mm (Concise + 7,5% pó de esmalte) e 1,93mm (Concise puro). Estes cálculos de  $\mu$  e  $x$  foram utilizados na caracterização física desta resina composta, para seu melhor uso em restaurações odontológicas.

### CARACTERIZAÇÃO DE JUNÇÕES SEMICONDUTORAS PARA DOSIMETRIA DE FEIXES DE ALTA ENERGIA

PATRICIA NICOLUCCI, CARLOS ALBERTO PELÁ,

THOMÁZ GHILARDI NETTO

*F.F.C.L.R.P. - USP*

Em serviços de radioterapia, dosimetrias in-vivo são realizadas periodicamente a fim de manter a exatidão total de 5% na dose dada ao paciente, como é de recomendação da Comissão Internacional de Medidas e Unidades de Radiação. Para técnicas convencionais, com frações diárias de aproximadamente 200 cGy, tais dosimetrias são realizadas, usualmente, com dosímetros termoluminescentes. Já para técnicas especiais, como Irradiação de Corpo Inteiro (ICI), em que há hiprefracionamento e doses de aproximadamente 1200 cGy dados em 2 ou 3 dias, dosimetrias in-vivo e em tempo real são uma necessidade.

O presente estudo propõe junções semicondutoras para utilização em dosimetrias de tempo real de feixes de alta energia. Os detectores propostos são diodos comercialmente disponíveis que recebem encapsulamento extra ao original para proporcionar o buildup necessário. São dimensionados alumínio e acrílico, através das densidades eletrônicas, resultando numa capa de buildup equivalente a 0,5 cm de água e com  $0,51 \text{ g/cm}^2$ , estando dentro das recomendações do Protocolo de Dosimetria da Agência Internacional de Energia Atômica.

As correntes medidas com o detector são da ordem de 86 nA para taxas de dose de aproximadamente 60 cGy/min e de 8,5 nA para taxas de dose de, aproximadamente 5,5 cGy/min (usadas em ICI). As respostas para dose de entrada (saída) variaram de 10% (56%) para intervalos de campos quadrados de  $10 \times 10$  a  $35 \times 35$  e de 90% (87%) para o intervalo de distâncias fonte-superfície de 80 a 250 cm. Observou-se um pico de resposta para espessuras de fantoma de 15 cm na entrada e em baixas espessuras para a saída, e variações de aproximadamente até 7% (96%) para angulações de até  $90^\circ$ .

### Viscous drag effect on imaging of linearized plasmid deoxyribonucleic acid in liquid medium with the atomic force microscope

OMAR TESCHKE, MAURÍCIO URBAN KLEINKE

*Instituto de Física "Gleb Wataghin" UNICAMP*

CHRISTINE HACKEL

*CBMEG, DGM, Faculdade de Ciências Médicas*

*UNICAMP*

In many attempts to image biomolecules like deoxyribonucleic acid (DNA) with the atomic force microscope, the apparent width of the molecules exceeds the expected width as obtained by X-ray diffraction. This increase in size was explained by a geometrical tip convolution, but the increased width seems to persist despite improvements to the tip. Experimental evidence is shown that part of this increase is due to the liquid drag force when molecules are imaged under liquid. The liquid drag force is using standard fluid dynamics where the tip motion in the liquid is modeled by the relative

motion of a cylinder through a constant velocity fluid. The Reynold's number for the experimental configuration is smaller than 1 characterizing a laminar flow and the calculated drag force is 80 picoNewtons which is in agreement with the experimentally measured force for ethanol and relative tip velocity of 100  $\mu\text{m/s}$ . Both the viscous drag force and the apparent width increase may be modelled by a  $v^K$  dependence where  $v$  is the sample velocity relative to the tip,  $K$  is a constant independent of the liquid and the tip-sample geometry and equal to 0.53. An apparent molecular width increase of 30 nm for a 2 nm diameter molecule for a 150  $\mu\text{m/s}$  scanning velocity was observed.

### CARACTERIZAÇÃO DA QUEDA DA LEI DA RECIPROCIDADE EM TRÊS SISTEMAS TELA-FILME.

ADELAIDE DE ALMEIDA

USP

W. T. SOBOL, G. T. BARNES

University of Alabama at Birmingham

O propósito deste trabalho é quantificar a queda da lei da reciprocidade para sistemas tela-filme em mamografia. Um detector DISC, especificamente designado para medir a fluência de energia do feixe de raios X após sua saída da mama, foi utilizado para medir a exposição tela-filme. Foram avaliados três sistemas tela-filme amplamente utilizados: o sistema Kodak MinR 2000, Fuji UM Mammo Fine Screen com filme Fuji UM MA HC e Agfa MR Detail Screen e filme Agfa Mammory MR5. O algoritmo logit que lineariza o formato das curvas logísticas foi utilizado para caracterizar as curvas HD. Diferentes valores de espessuras do simulador de mama BR50/50, correntes de tubo e kVp foram utilizados para variar a razão de exposição. O efeito na queda na lei de reciprocidade foi quantificado. Analizando a dependência dos parâmetros logit (densidade máxima, mínima e deslocamento da curva e coeficiente angular) na razão de exposição. Foi encontrado que o deslocamento da curva logit é um bom indicador da velocidade do sistema tela-filme, enquanto que a inclinação da curva logit é afetada pela queda da lei de reciprocidade. Esta queda resulta em mudanças no contraste bem como na velocidade. Para o intervalo das razões de exposições medidas (50x), o contraste do sistema tela-filme e velocidade variam por um fator de 2 e 3,5,

respectivamente. Como resultado o contraste do filme diminui conforme a exposição aumenta. As mudanças maiores foram observadas com o sistema tela-filme Kodak MinR 2000.

### Aplicação de técnicas de segmentação de imagens para quantificação de estudos renais dinâmicos - DTPA.

GERMANO PINTO GUEDES

FAMB - Departamento de Física e Matemática - FFCLRP

- USP/Ribeirão Preto

SÉRGIO QUERINO BRUNETTO

Centro de Engenharia Biomédica - Unicamp FAMB -

Departamento de Física e Matemática - FFCLRP -

USP/Ribeirão Preto

As características digitais da aquisição de imagens em medicina nuclear permite-nos utilizar técnicas de tratamento de imagens para destacar objetos ou regiões de interesse. Permite-nos também analisar quantitativamente os processos fisiológicos/funcionais através da estudo das curvas de tempo-atividade que nos fornece informações sobre a evolução temporal da concentração de radiofármaco numa determinada região de interesse (ROI) no órgão em estudo. Em muitos casos, esta ROI é definida manualmente, prevalecendo um caráter estritamente subjetivo do operador. A quantificação é simplesmente a integral das contagens (ou intensidades) dos pixels contidos naquela região de interesse. Portanto, a determinação de uma ROI que não contenha o órgão, ou a parte dele, que se deseja estudar, pode-se encorrer em erros de quantificação, sub-estimando ou super-estimando o valor real de contagens. Apresentamos neste trabalho a aplicação de um algoritmo de segmentação por limiar de contagem baseado no histograma da imagem (critério de Otsu) aplicado a imagens de medicina nuclear capaz de determinar os contornos dos órgãos em estudo automaticamente eliminando a subjetividade do processo via operador e viabilizando a normatização de procedimentos de rotina em medicina nuclear. Os resultados da aplicação desta técnica em estudos renais dinâmicos mostraram uma melhoria nas curvas de tempo-atividade quando comparadas às obtidas pelo método tradicional. CAPES

## BIOFÍSICA (Biofísica Molecular Experimental)

### BIOFÍSICA (Biofísica Molecular Experimental) – 11/06/97

#### PHOTOSYNTHETIC ENERGY STORAGE AND OXYGEN EVOLUTION DETERMINED THROUGH OPEN PHOTOACOUSTIC CELL TECHNIQUE

PAULO ROXO BARJA, ANTONIO MANOEL  
MANSANARES  
*Unicamp*

Following the broadening use of the photoacoustic technique in the study of plant photosynthesis, recently a new open photoacoustic cell (OPC) was developed. Simple and versatile, this cell is particularly suitable for measuring photosynthetic parameters as oxygen evolution and energy storage. This compact device is formed by a commercial electret microphone that uses its own chamber as the acoustic cell, with the sample acting as one of the walls. Since the sample itself closes the chamber, it is not necessary to cut a leaf of the plant for measurements, so the OPC allows *in vivo and in situ* monitoring of photosynthetic activity in plants. This avoids dehydration of the sample and minimizes changes in the photoacoustic chamber atmosphere, because part of the leaf remains exposed to the outside, capturing external carbon dioxide. However, the membrane of the microphone used in this cell inserts a spurious component in the photoacoustic signal of non-opaque samples, as plant leaves. The presence of a membrane component in the photoacoustic signal of plant leaves is a disadvantage, since this component is added to the sample signal, making the analysis more complicated. In the present work we analyze the influence of the membrane signal component in the determination of photosynthetic energy storage and oxygen evolution in plant leaves, and propose a simple method to eliminate this component. A comparison between errors due to membrane signal component and residual oxygen evolution in high modulation frequency measurements to determine energy storage is presented. Measurements on *Eucalyptus urophylla* and *Phaseolus vulgaris* leaves exemplify the determination of energy storage and oxygen evolution with the OPC technique. A simple model describes the dependence of the measured parameters on light intensity below photoinhibition onset.

Análise por Ressonância Magnética da  
Biossorção de Cobre em Folhas Secas  
ILUSKA PEREIRA BAPTISTA LOPES, MÁRCIO  
GERALDO DE OLIVEIRA, REGINA PINTO DE  
CARVALHO  
*UFMG*

A sorção de íons metálicos em biomassa viva ou seca tem sido estudada com o objetivo de se construir filtros para despoluição de rejeitos industriais ou para recuperação de metais estratégicos nesses rejeitos. Em trabalhos anteriores, estudamos a sorção de cobre em folhas de chá preto (*T. sinensis*), comprovando que existe uma sorção efetiva e que a dessorção é possível através de um tratamento ácido na biomassa carregada (ver resumos do XIX ENFMC, Aguas de Lindoia, SP, 1996, pag. 80). No presente trabalho, amostras de folhas de *T. sinensis* sofreram tratamento ácido ou básico anterior à sorção e em seguida foram carregadas com cobre. Foram feitas análises nas folhas carregadas utilizando Ressonância Paramagnética Eletrônica (Eletron Paramagnetic Resonance, EPR). A comparação do sinal obtido experimentalmente com simulações feitas com o programa QPOWA mostram que o cobre ocupa um sítio quadrado planar com quatro íons de nitrogênio como primeiros vizinhos. As folhas carregadas com cobre foram tratadas em soluções com pH variando entre 3 e 9 e em seguida novamente analisadas por EPR. Nota-se que ao sinal da vizinhança quadrado - planar se superpõe um sinal largo característico de precipitação metálica. Este sinal desaparece bruscamente com a mudança do pH, indicando a dissolução do precipitado metálico. O experimento foi repetido com folhas do cerrado mineiro (pau-terra da folha miuda e peroba do campo) que mostraram o mesmo tipo de comportamento. Este é um indicativo de que a sorção do cobre se dá em um componente da biomassa que é característico das diversas folhas. Provavelmente o tratamento prévio das folhas deslocou o magnésio da clorofila deixando livre um sítio que pode ser ocupado pelo íon metálico.

Interações Magnéticas em Sais de  
(Cobre-Dipeptídeos):  $Cu^{2+} : Gli - Trp$  e  
 $Cu^{2+} : Trp - Gli$

ANTONIO JOSÉ DA COSTA FILHO, OTACIRO RANGEL  
NASCIMENTO  
*Instituto de Física de São Carlos-Universidade de São  
Paulo (USP)*  
RAFAEL CALVO  
*INTEC, CONICET-UNL (Argentina)*

Derivados metálicos de aminoácidos são sistemas modelo simples para o estudo de íons metálicos em estruturas que simulam proteínas. O principal objetivo

dessas investigações é avaliar as magnitudes dos acoplamentos por interação de troca e relacioná-las aos caminhos químicos de supertroca. Foram realizadas medidas através da técnica de RPE em monocristais dos compostos  $Cu^{2+} : Gli - Trp$  e  $Cu^{2+} : Trp - Gli$ , nas frequências 9,3 e 33GHz e à temperatura ambiente. Ambos os complexos cristalizam no grupo espacial  $P2_12_12_1$ , com quatro moléculas quimicamente idênticas, mas magneticamente não equivalentes, por cela unitária. Essas moléculas formam duas subredes (1 e 2) acopladas por uma interação de troca inter-rede. Cada subrede é formada por dois íons de cobre não equivalentes, acoplados por uma interação de troca intra-rede. O composto  $Cu^{2+} : Gli - Trp$  apresenta duas linhas parcialmente resolvidas em algumas direções do campo magnético aplicado no plano *ac*, ao passo que há apenas uma linha de ressonância para todas as orientações nos outros dois planos. Os espectros de RPE mostram uma única linha nos três planos cristalográficos para o  $Cu^{2+} : Trp - Gli$ . Os dados de RPE, juntamente com o formalismo de Kubo-Tomita, permitem avaliar os acoplamentos intra-rede ( $J^{(1)}$ ) e inter-rede ( $J^{(1,2)}$ ) por interação de troca. Os seus valores são  $J^{(1)} = 53,7mK$  e  $J^{(1,2)} = 7,1mK$  para o composto  $Cu^{2+} : Gli - Trp$  e  $J^{(1)} = 990mK$  e  $J^{(1,2)} = 48,4mK$  para o  $Cu^{2+} : Trp - Gli$ . Esses valores são discutidos em termos da estrutura cristalina, sendo os caminhos químicos para transmissão da polarização de spin constituídos por pontes de hidrogênio e interações cátion- $\pi$  para o  $Cu^{2+} : Gli - Trp$ , e ligações químicas covalentes e interações cátion- $\pi$  para o  $Cu^{2+} : Trp - Gli$ . Os valores calculados para  $J^{(1)}$  no composto  $Cu^{2+} : Gli - Trp$  e  $J^{(1,2)}$  no  $Cu^{2+} : Trp - Gli$  são uma boa estimativa da magnitude do acoplamento mediado por interações cátion- $\pi$ . Apoio Financeiro: FAPESP, CNPq, CAPES.

#### Abz como sonda fluorescente da interação entre peptídeos e micelas.

ROZANE DE F. TURCHIELLO, MARIA TERESA LAMY-FREUND, AMANDO SIUFTI ITO  
*Instituto de Física da Universidade de São Paulo*  
 LUIS JULIANO  
*Escola Paulista de Medicina*

Palavras chaves: fluorescência, lipídios, aminoácidos, micelas.

O ácido orto amino-benzóico (Abz) tem sido proposto como um fluoróforo adequado para monitorar propriedades estruturais de peptídeos biologicamente ativos. Possui alto rendimento quântico e pode ligar-se ao terminal amino de peptídeos, funcionando como uma sonda extrínseca. A dependência de propriedades fluorescentes do Abz com o solvente permite verificar se os peptídeos interagem ou não com vesículas e micelas. Neste trabalho foram estudados os seguintes compostos:  $AbzNHCH_3$ ,  $AbzArgNHCH_3$ ,  $AbzPheNHCH_3$ ,  $AbzLeuNHCH_3$ ,  $AbzGluNHCH_3$ . Os

rendimentos quânticos e tempos de vida desses compostos são próximos aos do Abz isolado, mostrando que a ligação a esses aminoácidos não altera significativamente a estrutura eletrônica do fluoróforo. Parâmetros de fluorescência do Abz, como: intensidade do máximo de emissão, comprimento de onda no máximo de emissão ( $\lambda_{max}$ ), anisotropia e tempo de vida do estado fluorescente ( $\tau_s$ ), foram utilizados para caracterizar a interação entre Abz-aminoácidos e micelas de SDS (Dodecil Sulfato de Sódio). Foram obtidas curvas de titulação, monitorando a dependência desses parâmetros com a concentração de anfifílico. Os resultados mostram que os aminoácidos obedecem a seguinte ordem crescente de afinidade por micelas de SDS: Glu, Leu, Phe e Arg. Experimentos de supressão por acrilamida, na ausência e na presença de micelas de SDS, resultaram em gráficos de Stern-Volmer lineares. Os valores das constantes de Stern-Volmer são coerentes com a ordem de afinidade. A comparação com medidas realizadas com  $AbzNHCH_3$ , indica que a interação é comandada principalmente pelas propriedades dos aminoácidos ligados ao fluoróforo. Resíduos positivamente carregados como Arg interagem fortemente com as micelas, enquanto os carregados negativamente como Glu apresentam pequena inserção na fase alifática. Conclui-se da análise geral dos dados, que efeitos de carga são predominantes, sendo também relevante a hidrofobicidade do aminoácido.

#### INTERAÇÃO DE DROGAS ANTIPSICÓTICAS CLORPROMAZINA E TRIFLUOPERAZINA COM MONOCAMADAS DE LANGMUIR DE DIPALMITOIL FOSFATIDILCOLINA COMO SISTEMA-MODELO DE MEMBRANAS.

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

O mecanismo molecular de ação das drogas antipsicóticas Clorpromazina (CPZ) e Trifluoperazina (TFP) considera sua interação com a fase lipídica de membrana biológica e sua localização dentro da mesma como os fatores mais importantes. Nesse trabalho foi estudada a interação de CPZ e TFP com o fosfolípido zwitteriônico dipalmitoil fosfatidilcolina (DPPC) nas monocamadas de Langmuir. A solução de DPPC em clorofórmio, misturada com as drogas em vários razões de concentração (de 1% até 25%), foi depositada sobre a superfície de subfase aquosa (técnica de co-espalhamento). As isotermas de pressão e potencial de superfície vs. área por molécula foram registradas durante a compressão da monocamada. Com uma subfase de água Milli-Q (pH 5,8) a CPZ introduzida na monocamada de DPPC se encontra protonada (pKa 8) e a TFP (pKa 4.5) pode existir em duas formas com

diferentes valores de carga positiva. A comparação das isotermas de pressão e potencial de superfície entre monocamadas misturadas e de lipídio puro mostra que a CPZ deve estar localizada perto da interface com a subfase aquosa. A TFP se localiza na fronteira entre as cabeças polares e a região hidrofóbica da monocamada. O comportamento do potencial de superfície confirma esta sugestão. Nenhuma das drogas induz uma perturbação no empacotamento das cadeias hidrofóbicas de DPPC na monocamada. Nas concentrações baixas (1 – 5%) a TFP induz uma expansão da monocamada no estágio de formação da fase líquida expandida, o que confirma a sua interação com a região polar da monocamada devido a sua intercalação entre as cabeças. Acima de 5% o efeito diminui provavelmente devido da formação dos agregados da TFP nas concentrações mais altas. A localização mais profunda da TFP na monocamada lipídica pode estar correlacionada com sua maior eficiência biológica. FAPESP e CNPq.

**Ressonância Magnética Nuclear na  
determinação de estruturas de proteínas:  
aplicação à mutantes de HPr de *Staphylococcus***

*aureus*

CLAUDIA ELISABETH MUNTE, RICHARD CHARLES  
GARRATT

*Instituto de Física de São Carlos - USP*

HANS ROBERT KALBITZER

*Max-Planck-Institut für Medizinische Forschung -  
Heidelberg*

TITO JOSÉ BONAGAMBA

*Instituto de Física de São Carlos - USP*

O trabalho consiste na determinação da estrutura tridimensional da proteína mutante de HPr de *Staphylococcus aureus*, H15A, por espectroscopia de NMR bidimensional de alta resolução, com uso de espectrômetro de alto campo de NMR (800 MHz).

HPr é uma proteína pequena (9 kDa) sendo fosforilada no átomo N<sup>δ</sup> do resíduo His-15. É integrante do sistema bacteriano fosfoenolpiruvato:açúcar-fosfotransferase (PTS), o qual transporta diversos carboidratos para dentro da célula, simultaneamente fosforilando-os a fim de iniciar seu metabolismo e prevenir sua saída pelo citoplasma. A proteína HPr liga-se à enzima I, transferindo-lhe seu grupo fosfato.

Um grande número de estruturas tri-dimensionais de HPr já foram determinadas. A topologia geral é um sanduíche- $\beta$  aberto, composto de três hélices- $\alpha$  e quatro fitas- $\beta$  anti-paralelas. Muitos detalhes estruturais são bem conservados. A região do centro ativo (resíduos 12-18) parece ter diferenças significativas na comparação de todas as estruturas, reforçando a hipótese de que a fosforilação e a desfosforilação do sítio ativo His-15 é

acompanhada por mudanças conformacionais. Paralelamente, divergências nas estruturas por Raios-X e por NMR levam à suposição de que as proteínas assumem uma variedade de conformações, resultando no "congelamento" de somente uma destas conformações (Raios-X) ou a um intermediário entre todas elas (NMR). Mutantes recentes de HPr de *Staphylococcus aureus*, onde o sítio ativo His-15 é mutado para Ala-15 ou Asp-15 (H15A e H15D) mostram um aumento inesperado de afinidade para com a enzima I. A mutante H15A não pode ser fosforilada, e a mutante H15D é fosforilada via carga do resíduo Asp, ou seja, por um caminho bioquímico totalmente diferente. Uma possível explicação para esse aumento de afinidade seria que essas mutantes assumem, em sua maioria, uma única conformação, sendo justamente a que se liga à enzima I. A determinação estrutural dessas mutantes torna-se, portanto, de grande interesse.

**TRANSNITROSYLATION REACTIONS IN  
PROTEINS AND NITRIC OXIDE  
TRANSFER BETWEEN S-NITROSYLATED  
THIOLS AND HEME GROUPS**

KATIA CRISTINA GARCIA, FERNANDA RIBEIRO  
BURGEL, SÔNIA RENAUX WANDERLEY LOURO

*PUC-Rio*

ELIANE WAJNBERG

*CBPF*

Nitric oxide is a small free radical that had recently become one of the more studied molecules. The increasing interest in NO is due to its expanding range of functions in humans and other animals. It is endogenously synthesized and in living systems and often plays a role as a biological messenger in neurotransmission, blood pressure control and immunological responses. NO has a high affinity for ferrous hemeproteins. It also binds to thiol-containing compounds forming S-nitrosothiols. Studies of S-nitrosothiols stability and of transnitrosation reactions between thiol and heme containing proteins are important to elucidate NO-associated biological mechanisms. In this work the uv-visible absorption properties of S-nitrosylated albumin and cysteine are used to study both their stability under various pH conditions and the rates of transnitrosation reactions between their thiols. S-nitrosothiols possess dual absorption peaks at 320-360 nm and at 550 nm. Details of the absorption spectra are different and permit detection of transnitrosation. Nitrosyl-hemes are paramagnetic and present well-characterized EPR spectra. NO donations from S-nitrosylated cysteine and albumin to heme proteins such as hemoglobin and myoglobin are studied using electron paramagnetic resonance and the uv-visible optical absorption of the hemeprotein. It

is observed that S-nitrosocysteine transfers NO to the hemes of oxyhemoglobin initially forming an EPR silent ferric species. After a few minutes at neutral pH the ferric species transforms into the well-known NO-hemoglobin derivative. The influence of the cysteine residues of proteins in NO donation to hemes is studied using the non-cysteine containing myoglobin and blocking hemoglobin thiols.

### METHYLENE BLUE INTERCALATION INDUCES LONG-RANGE DISTORTION IN THE DNA DOUBLE-HELIX: AN INFRARED SPECTROSCOPY STUDY.

P. C. N. TEIXEIRA

*Biophysics Institute -UFRJ, 21949-900, Rio de Janeiro*

H. S. DE AMORIM, F. DE SOUZA-BARROS

*Physics Institute-UFRJ, 21945-970, Rio de Janeiro*

Menezes and Teixeira (1992), and Teixeira and Menezes (1996) have shown that hyperthermia and X-rays treatment act synergistically with Methylene Blue, MB, inducing lethal action in bacterial systems. The authors propose that there exist DNA distortions caused by MB intercalation which is excision-repairable by UvrABC enzyme. Methylene Blue is a thiazin dye with quasi-planar structure and active photodynamic properties. Previous studies of the DNA interaction with heteroaromatic compounds have shown the preferential MB interaction with GC base pairs (Müller & Crothers, 1975). In the present work, effects of the DNA distortions due to MB intercalation was investigated with oriented DNA samples using IR spectroscopy. X-ray diffraction, and linear dichroism were used as complementary techniques for sample characterization and MB intercalation. The infrared (IR) spectrum of MB-samples exhibits the  $821\text{ cm}^{-1}$  band that has been associated with a distortion of the main deoxyribose phosphate chain (Brahms, S., Brahms, J. & Pilet, J., 1974). A- and B-DNA bands were observed in the IR spectra of both MB-DNA and pure DNA samples, indicating a non uniform dehydration of these samples (Falk, M., K., Hartman Jr., A. & Lord, R. C., 1963). A comparison of the observed IR band shifts – suggesting that the MB-intercalated DNA films are less dehydrated than the pure DNA ones – is consistent with a long-range distortion for MB-intercalated DNA. A long-range distortion of the deoxyribose phosphate chain due to MB intercalation might attenuate steric impediments to water penetration into the inner DNA double helix regions – thus facilitating CO-group hydration in the deoxyribose. It is proposed that hydration arising from Methylene Blue intercalation in the DNA region could contribute to a local distortion enhancement that might inhibit in vivo helicase activity of the UvrABC excision-repair system.

### Temperature dependence of $^1\text{H}$ ENDOR of nitrosyl hemoglobin

MARCO FLORES, ELIANE WAJNBERG, GEORGE BEMSKI

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas*

Electron paramagnetic resonance (EPR) studies on NO-ligated hemoglobins (HbNO) and their derivatives both in single crystal form and as frozen solutions have yielded detailed information on the stereochemical and electronic structure of the nitrosyl heme group, but the question of a participation of the distal histidine (His E7) in the stereochemistry of NO binding to iron that is considered effective in oxyhemoglobins cannot be tackled by ESR. Feher and co-workers have shown for aquomet-hemoglobin and myoglobin that the resolution enhancement of electron-nuclear double-resonance (ENDOR) spectroscopy is suitable for obtaining a more detailed picture of the immediate heme-iron environment. Huettermann et al using  $^1\text{H}$  ENDOR in heme proteins at 10 K has observed and identified several proton species. In this work,  $^1\text{H}$  ENDOR spectra were obtained from HbNO of human hemoglobin between 8 K and 48 K; at least three proton species were identified. The proton interactions intensities change with temperature. One is assigned to protons in the heme plane (meso protons), with proton interaction of 0.35 MHz in 15.5 K and 0.39 MHz in 48 K; other is assigned to the  $N_{\epsilon 2}$  proton of the distal histidine (His E7), with proton interaction of 1.9 MHz in 15.5 K and 1.7 MHz in 48 K; and another one is attributed to a methyl proton of the valine (Val E11) over the distal side of the heme-pocket with proton coupling of 3.85 MHz in 15.5 K and 3.68 MHz in 48 K. This temperature dependence can be attributed to changes in H(Val 11)-N-O-H( $N_{\epsilon 2}$ ) geometry. Spectra were obtained at three different magnetic fields at 8 K. The three proton species are still observed.

### MICROSCOPIA DE FORÇA ATÔMICA APLICADA AO ESTUDO DE SUPERFÍCIES CELULARES

GILBERTO WEISSMÜLLER, PAULO M. BISCH

*UFRJ*

The atomic force microscope (AFM) allows non-destructive imaging of insulating surfaces at nanometer resolution. In the last years AFM has been largely used in material science and in the investigation of biological samples, like model membranes and proteins bound to membranes. The AFM previously idealized for hard surfaces is now extended to image soft samples and applied to the investigation of cell surfaces. High-resolution AFM images in real time, at room temperature, and in an aqueous environment are now feasible. The concept of an atomic force microscope involves a high-resolution detection by a laser beam of the vertical movement of a tip in contact with the sample

surface. A piezo XYZ-translator is used to move the sample, scanning the XY-direction and controlling the Z position. The vertical position of the tip could be measured by keeping the Z-position of the sample constant (constant height mode) or the tip position is kept constant by moving the sample in the Z-direction through an electronic feedback loop. Since the deflection of the tip is proportional to the force exerted on it, this last procedure keeps the force that the tip exerts on the surface constant (constant force mode). In both modes the surface relief is reconstructed by analyzing the signals in a computer. Here we discuss the application of the atomic force microscopy in the characterization of cell surfaces. In particular, we could distinguish between astrocytes derived from lateral and medial sectors of the embryonic midbrain. These cells are known to be different in their ability to support neuritic growth, but very difficult to differentiate with conventional microscopic techniques.

#### MELTING TEMPERATURE OF DODAB UNILAMELLAR VESICLES MEASURED BY FLUORESCENCE METHODS

CARLOS ROBERTO BENATTI, ELOI FEITOSA

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

MARCIO JOSÉ TIERA

*Depto. de Química e Geociências - Ibilce - UNESP - S. J. do Rio Preto*

A better understanding of the molecular organization in natural membranes and function in the cellular activity requires a membrane-model system to minimize the complexity. Synthetic bilayers from quaternary ammonia salts (eg., dioctadecyldimethylammonium bromide, DODAB) have been largely used for this purpose and have some of the properties of natural membranes. The structure of these aggregates was examined above and below the gel-to-liquid crystalline melting temperature ( $T_m$ ). We have used steady-state fluorescence to obtain the transition temperature of DODAB vesicles (closed bilayers) prepared by different methods. The importance of this technique is to study the microenvironment of the lipid chains, with the probe incorporated into synthetic vesicles. From quantum yield we found two values for  $T_m$ , 36 and 45°C, possibly corresponding to the pre- and main-transition temperature, respectively. Differential scanning calorimetry confirmed these results. Anisotropy measurements, however, showed a single  $T_m$  value which depends slightly on the vesicle size. Value of 39.0, 40.7 and 42.0°C were obtained, respectively, for small (sonicated), large (chloroform-injected) and giant (non-sonicated) DODAB vesicles. It is not yet understandable why the pre-transition  $T_m$  can be detected by some techniques but not by others. Spectrophotometry uv-visible technique was used too. DPH, Pyrene, 4H4A have been used as fluorescence probe.

Supported by FAPESP

#### LARGE UNILAMELLAR VESICLES BY SIMPLY MIXING DIOCTADECYLDIMETHYLAMMONIUM BROMIDE WITH WATER

ELOI FEITOSA

*Depto. de Física - Ibilce - UNESP - S. J. do Rio Preto - SP*

KATARINA EDWARDS

*Institute of Physical Chemistry - University of Uppsala - Uppsala - Sweden*

Closed bilayers (vesicles) have many applications in biological systems as mimetic agents, drug carriers or catalysts. The structure and properties of vesicles from synthetic or natural amphiphiles depend on their size which is mainly determined by the particular method of vesicle preparation used. Sonication, extrusion or chloroform evaporation are methods commonly used to form small or large vesicles. Instability of vesicle structures is the main limitation for practical use of vesicles. Here we show some properties, such as size and stability, of spontaneously formed vesicles from synthetic amphiphiles. Optically clear dispersions of dioctadecyldimethylammonium bromide and chloride (DODAX, X = Br, Cl) in water are obtained by simply mixing the amphiphile at low concentrations and at a temperature safely above the melting point ( $T_m = 45^\circ\text{C}$ ) of DODAX. Cryo-TEM micrographs undoubtedly show that, under these conditions, DODAX molecules self-assemble into unilamellar large and medium sized vesicles with apparent radius up to 600nm. Dynamic light scattering results show that the DODAB dispersions consist of two populations of vesicles with average hydrodynamic radii ( $R_h$ ) of 80 and 337 nm for DODAB and of 72 and 247 nm for DODAC. Both of these techniques agree that DODAC form smaller and more polydisperse vesicles than DODAB. The vesicles are stable for months according to the aging time-dependence of the turbidity ( $\tau$ ) and molar absorption coefficient ( $\epsilon$ ).

#### ESTUDO COMPARATIVO DA ESTRUTURA DE SUBDOMÍNIOS DE VÁRIAS SORO ALBUMINAS EM DIFERENTES CONDIÇÕES.

JENIFER NICOLETTI NEVES, GIOVANNI CÉSAR DOS SANTOS, JOHNNY RIZZIERI OLIVIERI

*IBILCE*

A albumina é uma das mais abundantes proteínas encontradas no plasma sanguíneo, seu peso molecular é ao redor de 66500 e suas principais funções são o transporte e armazenamento de numerosas outras substâncias, tais como ácidos graxos, bilirrubina, etc. As soro albuminas apresentam ao redor de 580 resíduos de amino-ácidos, 17 pontes de dissulfeto, mas que de-

vido às suas localizações ao longo da cadeia permitem uma grande flexibilidade e maleabilidade. Essas mudanças conformacionais podem ser observadas com a variação do pH e da temperatura, segundo dados bibliográficos, mas essas variações podem ocorrer mesmo em pH constante, como nos organismos vivos, só que nesses casos são induzidas pela presença de alguns ligantes ligados à proteína. O espalhamento de raios-x a baixos ângulos (SAXS) tem sido muito aplicado no estudo de macromoléculas em solução, o que possibilita o seu estudo em condições o mais próximas possível de seu ambiente biológico. Possui uma teoria bem desenvolvida que permite obter vários parâmetros geométricos e estruturais, como raio de giração, volume, superfície, função distribuição de distâncias e máxima dimensão da molécula. Neste trabalho procurou-se desenvolver um estudo comparativo da estrutura de subdomínios apresentada por diversas soro albuminas. Trabalhou-se com albuminas bovinas, humanas, de rato, de porco, de cavalo, entre outras. Foram feitas medidas de intensidade de espalhamento, e a partir delas obtida a função distribuição de distâncias ( $P(r)$ ), da qual é possível obter informações sobre a forma, tamanho, etc. Modelos teóricos, construídos através de programa computacional são propostos, e os resultados comparados com as medidas experimentais.

## BIOFÍSICA (Biofísica Molecular Experimental) – 12/06/97

### ESTUDOS DE NITROSIL HEMOPROTEÍNAS DESIDRATADAS POR ENDOR

ODIVALDO CAMBRAIA ALVES  
UFF

ELIANE WAJNBERG, GEORGE BEMSKI, MARCO ANTONIO FLORES  
CBPF

Os efeitos do solvente são muito importantes para a formação, estabilidade e dinâmica das moléculas proteicas globulares. Trabalhos anteriores evidenciaram as propriedades da molécula de água no processo de hidratação proteica e evidenciaram a existência de uma camada de hidratação para as proteínas. Esta última consiste de moléculas de água muito próximas a proteína, e necessárias para a manutenção da conformação nativa funcional. No caso das hemoproteínas vários trabalhos foram feitos observando os efeitos do solvente diretamente no centro ativo, grupo heme, utilizando absorção ótica, EPR, Mossbauers ou suscetibilidade magnética. Devido as suas propriedades um ligante muito utilizado para a caracterização da estrutura e funcionamento das hemoproteínas é o óxido

nítrico (NO). Quando a molécula de NO ocupa a sexta posição do ferro da heme, o último se encontra no estado ferroso com spin  $S=0$ , enquanto o spin total do complexo Fe-NO é  $1/2$ , devido ao elétron desemparelhado do NO. A proteína é então paramagnética sendo facilmente observada, e extensivamente estudada, por EPR. Recentemente observamos, utilizando EPR, a existência de equilíbrio térmico entre diferentes conformações em nitrosil hemoproteínas, independente de sua estrutura quaternária ou efeitos de solvente. Informações mais detalhadas a respeito da interação de prótons e nitrogênios da porfirina e dos resíduos distal e proximal com o complexo Fe-NO podem ser obtidas utilizando a técnica de ressonância dupla nuclear e eletrônica (ENDOR). Neste trabalho estudamos a dependência com a temperatura dos espectros de ENDOR de nitrosil hemoglobina (HbNO) e mioglobina (MbNO) desidratadas. Os resultados são comparados com os de amostras em solução e os obtidos por EPR visando uma maior compreensão da importância da presença de água para a dinâmica proteica.

### MEMBRANAS MODELO ESTUDADAS PELA TÉCNICA DE ONDAS ESTACIONÁRIAS DE RAIOS-X

ROSANGELA ITRI  
IFUSP

RUITIAN ZHANG

Chemistry Division, Argonne Nat. Lab, USA

MARTIN CAFFREY

Department of Chemistry, Ohio State University, USA

Uma série de membranas modelo formadas por filmes de Langmuir-Blodgett (LB) foram usadas para avaliar a resolução espacial da técnica de ondas estacionárias de Raios-X (XSW). Os filmes LB eram compostos por bicamadas de sais de zinco de ácido graxo onde o tamanho da cadeia variou de 18 (C18) a 24 (C24) átomos de carbono. Da posição média dos átomos de zinco,  $\langle z \rangle$ , usados como átomos marcadores, acima do substrato suporte foi observado ser possível detectar diferenças em  $\langle z \rangle$  de 1 - 2 Å. Os dados sugerem que as cadeias carbônicas estão inclinadas em relação à normal ao substrato, com ângulos decrescendo de 40 para C18 para zero graus para C24. Por outro lado, a dispersão do átomo marcador em torno de sua posição média foi mostrada ser independente do tamanho da cadeia. Além disso foi também observado que o ato de deslocar a camada de átomos marcadores a uma distância maior do substrato não influenciava nem a distribuição dos átomos marcadores nem a orientação das cadeias dos filmes LB examinados. Este estudo forneceu assim uma informação importante relacionada à composição e

constituição de amostras que facilitam a determinação da estrutura de membranas através de XSW.

### INTERAÇÃO DE FÁRMACOS COM SISTEMAS LIPÍDEOS/ÁGUA: ESTUDO ESTRUTURAL

LEIDE PASSOS CAVALCANTI, IRIS L. TORRIANI  
*Instituto de Física 'Gleb Wataghin', UNICAMP,  
Campinas, SP, Brasil*

Lipídeos e sistemas lipídeo/água apresentam um variado mesomorfismo. As mesofases lamelares de sistemas simples, como lipídeos naturais ou sintéticos, sejam puros ou misturados, fornecem um modelo racional, que serve de base para estudar sistemas mais complexos destinados a aplicações bioquímicas, médicas ou industriais. A relação entre estrutura molecular e comportamento da mesofase em estudo é estabelecida, geralmente, através de diagramas de fase que representam a composição relativa de fases coexistentes para uma temperatura dada. É importante determinar parâmetros composicionais que podem ser adotados na formulação de fármacos encapsulados ou com propriedades de liberação controlada. Em experiências anteriores estudamos os sistemas dipalmitoilfosfatidilcolina (DPPC)/cardiolipina (CL) com incorporação de elipitina (ELPT), um alcalóide de ação anti-cancerígena, verificando que a presença de lipídeos aniônicos, como a CL, favorecem a incorporação da ELPT nos sistemas de lipídeos mistos DPPC/CL. Neste trabalho utilizamos a difração de raios-X para identificar e caracterizar estruturalmente as transições de fase encontradas nos sistemas DPPC/CL e DPPC/CL/ELPT, com o objetivo de estabelecer relações estrutura-atividade do fármaco em questão. As medidas foram realizadas em um intervalo de temperatura de 25°C a 85°C com um arranjo experimental que permite obter os diagramas de difração de raios-X "in-situ". Com esse arranjo foi possível monitorar as reflexões lamelares correspondentes a espaçamentos da ordem de 60Å e o halo difuso devido à distância entre as cadeias acílicas que são indicadores da transição entre a fase gel e a fase líquido-cristalina.

CNPq.

### TEMPERATURE AND IONIC STRENGTH DEPENDENT LIGHT SCATTERING OF DMPG DISPERSIONS

KARIN A. RISKE, MARIA TERESA LAMY-FREUND  
*Institute of Physics, Universidade de São Paulo, SP*

MÁRIO J. POLITI

*Institute of Chemistry, Universidade de São Paulo, SP*

WAYNE F. REED

*Department of Physics, Tulane University, New Orleans,  
LA, USA*

The temperature dependence of the intensity of light scattered by aqueous dispersions of the anionic lipid DMPG (dimyristoyl phosphatidylglycerol) was studied at different ionic strengths. The lipid main transition, gel-liquid crystal, can be well monitored by a sharp decrease in turbidity. As expected, the temperature of the main transition ( $T_m$ ) was found to increase with the increase of the ionic strength. For low ionic strength, a DMPG second temperature transition, named post-transition, can be monitored by both an increase in light scattering and a decrease in conductivity. Zimm plot analysis indicates that below  $T_m$  the liposomes tend to aggregate, yielding a negative second virial coefficient  $A_2$ , and particles of large molecular weight. At the phase transition, parallel to the decrease in turbidity, there is an increase in the sample conductivity,  $A_2$  becomes positive and the particle molecular weight decreases, indicating a non-aggregated state. Moreover, at the post-transition ( $T_p$ )  $A_2$  becomes very small, and the molecular weight increases again. Opposite to the main transition on the post-transition could not be detected by spin labels placed either at the membrane surface, or in the bilayer core. Considering an increase in area per lipid headgroup upon the main transition, and the Gouy-Chapman-Stern model, it was possible to show that the main transition increases the vesicle degree of dissociation, hence increasing the ion concentration in solution. However, within the framework of that simple model, it was necessary to consider different  $\text{Na}^+$ - $\text{PG}^-$  association constants, in the gel and liquid phases, to explain an increase in vesicles repulsion upon the main transition. The mechanisms governing the post-transition are even less clear.

## BIOFÍSICA (Instrumentação Biomédica)

### BIOFÍSICA (Instrumentação Biomédica e Biomagnetismo) – 12/06/97

#### Evidência de material superparamagnético em abdomen de *Apis mellifera*

DARCI M. ESQUIVEL, ELIANE WAJNBERG, LEA J. EL - JAICK

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - Rio de Janeiro*  
MARILIA P. LINHARES

*Centro de Ciências do Estado do Rio de Janeiro - Rio de Janeiro*

Estudos de orientação de abelhas no campo geomagnético motivaram a busca de material magnético biomineralizado. Microscopia Eletrônica de pelos abdominais e da região subcutânea antero-dorsal do abdomen de *Apis mellifera* sugeriram que as partículas de magnetita observadas podem ser superparamagnéticas e monodominios (H. Schiff. (1991) *Comp. Biochem. Physiol.* 100A (4), 975-85). Ressonância Paramagnética Eletrônica-RPE tem sido utilizada como uma técnica adequada para analisar a estabilidade e as propriedades magnéticas de materiais ferromagnéticos. Este trabalho apresenta um estudo por RPE de uma amostra de abdomens de *Apis mellifera*, desidratados, amassados comparada com uma mesma amostra liofilizada. Medidas foram feitas na faixa de temperatura de 2K a 290K. Os espectros de RPE das três séries de medidas, na região de  $g = 2$ , variam de uma forma isotrópica a temperaturas acima de 170K, para uma forma completamente anisotrópica em temperaturas abaixo de 30K. Este comportamento é característico de partículas superparamagnéticas e pode ser analisado em função da dependência da distância entre os picos extremos das linhas de RPE, DH, com a temperatura (Y. L. Raikher and M. I. Shliomis. (1994) *Relaxation Phenomena in Condensed Matter*, Ed. W. Coffey, J. Wiley & Sons). DH apresenta um mínimo numa temperatura,  $T_{min}$ , que está relacionada com a razão entre a energia magnética, dependente do volume das partículas, e a energia térmica. Nossos resultados mostram um  $T_{min}$  de 90K. Considerando partículas de magnetita com simetria axial calculamos um diâmetro médio de 130Å. Este valor concorda bem com a faixa determinada por H. Schiff (ref acima) de 100-200Å.

#### Um Novo Biosusceptômetro AC para Medida do Tempo de Esvaziamento Gástrico

ULISSES JOAREZ SANTANA, OSWALDO BAFFA FILHO, EDER REZENDE  
F.F.C.L.R.P. - USP

Medidas de esvaziamento gástrico são de grande importância para a avaliação do estado funcional do estômago. Usualmente essas medidas são realizadas através de técnicas invasivas ou de métodos que utilizam radiação ionizante, empregando um alimento teste radioativo ou dotado de um agente de contraste ao raio-X. O nosso grupo tem investigado uma metodologia alternativa para a medida do esvaziamento gástrico empregando marcadores magnéticos. Um biosusceptômetro AC foi desenvolvido e utilizado com sucesso no estudo da motilidade gastrointestinal, incluindo o esvaziamento gástrico (1,2,3). Com o objetivo de eliminar alguns inconvenientes do sistema anterior e aumentar a sensibilidade de detecção de um alimento teste magnético, estamos investigando uma nova configuração de bobinas para esse biosusceptômetro AC. Nesse caso o sujeito deverá ficar posicionado entre as bobinas de excitação e detecção, o que deverá permitir uma melhor sensibilidade. Estudos com simuladores contendo um alimento teste já foram realizados comprovando o aumento de sensibilidade. No presente, estudos pilotos com voluntários normais estão em progresso com o objetivo de se avaliar a adequação do sistema. 1-An AC Biosusceptometer to Study Gastric Emptying. J. R. Miranda, O. Baffa, R. B. de Oliveira e N. M. Matsuda. *Med. Phys.* 19(2):445-448(1992). 2-Analysis and Development of a Simple AC Biosusceptometer for Orocaecal Transit Time Measurement. O. Baffa, R. B. Oliveira, J. R. Arruda Miranda e L. E. A. Troncon. *Med. Comput.* 33:353-353 (1995). 3-Evaluation of a Biomagnetic Technique for Measurement of Orocaecal Transit Time. R. B. Oliveira, O. Baffa, L. E. A. Troncon, J. R. A. Miranda e C. R. Cambrea. *Eur. J. Gastroent. Hepatol.* 8:491-496 (1996).

#### Automação do Sistema de Análise de Transparência de Córneas "In Vitro" para Utilização em Bancos de Olhos

CARLOS ROBERTO DE CARVALHO

*Laboratório de Física Oftálmica - FMRP - USP*

CAIO CHIARADIA

*Laboratório de Física Oftálmica - FMRP-USP*

JOSEMILSON DE M. BISPO

*FFCLRP-USP e Laboratório de Física Oftálmica - FMRP-USP*

LILIANE VENTURA, SIDNEY JÚLIO DE FARIA E SOUSA

*Laboratório de Física Oftálmica e Departamento de Oftalmologia - FMRP-USP*

Um sistema de avaliação da transparência de córneas doadas (espectro de transmissão de córneas "In Vitro" no intervalo do visível - 400-800nm - intervalo que o

olho humano consegue detectar e portanto, é o intervalo que interessa na avaliação da transparência da córnea) está sendo desenvolvido pelo Laboratório de Física Oftálmica da Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto - USP (vide trabalho de Bispo J.M. et al). Neste sistema ótico está sendo implementado um sistema de automação que é o escopo deste trabalho. O sistema de automação consiste em coletar os dados provenientes de um CCD linear (2048 fotodiodos) e dispô-los num micro computador do tipo PC. Um "software" de avaliação do espectro de transmissão da córnea fornecerá o laudo quanto à sua transparência em respeito à sua indicação ao transplante. As curvas geradas pela córnea avaliada serão comparadas com uma curva padrão inserida no "software". O "software" final deverá estar em ambiente "windows" de forma que seja de fácil manipulação pelos usuários do Banco de Olhos. Atualmente o "software" compara as curvas e estudos estão sendo realizados junto aos médicos responsáveis e pessoal do Banco de Olhos do Hospital das Clínicas de Ribeirão Preto para a padronização dos laudos. Uma das dificuldades do sistema é a disponibilização dos dados (quantidade muito elevada de dados proporcionada pelo CCD em curto intervalo temporal) no monitor e que está sendo solucionada com uma eletrônica apropriada. Nos próximos meses o sistema de coleta de dados deverá estar em pleno funcionamento e o "software" deverá estar proporcionando condições de ser utilizado pelos técnicos. Todo o sistema está sendo desenvolvido em Delphi2 de forma que o sistema poderá a longo prazo ser integrado ao sistema de contagem de células endoteliais (vide trabalho de Ventura, L. et al).

### **Desenho Óptico para Sistema de Magnificação de Imagens de Células Endoteliais de Córneas "In Vitro" para Utilização em Bancos de Olhos**

FLÁVIO ISAAC, PAULO EDUARDO MARTINS RIBEIRO JÚNIOR

*Laboratório de Física Oftálmica - FMRP-USP*

SIDNEY JÚLIO DE FARIA E SOUSA, LILIANE VENTURA

*Laboratório de Física Oftálmica e Departamento de Oftalmologia - FMRP-USP*

Sistemas óticos para avaliação das córneas doadas para o Banco de Olhos de Ribeirão Preto estão sendo desenvolvidos pelo Laboratório de Física Oftálmica da Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto - USP. Os dois sistemas em desenvolvimento são: [1] o de contagem automática de células endoteliais (vide trabalho de Ventura, L. et al); e [2] o de avaliação do espectro de transmissão da córnea no visível (400-800nm) (vide trabalho de Bispo, J. M. et al);. Ambos os sistemas são indispensáveis e conclusivos na avaliação ótica das córneas para um laudo final considerando a indicação da mesma ao transplante. Desta forma, no presente tra-

balho, estamos realizando projetos óticos para ambos os sistemas considerando os seguintes aspectos: para o sistema [1] um projeto ótico está sendo realizado e consiste em projetar o sistema de magnificação da imagem para até 400X. Este sistema deverá ser implementado em uma Lâmpada de Fenda (instrumento ótico de aumento de 40X utilizado em consultórios oftalmológicos para variados fins e de custo relativamente baixo) e deverá desempenhar as funções de um microscópio especular (equipamento importado que analisa exclusivamente as células endoteliais e possui alto custo). Para o sistema [2], o projeto ótico consiste em otimizar a disposição dos componentes óticos, proporcionando a melhor resolução para o sistema (fazer com que apenas os comprimentos de onda no visível, proporcionados pelo prisma de dispersão atinjam o CCD linear) e tornando-o compacto para a sua posterior implementação no Banco de Olhos para uso rotineiro. Utilizamos o "software" ZEMAX para os projetos óticos e resultados para o sistema [1] estão sendo obtidos. Otimizações estão sendo realizadas e um conjunto ótico proporcionando uma magnificação da imagem de 300X já está sendo testada no sistema experimental. Para o projeto [2] ainda não temos resultados.

### **Sistema Computacional de Contagem Automática de Células Endoteliais de Córneas "In Vitro"**

CESAR AUGUSTO CARDOSO CAETANO

*Laboratório de Física Oftálmica - FMRP-USP e Faculdade de Filosofia Ciências e Letras de Ribeirão Preto - USP*

SIDNEY JÚLIO DE FARIA E SOUSA

*Laboratório de Física Oftálmica - FMRP-USP e*

*Departamento de Oftalmologia - FMRP-USP*

EDUARDO BRESCANSIM DE AMÔRES, PAULO

EDUARDO MARTINS RIBEIRO JÚNIOR, FLÁVIO ISAAC

*Laboratório de Física Oftálmica - FMRP-USP*

LILIANE VENTURA

*Laboratório de Física Oftálmica - FMRP-USP e*

*IFSC-USP*

Uma das maneiras de se avaliar se uma córnea humana é viável para o transplante é através da análise de suas células endoteliais (células que mantêm a transparência da córnea). Uma córnea com um bom endotélio possui em torno de 2500-3000 células sadias/mm<sup>2</sup>. Neste trabalho estamos desenvolvendo um sistema automatizado para contagem destas células para ser utilizado em Banco de Olhos. Através de um sistema ótico desenvolvido, ( vide trabalho de Ventura, L. et al), a imagem das células da córnea "In Vitro" são capturadas por um detector CCD de alta resolução e a imagem é enviada para um PC onde são guardadas em arquivos do tipo BMP, gravadas em vários tons de cinza. Estas imagens apresentam-se borradas e com pouca nitidez; o que se deseja é obter o contorno bem definido das células endoteliais, para que se possa contá-las precisamente.

Para cada "pixel" da imagem, está associado um valor numérico, que determina o tom de cinza que este ponto deve ter. Tratando este valor como sendo o valor de uma função, utiliza-se o Laplaciano sobre estes valores, para se detectar os contornos celulares; a nova imagem é guardada então em um novo arquivo BMP. As imagens ainda apresentam-se inadequadas para a contagem automática, sem a interação do usuário, porém já se é possível realizar a contagem interativa das células, devido ao melhoramento obtido na qualidade da imagem.

#### **Desenvolvimento de um Sistema de Análise do Espectro de Transmissão de Córneas Doadas para Utilização em Bancos de Olhos**

JOSEMILSON DE M. BISPO

*FFCLRP-USP e Laboratório de Física Oftálmica - FMRP - USP*

CARLOS ROBERTO DE CARVALHO, CAIO CHIARADIA  
*Laboratório de Física Oftálmica - FMRP- USP*

SIDNEY JÚLIO DE FARIA E SOUSA

*Laboratório de Física Oftálmica e Departamento de Oftalmologia - FMRP-USP*

LILIANE VENTURA

*Laboratório de Física Oftálmica - FMRP - USP e IFSC - USP*

A aprovação da córnea para ser indicada ao transplante depende de vários fatores e um deles é a transparência da córnea, ou seja, do espectro de transmissão da mesma. Para tal fim está sendo desenvolvido um sistema para as medidas do espectro de transmissão das córneas "in vitro", em seu meio de conservação, no intuito de se padronizar e objetivar os laudos finais de um Banco de Olhos. O sistema de medida do espectro de transmissão da córnea proposto, consiste em projetar uma luz branca colimada sobre um prisma de dispersão. O feixe de luz, dividido em suas várias comprimentos de onda, incide sobre a córnea e o espectro de transmissão da mesma é coletado por um detector CCD linear (2048 fotodiodos) proporcionando uma resolução de 0,2 nm no espectro visível (400 - 800 nm). Uma das dificuldades encontradas no sistema é a sua calibração. Desta forma estamos utilizando amostras, com linhas no visível conhecidas, e através da comparação dos gráficos gerados por um espectrofotômetro comercial, alinhamos o sistema através de um micrômetro. Um sistema de coleta de dados e um "software" dedicado está sendo desenvolvido (vide trabalho de Carvalho, C.R. et al).

#### **Detecção de Campos Magnéticos Gerados pelo Estômago-Magnetogastrografia**

ÉDER REZENDE MORAES, OSWALDO BAFFA

*Departamento de Física e*

*Matemática-FFCLRP-USP-Ribeirão Preto*

JOSÉ RICARDO DE ARRUDA MIRANDA

*Departamento de Física e Biofísica-IB-UNESP-Botucatu*

RICARDO BRANDT DE OLIVEIRA

*Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto-USP*

O estômago apresenta constantemente uma Atividade Elétrica Básica (AEB) de frequência da ordem de 0,05 Hz (3 ciclos/min.), esta pode ou não estar associada com uma atividade mecânica, a qual tem a mesma frequência e acompanha a propagação da onda elétrica ao longo do estômago, esta atividade mecânica surge espontaneamente a cada 90 min ou devido a ingestão de alimentos. Neste caso o fenômeno persiste até que o estômago seja completamente esvaziado, e esta atividade elétrica recebe o nome de Atividade Elétrica de Resposta (AER). A frequência e amplitude da AER variam de acordo com o tipo e conteúdo energético. A monitoração desses parâmetros tem sido estudada com o objetivo de compreender melhor este processo. Medidas elétricas de potencial de superfície e de pressão com sondas tem sido as principais fontes de informação. Estes métodos apresentam como inconveniência o fato de serem invasivos e/ou pouco precisos. A medida do campo magnético produzido pela AEB e AER (magnetogastrografia-MGG) pode apresentar vantagens em relação à estes métodos. Realizamos medidas em 17 indivíduos sem patologias gastrointestinais aparentes, avaliamos o efeito na AER após ingestão de um copo de leite integral, contra a AEB do mesmo indivíduo em jejum. Para isto adquirimos o sinal da AEB por 10 minutos e logo após a ingestão do leite adquirimos o sinal por outros 10 minutos. A aquisição destes sinais foi realizada através da detecção do campo magnético gerado pela AEB e AER. Utilizamos para isto um biogradiômetro supercondutor baseado num SQUID-DC com gradiômetro de linha de base de 7 cm e 2,54 cm de diâmetro, desenvolvido com características específicas para obtenção de sinais do trato gastrointestinal. O MGG foi detectado em todos os voluntários e uma análise espectral do sinal permitiu identificar a componente principal.

#### **Ação de um Fármaco Sobre a Atividade de Contração Gástrica Estudada por Biosusceptometria AC.**

JOSÉ RICARDO DE ARRUDA MIRANDA, ROGERIO MORAES

*Departamento de Física e Biofísica*

*-IB-UNESP-Botucatu-SP*

OSWALDO BAFFA

*Departamento de Física e Matemática*

*-FFCLRP-USP-Ribeirão Preto-SP*

RICARDO BRANDT DE OLIVEIRA

*Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto - USP-Ribeirão Preto-SP*

A medida da atividade de contração gástrica (ACG) empregando a técnica de biosusceptometria AC (BAC) apresenta uma boa relação sinal/ruído. Registros tem-

porais relativamente longos podem ser obtidos sem muita dificuldade. Este acompanhamento temporal da ACG é importante tanto para o diagnóstico quanto para estudos básicos. Nesse trabalho feito do fármaco Buscopan sobre a ACG foi estudado utilizando-se o método da BAC. O biosusceptometro AC é constituído de um arranjo gradiométrico de primeira ordem tanto para a excitação quanto para a detecção. Este arranjo proporciona uma grande sensibilidade para pequenas variações da distancia do alimento teste magnético ao sensor. As medidas foram realizadas em 14 voluntários, após a ingestão de uma refeição de prova magnética, na posição vertical, com o sensor posicionado sobre a região epigástrica e soro fisiológico instalado em veia periférica. Medidas de controle foram realizadas antes, depois e simultaneamente à aplicação da droga. Os sinais foram filtrados e analisados em ambiente Matlab. A observação da variação na amplitude da ACG devido ao efeito da droga foi realizada comparando-se os valores de pico-a-pico do sinal registrado e também os valores da intensidade espectral obtidos das FFT dos sinais antes e após a aplicação da droga. Os resultados demonstram que este método foi capaz de evidenciar a percentagem de variação em 100% dos voluntários, o que indica uma boa performance desta técnica para observação do efeito de fármaco na ACG.

Apoio: FAPESP, CNPq e CAPES

### CONSTRUÇÃO DE UM SISTEMA GRADIOMÉTRICO COM MAGNETÔMETROS FLUXGATES PARA MONITORAR TRAÇADORES MAGNÉTICOS DENTRO DE ÓRGÃOS HUMANOS

ANTONIO ADILTON O. CARNEIRO, OSWALDO BAFFA FILHO, PAULO LOUREIRO DE SOUZA, CARLOS F. O. GRAEFF

*Departamento de Física e Matemática - FFCLRP/USP*

JOSÉ RICARDO DE A. MIRANDA

*Departamento de Física e Biofísica - IBB/UNESP*

Traçadores magnéticos podem ser monitorados no interior de determinados órgãos humanos para fornecer informações tanto de quantidade e localização quanto funcionais. Com o objetivo de monitorar traçadores magnéticos no interior do estômago com a finalidade de estudar o grau de desordem e randomização destas partículas após serem previamente magnetizadas, foram desenvolvidos dois sistemas gradiométricos com quatro detectores de fluxo saturado (Fluxgate). Com este sistema, foi possível minimizar pequenas variações de campo magnéticos devido a presença de gradientes de campos ambientais e o do intenso campo de excitação. Cada gradiômetro consiste de dois sensores colocados na mesma posição e próximos um do outro (*linha de base = 10 cm*) de modo a medirem os mesmos valores de campos ambientais. O sensor que estiver

mais próximo da fonte de estudo medirá um sinal mais intenso e a diferença dos dois sinais dará como resultado o sinal do campo remanente da fonte em estudo, cancelando assim os ruídos externos. Este sistema está sendo utilizado para estudos em gastroenterologia. As medidas são realizadas com o sujeito em decúbito dorsal e um pulso de campo magnético externo é aplicado na direção perpendicular ao dorso. Os dois gradiômetros são posicionados na direção do campo remanente sendo um na parte superior e outro na parte inferior da região gástrica do voluntário. O traçador magnético (TM) utilizado nestes estudos é a magnetita em pó com diâmetro menor que  $125\mu\text{m}$ . 3g deste material é misturado com 100 ml de iogurt para o preparo do alimento teste. Após a magnetização dos TMs no estômago, o campo remanente das pequenas partículas é acompanhado no tempo, e a randomização desse campo magnético em torno da direção do campo magnetizante fornece informações quanto ao processo de mistura nesse órgão.

### CONTROLE EXTERNO MICROCONTROLADO DO RÍTMO CARDÍACO

CARLOS EDUARDO FORMIGONI, CARLOS ALBERTO PELÁ

*Universidade de São Paulo - FFCLRP - Centro de Instrumentação - CIDRA*

ANTONIO VITOR M. JUNIOR

*Universidade de São Paulo - FMRP - Departamento de Cardiologia*

A necessidade de um pronto atendimento em situações de risco cardíaco eminente em pacientes com determinadas patologias cardíacas, genericamente chamados taquicárdicos ou bradicárdicos levou-nos a desenvolver uma unidade portátil que possibilitasse um pronto atendimento nestas situações. Sendo assim esta unidade é dotada de um sistema eletrônico baseado no microcontrolador 8051, com conversor analógico digital de doze bits para aquisição do sinal de ECG do paciente e uma interface de potência que controla a aplicação de pulsos de curta duração (20 ou 40 ms - programáveis). Estes pulsos elétricos são entregues ao paciente através de eletrodos com área de cem centímetros quadrados que são posicionados na parede torácica contralateralmente. O sinal de ECG é captado através da derivação MC5 que propicia uma boa amplitude do complexo QRS. O sinal é processado para que o sistema consiga saber como aplicar o pulso fora do chamado período 'refratário' (segmento R-S) que poderia causar a fibrilação. Os testes foram realizados em cachorros com peso médio de 8 quilogramas, anestesiados com Nenbutal a 30 mg por quilograma de peso. Um relaxante muscular foi usado para maior conforto do animal (Ronpum: 1 miligrama por 10 quilogramas de peso). A estimulação média ficou em torno de 110 mA á 235 volts com 20 milissegundos de duração por pulso. A

aplicação em humanos é possível com a implementação de sistemas de proteção e testes posteriores.

### SISTEMA DE ESTIMULAÇÃO CARDÍACA TRANS-ESOFÁGICA

CARLOS EDUARDO FORMIGONI, CARLOS ALBERTO PELÁ

*Universidade de São Paulo - FFCLRP - Centro de Instrumentação - CIDRA*

ANTONIO VITOR M. JUNIOR

*Universidade de São Paulo - FMRP - Departamento de Cardiologia*

Neste trabalho foi desenvolvido um equipamento capaz de realizar a estimulação trans-esofágica. Este método, útil para testes com pacientes que foram submetidos à implante de marca-passo ou possíveis candidatos ao implante, baseia-se na aplicação de um campo elétrico de intensidade e duração controladas, através de um catéter desenvolvido para este propósito com 80 centímetros de comprimento e 3 milímetros de espessura cujos anéis de contato são feitos em aço inox e o corpo em poliuretano atóxico. Este catéter é introduzido através da narina, e é posicionado na parede do esôfago com o auxílio do sistema de registro de ECG (digital) onde a posição ideal para o início dos testes de estimulação se dá com o registro da maior amplitude possível do sinal de ECG. A distância do eletrodo fica em média 8 milímetros do pericárdio, na altura do atrio. Neste tipo de estimulação é muito difícil estimular-se o ventrículo devido a posição anatômica. Um aumento de potência no equipamento propiciaria a captura ventricular, mas poderia causar danos ao esôfago. Em testes realizados com indivíduos voluntários e patológicos observou-se a captura ventricular com potenciais da ordem de 12 a 16 volts. A captura ventricular é um fato isolado nesta técnica, porém a captura do atrio é mais comum e nestes testes foi alcançada com potenciais da ordem de 9 volts em média. O equipamento permite ainda registro de ECG, sincronismo de aplicação do pulso com a onda R e ajustes de largura, duração e intensidade do pulso.

### INSTRUMENTAÇÃO PARA AVALIAÇÃO DO SISTEMA RESPIRATÓRIO PELA TÉCNICA DE OSCILAÇÕES FORÇADAS: ESTUDO DA RAZÃO DE REJEIÇÃO DE MODO COMUM EM SISTEMAS DE MEDIDA DE PRESSÃO

PEDRO LOPES DE MELO

*Programa de Engenharia Biomédica - COPPE/UFRJ*

*Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais - COPPE/UFRJ*

MARCELO MARTINS WERNECK, ANTONIO

GIANNELLA-NETO

*Programa de Engenharia Biomédica - COPPE/UFRJ*

A técnica de oscilações forçadas é empregada na avaliação das características mecânicas do sistema respiratório, apresentando como características principais um custo relativamente baixo, proporcionar uma avaliação rápida e não invasiva, e exigir uma cooperação mínima do paciente. As aplicações desta técnica incluem a análise da mecânica ventilatória infantil, detecção de problemas respiratórios e avaliação de pacientes ventilados mecanicamente. Valores inadequados de CMRR podem ser responsáveis por erros grosseiros na avaliação da impedância respiratória. Neste caso, diferenças entre pacientes normais e obstruídos podem ser mascaradas, inviabilizando o uso clínico da técnica. No presente trabalho, primeiramente descrevemos, de uma maneira geral, a técnica de oscilações forçadas e discutimos a importância da CMRR para a otimização do projeto da instrumentação empregada com esta técnica. A seguir, apresentamos um modelo análogo elétrico que auxilia na descrição do comportamento da CMRR nestes dispositivos. Os resultados produzidos em transdutores de pressão (Honeywell 163PC, Honeywell 176PC, Celesco LCVR e Elema-Schönander EMT 32) adaptados a tubos de conexão com 100 cm, 50 cm e 25 cm são descritos e discutidos com base no modelo proposto e nos resultados previamente reportados na literatura. A análise dos resultados evidenciou uma diferença significativa entre os dispositivos estudados e uma grande influência das conexões entre o transdutor e o processo. Estes resultados são consistentes com o modelo elétrico proposto, confirmando a validade deste. Finalmente, identificamos um sistema de medida de pressão adequado à implementação da técnica de oscilações forçadas na faixa entre 2 e 32 Hz.

### BIOFÍSICA (Instrumentação Biomédica e Biomagnetismo) - 13/06/97

#### TÉCNICAS DE RECONHECIMENTO DE PADRÕES APLICADA AO DIAGNÓSTICO DE LESÕES ATÉROSCLERÓTICAS

HASSAN SIDAQUI, MARCOS TADEU T. PACHECO  
UNIVAP

A fluorescência induzida por laser e o espalhamento Raman são poderosas ferramentas de análise e diagnóstico de placas ateroscleróticas na parede arterial. A espectroscopia Raman no infravermelho fornece uma grande quantidade de informações que refletem o estado das lesões no tecido. Em nosso trabalho, técnicas de inteligência artificial são utilizadas para desenvolver ferramentas computacionais auxiliando o especialista humano no

processo de análise e diagnóstico de placas ateróticas. O sistema proposto consiste principalmente de um analisador de espectros capaz de reconhecer os picos e extrair suas principais características: posição, intensidade, forma, etc. A comparação das características obtidas (features) com padrões predeterminados permite a análise e a classificação de uma quantidade importante de espectros. O sistema apresenta uma estrutura modular envolvendo os seguintes passos: Espectro -> Filtragem -> Extração das Características (Features) -> Reconhecimento -> Diagnóstico. Ferramentas da Lógica Fuzzy foram utilizadas afim de poder processar o conhecimento médico essencialmente qualitativo levando em consideração a existência de características difusas. Os primeiros testes obtidos a partir de 70 amostras revelam a capacidade do sistema de emular o comportamento especialista médico. A ferramenta computacional desenvolvida deverá constituir a base de um ambiente "inteligente" de auxílio ao diagnóstico médico.

### MÉTODO PARA DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS ÓPTICOS DE TECIDOS BIOLÓGICOS

LANDULFO SILVEIRA JR, PAULO RODRIGUES BARGO,  
RENATO AMARO ZÂNGARO, MARCOS TADEU T.  
PACHECO  
UNIVAP

Este trabalho objetiva a implementação de um método para a determinação de parâmetros ópticos de tecidos biológicos em diferentes comprimentos de onda, através da técnica de espalhamento elástico. Desta forma, pode-se obter os coeficientes de absorção,  $\mu_a$ , e de espalhamento,  $\mu_s$ , do sinal retroespalhado por amostras de tecido coronariano humano. Estes parâmetros são bastante úteis no modelamento da distribuição da radiação nos tecidos, visando aplicações espectroscópicas. Para tal, foi desenvolvido um cateter de fibras ópticas, composto por 20 fibras ópticas dispostas em linha, sendo que a fibra de excitação do tecido está posicionada na extremidade do conjunto. As fibras ópticas apresentam diâmetro de núcleo de  $200\mu\text{m}$ , e distância média entre núcleos de aproximadamente  $500\mu\text{m}$ , perfazendo um comprimento total de aproximadamente 10 mm. Os experimentos utilizaram um laser de He-Ne, emitindo em 633 nm e potência de 1 mW, acoplado á fibra de excitação do cateter. O detector utilizado é um CCD de  $1024 \times 256$  pixels, permitindo a aquisição do sinal de todas as fibras coletoras simultaneamente. O tecido analisado foi um segmento de aorta/coronária humana. Uma vez obtida a curva experimental de reflexão difusa, determina-se a equação que melhor representa esta curva. Com esta equação, pode-se determinar os coeficientes  $\mu_a$  e  $\mu_s$ , pelo ajuste dos parâmetros à curva teórica de reflexão. Os resultados mostram que os dados extraídos das curvas são consistentes; para  $\lambda_{exc} = 633$  nm, o tecido coronariano apresentou  $\mu_a = 0,6 \text{ cm}^{-1}$

e  $\mu_s = 52 \text{ cm}^{-1}$ , contra  $0,5 \text{ cm}^{-1}$  e  $41 \text{ cm}^{-1}$  encontrados na literatura. Isto equivale a um desvio menor que 20%, quando comparados com a literatura, considerado satisfatório para tecidos biológicos. Um ítem a ser melhorado é o aumento do número de fibras de coleta, aumentando assim o número de pontos de interpolação. Esta mesma técnica vem sendo utilizada para determinação de parâmetros ópticos na região do infravermelho próximo, região que apresenta grande interesse para caracterização de tecidos biológicos.

### Sistema Automático de Análise de Células Endoteliais de Córneas Doadas para Utilização em Bancos de Olhos

LILIANE VENTURA  
Laboratório de Física Oftálmica - FMRP-USP e Instituto  
de Física de São Carlos - USP  
PAULO EDUARDO MARTINS RIBEIRO JÚNIOR,  
FLÁVIO ISAAC  
Laboratório de Física Oftálmica - FMRP-USP  
SIDNEY JÚLIO DE FARIA E SOUSA  
Laboratório de Física Oftálmica e Departamento de  
Oftalmologia - FMRP-USP

Um dos métodos de se avaliar a córnea doada para se fornecer um laudo final quanto à sua indicação ao transplante é através da análise de seu endotélio (camada unicelular que tem a função de desidratar a córnea e mantê-la transparente). Um bom endotélio possui 2500-3000 células sadias/ $\text{mm}^2$ . Atualmente, no Brasil, esta análise é feita através da Lâmpada de Fenda (equipamento de várias utilidades num consultório Oftalmológico, que proporciona uma magnificação do objeto de até 40X) apenas pela observação de seu aspecto. Desta forma, a avaliação torna-se extremamente subjetiva e não padronizada. Existem equipamentos apropriados para esta análise (microscópios espaciais, aumento de 250X), de custo extremamente alto, impossibilitando sua aquisição pelos Bancos de Olhos (apenas 01 Banco de Olhos brasileiro, dos 64 cadastrados, possui este equipamento). Assim, estamos desenvolvendo um sistema ótico de magnificação da imagem do endotélio "in vitro" para implementação em Lâmpada de Fenda (equipamento disponível em todos os Bancos de Olhos), que apresenta a imagem do endotélio em um monitor de um PC e a seguir esta imagem é tratada e a contagem das células é realizada (vide o trabalho de Caetano, C. A. C. et al). O sistema atualmente apresenta um aumento de 300X e várias córneas estão sendo testadas. Ainda o sistema de iluminação da amostra para proporcionar uma imagem adequada está sendo melhorado. Resultados bastante satisfatórios para a visualização das células foram obtidos, porém ainda necessita-se adequar a iluminação da amostra para que o tratamento computacional seja melhorado. O sistema está sendo utilizado em caráter experimental no Banco de Olhos do Hospital das Clínicas de Ribeirão Preto.

### FLUORESCÊNCIA EM CÉLULAS DE ADENOCARCINOMA MAMÁRIO DE RATO ATRAVÉS DA PROTOPORFIRINA IX (PP IX)

SÉRGIO KANEO FURUZAWA, STEVEN L. JACQUES,  
RENATO AMARO ZÂNGARO, MARCOS TADEU T. PACHECO

UNIVAP- Univ. Texas

A protoporfirina IX tem sido utilizada como fotossensibilizante na terapia fotodinâmica através da aplicação de seu precursor, o ácido aminolevulnico (5-ALA), em diferentes tipos de células. Após a síntese do PP IX a partir do 5-ALA (200µg/ml), este receberá irradiação laser, o qual poderá produzir oxigênio singlete  $^1O_2$  que é um produto citotóxico, promovendo a morte celular, ou ainda podendo provocar o photobleaching do PP IX. A fluorescência em células de adenocarcinoma mamário de rato foram estudadas utilizando-se o método da videofluorescência. A videofluorescência foi realizada utilizando-se uma câmera CCD (SONY-Color) acoplada a um intensificador de luz ICCD-100F (Video-Scope International). As células foram irradiadas, utilizando-se a entrada inferior de iluminação de um microscópio invertido como entrada para o laser de Argônio (488nm). As imagens fornecidas foram tratadas a partir do programa Image-Pro (Image) e gravadas em fita. Células sem excesso de PP IX tiveram suas áreas calculadas a partir dos dados obtidos por este sistema. Foram medidas as fluorescências de concentrações de PP IX em solução de albumina e em água. A partir das imagens gravadas, pode-se observar o tempo de degradação do PPIX. Os parâmetros temporais obtidos são utilizados para o cálculo de dosimetria em células na terapia fotodinâmica. Observa-se que a fluorescência das células com PP IX não depende de sua área. E a fluorescência do PP IX em soluções de albumina ou água são em média iguais.

### IMAGEM DA HOMOGENEIDADE DE UM CAMPO MAGNÉTICO

D. TOMASI, B. FOERSTER, E. RIBEIRO AZEVEDO,  
H. PANEPUCCI, E. L. VIDOTO, B. MUNIZ

Universidade de São Paulo, Instituto de Física de São Carlos

As técnicas de imagem baseadas em RMN precisam de um campo magnético estático e homogêneo para obter-se uma boa relação sinal-ruído. O processo de homogeneização de um campo magnético é uma tarefa complexa e demorada, que requer muitas medidas e correções. Neste trabalho apresentamos uma técnica que permite fazer um mapa do campo magnético em 1 ou 2 minutos, utilizando-se uma sequência de spin-echo com dois pulsos de RF para preparação dos spins. Durante a fase de preparação os spins da amostra acumulam uma fase no plano transversal que é proporcional ao tempo de preparação e às variações locais no campo

magnético principal. Esta fase acumulada altera o sinal durante a leitura do eco resultando numa alternância de regiões claras e escuras (fase construtiva e fase destrutiva). As medidas foram feitas em um tomógrafo de baixo campo (500 Gauss) com um phantom esférico de 10 cm de raio preenchido com uma solução de sulfato de cobre à 5,0 mM. Os parâmetros da sequência de pulsos são: tempo de preparação  $\tau$  de 7,5 ms, tempo ao eco de 45 ms e tempo de repetição de 500 ms. Os resultados dos testes iniciais foram: variação de 360 ppm nos planos sagital e coronal centrais, e 240 ppm no plano transversal central.

### A Model For The Sources and the Calculation of the Magnetic Field Produced by a Biological Excitable Medium

L. C. MIRANDA, E. COSTA MONTEIRO, P. COSTA RIBEIRO

Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Caixa Postal 38071, Cep 22452-970, RJ

The lack of a more realistic physical description of the actual sources of the magnetic field generated by a biological excitable medium has led to the proposal of a simple model here presented. It has been taken into account some of the principal electrophysiological properties of any ordinary excitable biological cell. The excitation wave that propagates through a cardiac or neuronal tissue is the electrical activity responsible for the experimentally detected magnetic field. This model allows a simpler calculation of the biomagnetic field generated when compared to the conventional usage of the Biot-Savart law. From a macroscopical point of view, classical electrodynamics, more specifically the Ampere law, was applied to show that the problem, due to convective effects, can be reduced to the computation of the magnetic field generated by a moving polarized dielectric medium. This field is indistinguishable to the field produced by an equivalent magnetization oriented parallel to the depolarization wavefront. This model can be easily applied to calculate the field of the electrical activity of a neuronal or cardiac tissue. Here it is presented the application of the proposed model to the cardiac electrical activity. The comparison of the theoretical results to actual magnetic signals experimentally obtained from isolated rabbit atria validated the presented analytical calculation. The possibility of modeling the sources of the biomagnetic field is of great clinical relevance permitting a non-invasive assessment of major cardiac events through the magnetic image of the heart. Moreover, the proposed calculation model simplifies the numerical analysis improving the solution of the inverse biomagnetic problem.

**IDENTIFICATION OF TISSUE  
ACTIVATION DURING ATRIAL FLUTTER  
BY MAGNETIC MEANS USING A  
CELLULAR AUTOMATA MODEL**

E. COSTA MONTEIRO, L. C. MIRANDA, P. COSTA  
RIBEIRO

*Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica  
do Rio de Janeiro, Caixa Postal 38071, Cep 22452-970, RJ*

The non-invasive identification of heart tissue activation during periodic tachyarrhythmias like atrial flutter is a challenge for its clinical assessment. The conventional surface ECG tracing does not allow to determine the exact sequence of cardiac electrical events. Otherwise, through magnetic means, a non-invasive assessment of primary currents generated in the heart tissue can be achieved, since most magnetic field detected is produced by the primary currents propagating in the heart. A discrete cellular automation computer model was applied to simulate the excitation wave propagation characteristic of the fundamental mechanisms of atrial flutter arrhythmia. The magnetic field produced by the different simulated activation models has been calculated. As the atrial myocardium behaves electrophysiologically as a two-dimensional surface, a bidimensional cellular automata simulation is appropriate for the study of atrial flutter mechanisms. Atrial flutter is most predominantly associated to a reentrant excitation and less frequently to a rapid ectopic focus. Reentry may result from anatomical or functional mechanisms. The anatomical one presents a central anatomical conducting obstacle (the ring model). Contrasting, the functional circuits are defined by the electrophysiological properties of the cardiac tissue (the spiral model). These different propagation mechanisms have been simulated. The signal was computed for different positions in a plane parallel to the simulated grid for each propagation model. Isoamplitude maps were configured showing a line of minimum amplitude for the linear propagation of an ectopic focus; the characteristic single point of minimum amplitude for the circus movement; and for the spiral model a composite of both. For this latter, the presence of multiple radial lines of minimum spreading from the central minimum amplitude could demonstrate the existence of multiple preferential courses of activation toward the grid borders. Therefore, the different computational images obtained could identify the various tissue activation associated to the mechanisms of atrial flutter arrhythmia.

**Distinction Between Reentry Circuit and  
Ectopic Focus Mechanisms of Arrhythmias  
Through Simulated and Experimental  
Magnetic Studies**

E. COSTA MONTEIRO, L. C. MIRANDA, A. C.  
BRUNO, P. COSTA RIBEIRO

*Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica  
do Rio de Janeiro, Caixa Postal 38071, Cep 22452-970, RJ*

The exact electrical mechanism associated with sustained arrhythmias like cardiac flutter and fibrillation is still unclear. Most evidence points toward a reentry path, although the automatic disorder due to an ectopic focus is still considered. To evaluate the possibility of distinguishing between both activation mechanisms, synthetic and experimental studies are presented. The experimental model to evaluate the magnetic field generated by an ectopic focus was the isolated rabbit heart preparation maintained in sinus rhythm. The propagation generated by an ectopic focus is similar to the activation of the normal focus displaced on atrial tissue. For the experimental circus movement study, atrial flutter was induced in isolated rabbit hearts. The experimental procedures were performed using isolated rabbit hearts maintained in perfusion (Langerdorf's system). Magnetic measurements were carried out with a one-channel rf-SQUID magnetometer coupled to a second order gradiometer. The signals were digitally processed to configure the isofield and isoamplitude maps. The synthetic study to evaluate the experimental results was done using a bidimensional cellular automata computer model to simulate the different tissue activation mechanisms. The program consists of a grid of hexagonal cells considering the recovery time of the simulated cell with its spatial dispersion. Isofield maps have shown a dipolar configuration rotating in both experimental atrial flutter and circus movement simulation. They presented also the same behavior for the isoamplitude maps configuration, a single point of minimum oscillatory field. Constant direction of activation in the isofield map and a line of minimum oscillatory field instead of a single point in the isoamplitude map was observed for both experimental and synthetic linear propagation. This results show the potentiality of the non-invasive magnetocardiography to distinct between circus movement and focal impulse propagation associated to cardiac arrhythmias with its clear implications in electrophysiologic and clinical diagnostic studies.

## BIOFÍSICA (Sistemas Complexos)

### BIOFÍSICA (Simulações e Sistemas Complexos em Biologia) – 13/06/97

---

#### TOLERANCE AND AGEING IN THE IMMUNE NETWORK

RITA MARIA ZORZENON DOS SANTOS

*Universidade Federal Fluminense*

AMÉRICO TRISTÃO BERNARDES

*Universidade Federal de Ouro Preto*

In a recent work [1] we simulated for the first time the behaviour of the immune system according to the Jerne theory [2] proposed in 1974, i.e, the immune repertoire time evolution as a functional network formed by 20% of the lymphocytes of the immune repertoire (the other 80% are free to respond to the antigens). In our simulations we showed that the time evolution of this network is characterized by a complex dynamics of aggregation and disaggregation, and we have reproduced the main features of the response triggered by the antigen presentation.

In this work we simulate the effects of the multiple antigen presentation on this kind of system and discuss our results compared to some experimental ones. We consider two different cases: the periodic multiple presentation of a single antigen and the multiple presentation of different kinds of antigens. In the first case we reproduce the same kind of behaviour observed in experiments with mice: if we present the same antigen periodically, after some time the system will not respond (producing specific antibodies) to the antigen, leading to the tolerance of the system to the presented antigen. In the second case, we present different antigens for a very long time in different time intervals and we observe the behaviour expected on the ageing of the immune system: a certain rigidity to react to new antigens.

[1] Bernardes, A.T. and Zorzenon dos Santos, J. *Theor. Biol.*, in press;

[2] Jerne, N.K., *Ann.Imm. (Inst. Pasteur)* **125C**, 373 (1974);

---

#### A Suggested Model for the Origin of Mosaic Structure of DNA

CARLA GOLDMAN, ROBSON FRANCISCO DE SOUZA

*IFUSP*

In view of the critical behavior exhibited by a statistical model describing a one dimensional crystal containing isotopic impurities and the fact that for impurity mass parameter 3 times the host mass the critical temperature can attain very high values, we suggest that the mosaic (multiscale) structure displayed by certain nucleic acids (DNA) of eukaryotic organisms might have had its origins in a phenomenon of condensation of codons occurred at prebiotic conditions. An appropriate map of that model onto some of the DNA features allows one to predict temperature dependent power law behavior for both correlation functions and exon size distribution in binary sequences of nucleotides which are distinguished by their protein coding or noncoding functions. Preliminary studies of these quantities performed on intron-containing sequences from GenBank are presented. The results obtained for *Saccharomyces* chromosomes (SCCHR111, SCCHR119 and YSCCHRVIN) indicate that difference between decay powers of related correlation and exon size distribution for polynomial fitting curves are of order one, as predicted by our theoretical model. On this basis we are then lead to suggest: (i) that the mosaic structure might have had its origins on a condensation phenomena of codons that took place at prebiotic conditions, and (ii) this mosaic structure, being thermodynamically stable with respect to the distribution of coding and noncoding sequences, might be related to the biological stability of the genome of high organisms.

---

## BIOFÍSICA (Sistemas Complexos e Redes Neurais) – 13/06/97

### GENERALIZAÇÃO DO MODELO DO TRION

KARIM AQUERE FILHO, RITA M. C. ALMEIDA  
*IF-UFRGS*

JORGE A. QUILLFELDT  
*IB-UFRGS*

O Modelo do Trion foi proposto por Gordon Shaw e colaboradores para simular o comportamento cooperativo encontrado no cérebro dos mamíferos considerando a arquitetura indicada pelo Princípio Organizacional das Funções Corticais sugerida por Mountcastle. Considera-se uma rede unidimensional, onde cada um dos sítios pode assumir um dentre três estados de spin  $S_i = -1, 0, 1$  para  $i = 1, \dots, N$  e uma dinâmica sincrônica dada por

$$S_i(t) = \sum_j [V_{ij} S_j(t-1) + W_{ij} S_j(t-2)]$$

onde  $V_{ij}$  e  $W_{ij}$  são acoplamentos entre  $S_i$  e seus primeiros e segundos vizinhos em seus dois passos de tempo precedentes.

Nossa proposta é uma generalização deste modelo considerando a evolução do sistema governada pela seguinte equação dinâmica

$$S_i(t+1) = f[h_i(t)]$$

onde  $f$  é a função transmissão e  $h_i(t)$  é o campo local atuando em  $S_i(t)$ , definido como

$$h_i(t) = \sum_{k=0}^K \sum_{\langle j \rangle \neq i} J_{ij}(k) S_j(t-k)$$

onde  $J_{ij}(k)$  é a matriz sináptica que descreve a contribuição do estado do sistema no tempo  $t-k$  ao campo local no tempo  $t$ ,  $K$  é o número máximo de passos de tempo precedentes considerados e  $\langle j \rangle \neq i$  define a vizinhança de uma dada unidade  $S_i$ , desconsiderando a auto-interação. São apresentados resultados de uma análise da conectividade no tempo x conectividade espacial para grandes redes e verifica-se que o sistema mostra um comportamento dinâmico não trivial além de propriedades de recuperação de memória.

### DINÂMICA DE RECUPERAÇÃO DE MEMÓRIAS HIERÁRQUICAS NUMA REDE NEURAL DE Q ESTADOS.

JOSÉ ARTHUR MARTINS, WALTER KARL THEUMANN  
*UFRGS*

Usando aproximação probabilística estudamos um modelo de rede neural hierárquica[1] onde cada neurônio pode assumir  $Q$  estados de atividade. A geração de padrões e de seus ancestrais é feita por um processo Markoviano, onde a atualização dos padrões hierarquicamente correlacionados é feita pela regra de Hebb modificada,

$$J_{i,j} = \frac{1}{N} (\epsilon_1' \sum_{\mu_1}^{P_1} (\xi_i^{\mu_1} - a_1)(\xi_j^{\mu_1} - a_1) + \epsilon_2' \sum_{\mu_1}^{P_1} \sum_{\mu_2}^{P_2} (\xi_i^{\mu_1 \mu_2} - \xi_i^{\mu_1} a_2)(\xi_j^{\mu_1 \mu_2} - \xi_j^{\mu_1} a_2),$$

que memoriza os padrões ancestrais e seus descendentes

simultaneamente.

Assumimos que todos os padrões ( $\xi_i^{\mu_1}$ ) da primeira geração e um número finito  $S_2$  de  $P_2$  padrões da segunda geração ( $\xi_i^{\mu_1 \mu_2}$ ) com  $S_2 < P_2$  condensam. As equações exatas da dinâmica da rede neural, para os parâmetros de ordem relevantes são apresentados para o primeiro passo da dinâmica, usando  $Q = 3(1, 0, -1)$  resolvemos exatamente no limite de diluição extrema. As relações de recorrência para a atividade dinâmica (fração de neurônios diferentes de zero) e os overlaps da rede para a primeira e segunda gerações, sem ruído, com um dado padrão, originam três pontos fixos genéricos: Um ponto fixo de recuperação, um ponto fixo de desordem, que corresponde à atividade diferente de zero e overlap zero, e um ponto fixo "zero" onde todos os neurônios estão no estado zero. Uma análise dos pontos fixos para soluções com distribuição simétrica e assimétrica dos padrões é mostrada através de diagramas de fase da capacidade de armazenamento ( $\alpha$ ) em função do parâmetro de ganho ( $b$ ) para diferentes condições iniciais. Fizemos um estudo da influência da primeira geração na recuperação da segunda geração e observamos que existe uma competição entre as duas gerações, o que nos leva a um comportamento não-monotônico dos overlaps, analisamos também a influência da atividade dos padrões nesta competição.

[1] D. Bolle and J. Huyghebaert, Phys. Rev. E 52 (1995) 870.

### RECUPERAÇÃO DE MEMÓRIAS HIERARQUICAS NUMA REDE NEURAL CONEXA DE Q ESTADOS.

JOSÉ ARTHUR MARTINS, WALTER KARL THEUMANN  
UFRGS

Do estudo da termodinâmica numa rede totalmente conexa obtém-se as suas propriedades de equilíbrio. Uma característica importante em comparação com o modelo de diluição extrema é a existência de uma transição descontínua em  $T = 0$ , nos overlaps. No modelo diluído esta transição é contínua.

Neste trabalho o modelo de Hopfield totalmente conexo é modificado para introduzirmos padrões hierarquicamente correlacionados. Onde os estados são gerados por um processo Markoviano, onde a atualização dos padrões é feita pela regra de Hebb modificada, que memoriza os padrões ancestrais e seus descendentes simultaneamente. Usando teoria de réplica simétrica, e assumindo que todos os padrões da primeira geração ( $\xi_i^{\mu_1}$ ), e um número finito de padrões da segunda geração ( $\xi_i^{\mu_1\mu_2}$ ) condensam, encontramos uma expressão para energia livre, e as equações de ponto fixo dos parâmetros de ordem relevantes para um  $Q$  geral e a uma temperatura  $T$ . Para analisarmos o desempenho da rede nos detemos no caso  $Q = 3(1, 0, -1)$ , sem ruído. Usando soluções com distribuição simétricas e assimétricas dos padrões, fizemos um estudo das propriedades termodinâmicas da rede através da análise da importância dos ancestrais para recuperação dos padrões da geração dos padrões seguintes. Observamos que na solução simétrica existe uma competição entre a recuperação dos ancestrais e da geração seguinte, e no momento em que tornamos a rede assimétrica esta competição diminui, analisamos também a importância da atividade dos padrões na recuperação. Fizemos também uma comparação com os resultados encontrados no modelo de extrema diluição, dando ênfase para a importância da primeira geração na recuperação de padrões da segunda geração.

### APLICAÇÕES DA LÓGICA FUZZY EM BIOLOGIA E MEDICINA

NELI REGINA SIQUEIRA ORTEGA

IFUSP

EDUARDO MASSAD

FMUSP

Desde sua fundamentação teórica por Lotfi Zadeh nos anos sessenta, vários tem sido os campos de aplicação da Lógica não-binária, conhecida por *Fuzzy* (ou por sua tradução ainda não consagrada, de *nebulosa*), bem como de sua contrapartida operacional, a matemática dos conjuntos fuzzy. Sua grande aplicabilidade deve-se à sua capacidade de lidar com conceitos vagos. Desta forma, toda incerteza não estocástica pode ser tratada quantitativamente por esse poderoso instrumento

de análise. A lógica fuzzy fundamenta-se na determinação de graus de pertinência, ou seja, funções características que atribuem valores de pertinência a conjuntos fuzzy. A rigor, a lógica fuzzy é um superconjunto da lógica Booleana e diferencia-se desta por suas técnicas operacionais a nível da teoria dos conjuntos. Assim, por exemplo, operadores Booleanos como Intersecção e União são definidos em lógica fuzzy pelos operadores *Max* e *Min*. Além disso, em contraste com os conjuntos Booleanos, os subconjuntos fuzzy resultantes tem propriedades específicas como por exemplo  $A \cap A^c \neq \emptyset$  e  $A \cup A^c \neq X$  (conjunto Universo). Outra característica importante é a diferenciação da Lógica Fuzzy em relação à Teoria de Probabilidades. Em oposição à esta, as funções características fuzzy não somam necessariamente 1. Conceitos vagos são mais regras do que exceção em Biologia e Medicina. Desta forma, a Lógica Fuzzy apresenta-se como instrumento interessante, tanto em inferências causais como em aplicações específicas tais como *expert systems*.

### FORMAÇÃO DE ESTRUTURAS DISSIPATIVAS EM CÉLULAS DE DIÁLISE

KATYA MARIA O. DE SOUSA, GILBERTO

WEISSMÜLLER, PAULO M. BISCH

UFRJ

Estruturas dissipativas em células de diálise são obtidas em experimentos de osmocentrifugação zonal utilizando gradientes de densidade e amostras concentradas de dextrana azul e hemoglobina humana. Resultados anteriores demonstraram que o tipo de gradiente de densidade e a concentração de hemoglobina utilizada determinam o tipo de estrutura formada. Este trabalho tem por objetivo caracterizar a formação de estruturas dissipativas em células de diálise, utilizando outro de tipo de amostra além de hemoglobina, e verificar o perfil dos fluxos no interior da célula de diálise. A metodologia consta das seguintes etapas: 1) produção de membranas assimétricas de acetato de celulose; 2) obtenção das soluções de hemoglobina humana; 3) montagem de células de diálise, que compreende dois compartimentos um destinado a solução formadora do gradiente e outro destinado ao solvente; 4) obtenção de gradiente de densidade (Ficoll-sacarose) autogerados pelo processo de osmocentrifugação; 5) experimentos de osmocentrifugação zonal de amostras de hemoglobina humana, dextrana azul e indigo carmin; 6) digitalização e análise das imagens obtidas por fotografia durante os experimentos. Os resultados obtidos demonstraram que: i) foi observado estruturas com amostras de hemoglobina com concentração 96 e 103 mg/ml ii) nos experimentos em que foram utilizados amostras de dextrana azul e indigo carmin também foi observado a formação de bandas no compartimento contendo Ficoll-sacarose; iii) com os gradientes obtidos e utilizando o corante indigo carmin que é permeável a membrana de acetato de celu-

lose, não se observou a formação de estruturas espaço-temporais no compartimento destinado ao solvente. iv) com a análise de imagens é possível caracterizar as estruturas formadas, nos diferentes experimentos realizados, como o número dos picos e a distância entre eles.

### **ALZHEIMER E REDES NEURAIS, UMA PROPOSTA DE DIAGNÓSTICO CLÍNICO**

GILBERTO LUIZ DE SOUZA PAULA, ANTÔNIO  
CARLOS ROQUE DA SILVA FILHO  
FAMB/FFCLRP - USP

WILSON KRAEMER DE PAULA, SÍLVIA MARIA  
AZEVEDO DOS SANTOS  
Depto. de Enfermagem - CCS/UFSC

Desenvolvemos uma rede neural com aprendizado supervisionado tipo "Back Propagation" para avaliar a evolução clínica de idosos afetados pela doença de Alzheimer, tal evolução é dada pela observação das atividades do paciente (padrões de entrada) pelo seu cuidador, que deve convergir para padrões de diagnóstico (padrões de saída). A opção pelo aprendizado supervisionado, se dá ao fato de que a rede deve possuir a "plasticidade" necessária para se adaptar a cada caso clínico, deve aprender a reconhecer os padrões de diagnóstico para cada cliente. Tal instrumento tem fundamental importância pelo fato de sendo Alzheimer uma doença progressiva, o cliente geralmente evolui sua doença em seu domicílio onde o cuidador geralmente é um parente sem o necessário preparo técnico (Feuer - 1987). Este apoio tem sua finalidade na racionalização do uso do sistema de saúde, onde o acompanhamento à evolução da saúde do cliente se dá via a avaliação pelo profissional de saúde das características apresentadas pela rede neural. Além do que ao cuidador oferece a segurança de que se não há interferência do profissional de saúde, as deficiências apresentadas são normais à evolução da doença, diminuindo assim a tensão a qual o cuidador está sujeito. O processo de enfermagem deve incluir 1) levantamento e análise de dados; 2) estabelecimento de objetivos e metas mútuas; 3) implementação das ações e 4) avaliação. A rede neural desenvolvida neste trabalho implementa este processo. A rede diagnóstica Alzheimer, reconhecendo padrões de tarefas observadas pelo instrumento baseado em Griffith-Kenney e Christensen (1986), em seguida processa o genograma parental e interacional (Holman - 1986; e Patrício - 1990) para finalmente fornecer uma avaliação do estado mental, como proposto por Folstein - 1985. O uso de uma rede neural para efetuar este tipo de classificação oferece ao cuidador um instrumento de apoio ao processo de enfermagem.

### **Uma Contribuição da Generalização da Teoria de Sedimentação ao Estudo das Estruturas Dissipativas em Células de Diálise**

FRANCISCO JOSÉ PEREIRA LOPES, PAULO  
MASCARELLO BISCH

*Universidade Federal do Rio de Janeiro*

Neste trabalho apresentamos um estudo da contribuição da generalização da equação de sedimentação de Svedberg, ao estudo da formação de uma nova classe de estruturas dissipativas, obtidas em células de diálise. Essas estruturas correspondem a um processo de auto-organização, fora do equilíbrio termodinâmico, observado em experimentos de sedimentação com acoplamento osmótico. As células de diálise possuem dois compartimentos internos separados por uma membrana semipermeável. No compartimento A é colocada uma solução aquosa de ficoll (polímero da sacarose) e sacarose, enquanto o compartimento B é preenchido com uma solução aquosa de sacarose. O procedimento experimental é dividido em duas etapas: (i) obtenção de um gradiente de densidade auto-gerado por osmocentrifugação; (ii) osmocentrifugação zonal com amostra concentrada de hemoglobina. A partir da diferença de concentração entre os compartimentos espera-se a formação de fluxos osmóticos do compartimento B para o compartimento A, sendo esses fluxos regulados pela sedimentação em cada compartimento e pelo gradiente de pressão. Baseados na evolução do sistema a um estado estacionário onde o volume dos compartimentos se mantem constantes, supõe-se a existência de fluxos de osmose-reverse, provavelmente nas regiões inferiores da célula, induzidos pelo gradiente de pressão, maior nessas regiões. A generalização recentemente obtida para o processo de sedimentação, sendo mais precisa se comparada com a formulação desenvolvida por Svedberg, deve contribuir de forma substancial para a descrição do processo que leva à formação das estruturas dissipativas em células de diálise, uma vez que, baseados nessa formulação, podemos descrever a evolução temporal do gradiente de pressão e densidade ao longo do sistema.

### **A SOBREVIVÊNCIA DOS FILHOS DE "GREAT REED WARBLER" GERADOS EM RELAÇÕES EXTRA-CONJUGAIS É INFLUENCIADA PELA IDADE DO PAI GENÉTICO ?**

SOLANGE G. F. MARTINS, THADEU JOSINO P.  
PENNA

*Instituto de Física - Universidade Federal Fluminense*

Existe na natureza uma variedade de pássaros cujas fêmeas copulam com outros machos além de seus machos sociais (aqueles que protegem a fêmea e assistem a ela na proximidade do seu território), resultando em fertilizações extra-conjugais. Como no caso dos "great

reed warbler", *Acrocephalus arundinaceus*, as fêmeas baseiam sua escolha fundamentalmente na complexidade do repertório do macho. Estudos com uma população destas aves, *permitiu verificar, através de testes com DNA, que as fêmeas escolhem os machos vizinhos com repertório mais complexo que o do macho social e, que a sobrevivência dos filhos após a saída do ninho, está relacionada com a complexidade do repertório dos pais genéticos. Existe uma tendência da fêmea em escolher para machos extra-conjugais, aqueles machos cuja idade é superior a do seu macho social, o que mostra que a complexidade do repertório está positivamente relacionada com a idade. Então, ao buscarem relações extra-conjugais as fêmeas buscam benefícios genéticos para os seus filhos?*

Utilizando o modelo de bit string para envelhecimento biológico, Modelo Penna, simulamos uma população de "great reed warbler", onde as fêmeas selecionam seus machos extra-conjugais através da idade (os machos extra-conjugais são sempre mais velhos que o macho social). Obtemos as curvas de mortalidade para os filhos das fertilizações extra-conjugais (EPF's) e para os filhos das fertilizações conjugais (EPY's). Estas curvas mostram que os EPF's, embora tenham a mesma longevidade que os EPY's, apresentam maior probabilidade de sobrevivência após o abandono do ninho, comparado com os EPY's. Através do modelo mostramos que a fêmea ao escolher machos extra-conjugais mais velhos que o seu macho social, garante benefícios genéticos para os seus filhos, e portanto, a idade dos pais genéticos está correlacionada à maior probabilidade de sobrevivência de seus filhos.

### **An Electromagnetism with Self-Interacting Photons**

GILBERTO SILVA RIBEIRO FILHO, RENTO DORIA,  
SIMONE ALMEIDA ARAÚJO

*Universidade Católica de Petrópolis - (UCP)*

At a first glance, the introduction of different potential fields transforming under a common gauge group

develops a model which includes a genuine gauge field plus massive vector fields without Higgs. Nevertheless it holds a whole theory bringing a light reinterpretation as origin. First appears a gauge global view. Different fields tied up under a common gauge parameter develop a global gauge mechanism. A dynamics with point-like and collective variables emerges. It contains a set determinism with coupled equations. Physics become described by global conservation laws and with fields equations parametrized by global coefficients. It shows globalized interactions and environment as a physical observable entity. A systemic gauge approach is obtained. It provides a whole cause and effect law which promotes an answer to confinement.

Analyzing for abelian case one gets that such set of fields appears conducted by only one genuine gauge field identified as photon. It shows a model where photon presence is compulsory, while other quanta existence are under circumstances. Classical equations are derived. Similar equations to Maxwell, but with new fields and source, are obtained. This whole abelian gauge theory makes light work as a principle which generates a context. New aspects are developed from this light physics which are collective electromagnetism fields, non-linear equations, Faraday type laws for non-electromagnetism fields, fields monopole, self-interacting photons mediated by a dimensionless coupling constant. It develops forces mediated by potential fields. They contribute besides the granular Lorentz type with ambiental and massive nature. Phenomenologically it implies granular and collective phenomena. Photons clouds and electromagnetism fields with turbulence are expected. These abelian systemic properties are coordinated through a lightweb where light function is to connect matter processes. Potential fields become responsible for fundamental laws, complex systems and an information physics. There is a physical reality beyond elementary particles.

## FÍSICA ATÔMICA E MOLECULAR (Colisão com Elétrons)

### FÍSICA ATÔMICA E MOLECULAR (Colisão com Elétrons e Colisões Lentas) – 11/06/97

#### ESTUDO DA INFLUÊNCIA DO MOMENTO DE DIPOLO MOLECULAR NO PROCESSO DE ANIQUILAÇÃO DE PÓSITRONS

CLAUDIA REGINA CAMPOS DE CARVALHO, MARCO

AURÉLIO PINHEIRO LIMA

UNICAMP

EUCLIMAR PASSOS DA SILVA

UFC

ALEXANDRA PARDO POLICASTRO NATALENSIS

UNICAMP

Técnicas de estabilização de núvens de pósitrons para estudos de taxas de aniquilação de pósitrons em ambientes moleculares têm sido desenvolvidas com sucesso nos últimos anos (T. J. Murphy and C. M. Surko, Phys. Rev. Lett. 67, 2954 (1991)). Nestes experimentos (K. Iwata, R. G. Greaves, T. J. Murphy, M. D. Tinkle, and C. M. Surko, Phys. Rev. A 51, 473 (1995)), foi encontrado que para alguns sistemas moleculares o parâmetro de aniquilação  $Z_{eff}$  é muito maior que o resultado clássico esperado (proporcional a  $Z$  - o número de elétrons da molécula). Para temperaturas ambientes, por exemplo, a taxa  $Z_{eff}/Z$  fica próxima de  $10^5$  para algumas moléculas. Para entendermos estes resultados precisamos analisar diversos aspectos. Um aspecto importante a ser investigado é a influência do momento de dipolo permanente molecular no processo de aniquilação de pósitrons uma vez que moléculas isoeletrônicas (com e sem dipolo), chegam a apresentar  $Z_{eff}$  muito distintos. Usando uma versão multicanal para o método de Schwinger para o espalhamento de pósitrons por moléculas pudemos calcular as taxas de aniquilação (E. P. da Silva, J.S.E. Germano, and M.A.P. Lima, Phys. Rev. A 49, R1527 (1994)) para as moléculas de  $H_2O$  e  $NH_3$ . Para verificarmos o efeito do dipolo nestas duas moléculas, consideramos ambas na geometria normal e depois torna-mo-as planas. Resultados comparativos entre essas moléculas serão apresentados (Suporte Financeiro: Capes e Finep; Suporte Computacional: Cenapad e Cenapadne).

#### FRAGMENTAÇÃO DE AGREGADOS DE HIDROGÊNIO.

NEIDE GONÇALVES, H. LUNA, GINETTE JALBERT,

N. V. DE CASTRO FARIA, L. F. S. COELHO

UFRJ

M. FARIZON, BERNADETTE FARIZON, M. J.

GAILLARD

Univ. Claude Bernard Lyon-1

No acelerador do IPN-Lyon, realizamos experiências de fragmentação de agregados de hidrogênio  $H_n^+$ , ( $n = 5$  a  $15$  ímpar) a energia de  $60 \text{ keV/u}$  em colisão com átomos de hélio. Neste estudo, foi utilizado o método de "geometria (ou cinemática) inversa". A análise dos fragmentos "evento por evento" permitiu extrair seções de choque de diversos canais de fragmentação, sejam oriundas de excitação ou de ionização do agregado, sejam de captura de um elétron.

As seções de choque dos canais principais de fragmentação indicam a importância da evaporação para os canais que contém fragmentos pesados e de ionização para os canais contendo somente fragmentos menores, de acordo com a indicação da curva da produção total. Em particular, é sabido que a visão dos agregados  $H_n^+$  como constituídos por uma base  $H_3^+$  a qual estão ligadas moléculas de  $H_2$ , é obtida por cálculos teóricos, em geral, *ab-initio*. Neste trabalho, indícios experimentais diretos destas estruturas foram pela primeira vez observados, assim como a dependência da seção de choque dos canais principais, de simples ionização ( $H_n^+ \rightarrow H_3^+ + H_2^+ + S_{neutro}$ ) e de excitação ( $H_n^+ \rightarrow H_3^+ + S_{neutro}$ ), com a massa  $n$  do agregado.

#### Studies of electronic excitation of $CH_4$ and $CH_2O$ by electron impact using norm-conserving pseudopotentials.

MÁRCIO HENRIQUE FRANCO BETTEGA

Universidade Federal do Paraná

LUIZ GUIMARÃES FERREIRA, MARCO AURÉLIO

PINHEIRO LIMA

Universidade Estadual de Campinas

Inelastic cross sections play an important role in modeling of cold plasmas. These plasmas are widely used in processes such as plasma etching and plasma enhanced vapor deposition. However, the literature of inelastic electron-molecule collision is still scarce both in theoretical and in experimental sides. In the theoretical point of view, the calculation of these cross sections demands a lot of computational effort. To simplify calculations on electron-molecule collisions, we have recently implemented the Schwinger Multichannel method with norm-conserving pseudopotentials (SMCPP). With the SMCPP method, only the valence electrons participate in the scattering process, the core electrons being replaced by the pseudopotential. These pseudopotentials (PP) are soft and produce smooth, nodeless valence atomic wave functions. The fact that only the valence electrons are taken into account is a general property of PP, but soft wave functions is an exclusive property of the norm-conserving PP. This softness

of the pseudo wave functions allows the expansion of the scattering wave function in smaller basis sets and leads to a great simplification in the whole process of calculation. This hybrid method has been used in the study of elastic scattering of electrons by molecules, rotational excitation of molecules by electron impact and electronic excitation of  $\text{CH}_2\text{O}$  and  $\text{H}_2$  with success. In this work, we apply the SMCPP method to study electronic excitation of  $\text{CH}_4$  and more complete study of electronic excitation of  $\text{CH}_2\text{O}$  by electron impact at 2- and 3-state level of approximation. We study the  $^1A_1 \rightarrow ^1,^3T_2$  transition for  $\text{CH}_4$  and  $^1A_1 \rightarrow ^1,^3A_2$  transition for  $\text{CH}_2\text{O}$  and present a procedure that removes some spurious structures that appear in the excitation cross sections and are consequences of numerical instabilities. Agreement with other theoretical results are found.

#### PERDA DE ENERGIA DE IONS DE HE EM GE E SI SOB REGIME DE CANALIZAÇÃO

MARIO BARBATTI, NELSON V. DE CASTRO FARIA,

RAUL J. DONANGELO

UFRJ

JUAN CARLOS ACQUADRO

USP

Realizamos<sup>1</sup> medições de *perda de energia por unidade de comprimento*, ou, mais simplesmente, *perda de energia*, na canalização de ions de He sob duas condições: (1) varredura energética, com energias na faixa de 1,0 MeV a 4,0 MeV, em Ge cristalino, nas direções  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  e  $\langle 111 \rangle$ . E (2) varredura angular, com energia de 2,0 MeV, em Si cristalino, no plano  $\{001\}$ , varrendo-o do canal axial  $\langle 100 \rangle$  ao  $\langle 110 \rangle$ , detalhando a passagem do plano aos eixos. Em ambos utilizamos a técnica RBS (*Rutherford BackScattering*) no Pelletron de 1,6 MV do IF-USP.

A perda de energia em direção canalizada do Ge relativa à perda em uma direção aleatória do Ge foi mais alta que a esperada devida tanto à alta densidade eletrônica do Ge, quanto a uma intensa descanalização ocasionada na interface Si-Ge do alvo. A literatura não registra dados de perda de He canalizado em Ge.

A varredura angular demonstrou um perfil do canal análogo ao obtido por contagens de retro-espalhamento, porém a medida da abertura angular dos canais axiais feita por perda de energia é significativamente menor que a tomada por aquela técnica, concordando com medida anterior<sup>2</sup>. A varredura fina de décimo de grau, mostrou uma sistemática oscilação do perfil dos espectros RBS, possivelmente indicando um fenômeno de focalização e desfocalização periódica do feixe na entrada do canal. Os dados da perda canalizada de energia de He em Si são coerentes com os da literatura<sup>3,4</sup>.

1 Barbatti, M., Tese de Mestrado, IF-UFRJ (1997).

2 Jin, H.S. and Gibson, W.M., Nucl. Instr. and Meth. B 13: 76-80 (1986).

3 dos Santos *et al.*, Nucl. Instr. and Meth. B 106:

51-54 (1995).

4 Pimentel, L., Tese de Mestrado, IF-UFRJ (1996).

#### SEÇÃO DE CHOQUE DE PRODUÇÃO DE FRAGMENTOS CARREGADOS PARA AGREGADOS DE HIDROGÊNIO.

H. LUNA, NEIDE GONÇALVES, GINETTE JALBERT,

N. V. DE CASTRO FARIA, L. F. S. COELHO

UFRJ

M. FARIZON, BERNADETTE FARIZON, M. J.

GAILLARD

Univ. Claude Bernard Lyon-I

As seções de choque de produção total de fragmentos  $\text{H}_2^+$  e  $\text{H}_3^+$  provenientes da colisão de agregados  $\text{H}_n^+$ , ( $n = 5$  a  $15$  ímpar) com átomos de hélio a uma energia de 60 keV/u foram obtidas utilizando as facilidades do acelerador de agregados do IPN-Lyon. Os agregados  $\text{H}_n^+$  após serem produzidos numa fonte e acelerados por um conjunto de aceleradores (um Crockoft-Walton mais um VE.RFQ), colidem com átomos de hélio em regime de colisão única. Um magneto faz a seleção em massa e carga dos fragmentos que são coletados por detectores de barreira de superfície.

Para ambos os fragmentos, verificou-se uma saturação da produção à medida que a massa do agregado incidente aumentava, em particular para  $n > 11$ . Para o fragmento  $\text{H}_3^+$ , isto pode ser entendido, baseado em cálculos teóricos (em geral, *ab-initio*) que prevêem que os agregados  $\text{H}_n^+$  são formados por um centro nucleador  $\text{H}_3^+$  ao qual moléculas de  $\text{H}_2$  se ligam, conforme a massa do agregado cresce. Segundo estes cálculos, estas moléculas blindam o centro de  $\text{H}_3^+$ , de modo que para  $n=9$  há uma blindagem total do centro produzindo assim um efeito de "fechamento de camada". Esta blindagem deve levar, portanto, ao fenômeno da saturação para  $n > 11$ .

Para o fragmento  $\text{H}_2^+$  podemos entender a saturação na sua produção como sendo a contribuição equivalente das moléculas de  $\text{H}_2$  para  $n > 9$ , prevista nos cálculos teóricos e verificada experimentalmente através do estudo da dissociação de  $\text{H}_n^+$  em hélio. Assim, estas moléculas são ionizadas e se desprendem do centro de  $\text{H}_3^+$  equivalentemente.

#### EXCITAÇÕES ROTACIONAIS DE MOLÉCULAS POLIATÔMICAS PELO IMPACTO DE ELÉTRONS.

MÁRCIO T. DO N. VARELLA, ALEXANDRA P. P.

NATALENSE, MARCO A. P. LIMA

UNICAMP

MÁRCIO H. F. BETTEGA

UFPR

O Método Multicanal de Schwinger com Pseudo-Potenciais (SMCPP) tem possibilitado o cálculo de

seções de choque elásticas para diversos alvos poli-atômicos [J. Chem. Phys. **103**, 10566 (1995), Phys. Rev. A **52**, R1 (1995)]. Recentemente, o SMCPP foi aplicado, em conjunto com a aproximação adiabática, para a obtenção de seções de choque rotacionais de moléculas do tipo  $XH_4$  ( $X$ : C, Si, Ge, Sn, Pb) [Z. Phys. D **39**, 59 (1997)]. O presente estudo pretende estender essa metodologia a alvos moleculares, também pertencentes ao grupo  $T_d$ , com cinco átomos pesados, tais como  $CY_4$  ( $Y$ : F, Cl) e  $SiY_4$  ( $Y$ : Cl, Br, I). Serão ainda abordadas moléculas pertencentes ao grupo  $C_{3v}$  com um átomo pesado ( $XH_3$ , com  $X$ : N, P, As, Sb) e com dois ou mais desse átomos (por exemplo,  $CH_3F$ ,  $CHF_3$ ,  $CCl_3F$ ,  $CClF_3$ ). Todas as moléculas com mais de um átomo pesado apresentam seções de choque rotacionalmente inelásticas grandes, em comparação com as rotacionalmente elásticas. Como consequência, teremos meios de descarga que se tornam rotacionalmente quentes, e portanto muito reativos, rapidamente. Com exceção dos alvos  $T_d$ , os sistemas moleculares em questão apresentam momentos de dipolo permanentes, exigindo a construção de amplitudes de espalhamento mistas, nas quais apenas a interação de curto alcance é tratada via SMCPP. As interações de alcance intermediário e longo são avaliadas, respectivamente, através do primeiro termo de Born (PTB) do potencial completo e do PTB do potencial do momento de dipolo. Dessa maneira, chegamos a seções de choque com comportamento adequado em  $\theta_{scat} = 0$  (direção incidente) na excitação rotacional permitida para o dipolo ( $00 \rightarrow 10$ ).

**A COMPARATIVE STUDY ON  
ANNIHILATION OF POSITRONS IN  $N_2$   
AND  $C_2H_2$  MOLECULAR GASES**

EUCLIMAR PASSOS DA SILVA

UFC

JOSÉ SILVÉRIO EDMUNDO GERMANO

ITA

CLAUDIA REGINA CAMPOS DE CARVALHO, MARCO  
AURÉLIO PINHEIRO LIMA  
UNICAMP

Studies on low-energy positron-molecule scattering became additionally interesting after the development of techniques of stabilization of positron clouds. These techniques have allowed measurements of annihilation rates of positrons in molecular environments, giving rise to new lines of research. For instance, at room temperature where free positronium formation is not allowed, the positron annihilation parameter  $Z_{eff}$  was measured for several molecular systems and it was found much larger than the expected classical value (proportional to  $Z$  - the number of electrons in the molecule). Reasons for that represent a theoretical challenge in the field. In a recent theoretical study on  $e^+ - C_2H_4$  scattering, we have shown that virtual positronium formations in the composite system (positron + molecule) can explain the large measured value of  $Z_{eff}$  (1200 against a theoretical value close to 1000). Our studies indicate that virtual molecular electronic excitation by positron impact, followed by distortion of the electronic cloud seem to turn some of the molecular species into traps of positrons. In this conference we will present a comparative study of two isoelectronic molecules:  $N_2$  and  $C_2H_2$ . The annihilation parameter for  $N_2$  is 30.5 and for  $C_2H_2$  has not been measured as yet. At the time we have written this paper we had pursued a very extensive calculation for  $C_2H_2$ . Although the calculation is very large (72 functions and over 20000 configurations), we consider it as a preliminary result because we still see changes with respect to the number of functions in the basis set.

**Palestra Convidada – 11/06/97**

**Time-Dependent Electron Nuclear Dynamics (END)\* Theory**

Y. OHRN

*Quantum Theory Project, University of Florida, Gainesville, FL 32611*

The principle of least action is applied using a quantum mechanical Lagrangian in terms of an approximate wavefunction for participating electrons and nuclei in molecular processes. The result is a set of dynamical equations, which yield the time evolution of the various wavefunction parameters that serve as the dynamical variables of the system. Even at the simplest level of approximation with the electrons described by a complex unrestricted determinant of non-orthogonal spin orbitals and the nuclei represented by zero width wave packet (i.e. classical particles but with the nonadiabatic coupling terms retained) yields acceptable results. Applications to reactive molecular collisions yield good agreement with molecular beam experiments. Systems studied include proton collisions with molecular hydrogen, methane, acetylene, and water. Also molecular hydrogen cation collisions with molecular hydrogen, and hydrogen abstraction reactions of hydrogen atoms with water have been studied. These studies have been made at energies varying from a fraction of an eV to 30 eV in the laboratory frame.

\* see E. Deumens, A. Diz, R. Longo, and Y. Ohn, Revs. Modern Phys. **66**, 917 (1994).

## FÍSICA ATÔMICA E MOLECULAR (Física Atômica e Molecular) – 11/06/97

### Perda Eletrônica ao Continuo do $He^+$ em Colisões com Diversos Alvos Gasosos

FLÁVIA DOS SANTOS JORÁS, ANTÔNIO CARLOS FONTES DOS SANTOS, GERALDO MONTEIRO SIGAUD, EDUARDO CHAVES MONTENEGRO  
Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro (PUC-Rio)

MARCELO MARTINS SANT'ANNA, WILSON DE SOUZA MELO

Universidade Federal Fluminense (UFF)

MARTIN KUZEL, KARL-ONTJES GROENEVELD  
Institut Für Kernphysik, J.W. Goethe Universität, Germany

No espectro de elétrons emitidos em colisões íons-átomos, pode-se identificar um pico em forma de cúspide cuja a energia é  $mv^2/2$  onde  $v$  é a velocidade do projétil e  $m$  é a massa do elétron. Quando o ângulo de emissão dos elétrons é igual a  $0^\circ$ , os elétrons deste pico podem ser provenientes de dois processos, a ionização do projétil (ELC-Electron Loss to the Continuum) ou do alvo (ECC-Electron Capture into the Continuum). Quando o projétil possui elétrons, no regime de velocidades intermediárias a altas, o processo dominante é o de ELC. Foram realizadas medidas do número de elétrons na cúspide para colisões entre projéteis de  $He^+$ , com energias variando de 1,0 a 3,0 MeV, incidindo sobre alvos gasosos atômicos de  $He, Ne, Ar, Kr, Xe$ , e moléculas de  $H_2, N_2$  e  $O_2$ . Este número, quando normalizado para o alvo de hidrogênio, apresenta uma saturação em função do número atômico do alvo. Este efeito já havia sido observado em medidas de seções de choque totais [1] e aparece tanto para os cálculos em primeira ordem para a contribuição elétron-elétron, quanto em cálculos *ab initio* para a contribuição elétron-núcleo para a perda eletrônica [2]. Foi também observado um crescimento nos valores absolutos das seções de choque duplamente diferenciadas em ângulo e energia dos elétrons emitidos à medida que se aumenta a energia do projétil. Essa característica não é observada nas medidas de seção de choque total de perda eletrônica [1], e é devida ao aumento do número de elétrons emitidos do projétil a  $0^\circ$  em comparação com a emissão em outros ângulos, conforme a velocidade de incidência cresce.

[1] M.M. Sant'Anna, W.S. Melo, A.C.F. Santos, G.M. Sigaud and E.C. Montenegro, Nucl. Instrum. Meth. B99, 46 (1995). [2] P.L. Grande, G. Schiwietz, G.M. Sigaud, E.C. Montenegro, Phys. Rev. A54, 2983, (1996).

### CÁLCULO DA COMPONENTE IÔNICA DA POLARIZABILIDADE DO $LiH$

MARCELLO FERREIRA DA COSTA, MARCOS ANTÔNIO DE CASTRO, ORLANDO AFONSO VALLE DO AMARAL  
UFG

Recentemente métodos *ab initio* vêm sendo utilizados com bastante sucesso em uma série de cálculos de polarizabilidades de átomos e moléculas, a maioria utilizando o esquema de campo finito. De acordo com essa abordagem a energia do sistema é calculada na ausência e na presença de um campo elétrico externo e as propriedades de interesse são obtidas como derivadas numéricas da energia em relação ao campo. Contudo para uma molécula com momento de dipolo permanente, como o  $LiH$ , a aplicação de um campo elétrico desloca o íon positivo no sentido do campo aplicado e o íon negativo no sentido contrário. Embora este efeito altere de maneira significativa os valores calculados para a polarizabilidade, o assunto não tem sido discutido na literatura. Neste trabalho apresentamos resultados de cálculos da polarizabilidade do  $LiH$  utilizando os métodos de teoria de perturbação de muitos corpos e interação de configurações. Os valores obtidos no nível  $MBPT(4)$  foram de 25, 90 e 28, 95 a.u., respectivamente sem e com a inclusão da componente iônica. No nível  $CISD$  os resultados obtidos foram respectivamente 27, 25 e 30, 15 a.u.. Estes resultados mostram que é fundamental a inclusão da componente iônica da polarizabilidade; os erros obtidos foram 10, 5% e 9, 6%, respectivamente nos níveis  $MBPT(4)$  e  $CISD$ .

### RESONANCE IN POSITRON-HELIUM SCATTERING AT MEDIUM ENERGY

PUSPITAPALLAB CHAUDHURI, SADHAN K. ADHIKARI  
IFT, UNESP  
A. S. GHOSH  
IACS, Calcutta, India

Positron-hydrogen and positron-helium systems are of special interest in the study of positron-atom scattering, both theoretical and experimental, as they are among the simplest systems which allow rearrangement scattering involving three-body (four-body) dynamics. Close coupling approximation (CCA) provides a practical framework for treating positron-atom scattering including the Ps formation channels. We studied medium energy positron-helium scattering in the CCA framework including two dynamically active electrons and using realistic wave functions for the helium and positronium (Ps) atom states. We included the following five states in the CCA scheme :  $He(1s1s), He(1s2s), He(1s2p), Ps(1s)$  and  $Ps(2s)$ . Specifically, we calculated elastic, excitation and capture cross sections to the low lying states of helium and ps atoms. With a careful study of the cross sections at medium energies in lower partial waves ( S, P and D) we found a prominent S wave resonance at 30 eV of width 2 eV in

both the capture Ps(1s),Ps(2s) cross sections and in inelastic He(1s2s), He(1s2p) cross sections with following basis sets: A) He(1s1s,1s2s,1s2p),Ps(1s,2s) and B) He(1s1s,1s2s,1s2p),Ps(1s). However, no such resonance was found with the basis set having no Ps states and the resonances are much wider if the basis sets have Ps states but no he(2p) state. The inclusion of the Ps state(s) in addition to the He(1s2p) state seems to be essential for the formation of the resonance.

### ESTUDO TEÓRICO DAS PROPRIEDADES ELÉTRICAS DE AZINAS EM MEIO SOLVENTE.

NESTOR SAAVEDRA, SYLVIO CANUTO  
IFUSP

A determinação das propriedades ópticas e elétricas de moléculas orgânicas em meio solvente tem despertado um crescente interesse nos últimos anos. O motivo para isto é qualquer aplicação prática destas moléculas, como em materiais para tecnologia fotônica, deverá requerer um conhecimento de suas propriedades em fase condensada. Então, tem sido desenvolvidas recentemente novos modelos para previsões teóricas de propriedades físicas de moléculas que levem em conta a interação da molécula em estudo, o soluto, com o meio que a envolve, o solvente. Nosso trabalho está focado na classe das azinas, que são cicloexanos com alguns de seus grupos C-H substituídos por nitrogênios. Esse grupo de moléculas tem propriedades ópticas bem conhecidas experimentalmente, além de tais propriedades as credenciam para possíveis aplicações em dispositivos futuros. Os nitrogênios substituintes são ricos em cargas elétricas, o que dá origem aos chamados "lone pairs" que tornam possíveis as ligações de pontes de hidrogênio com o solvente, no nosso caso, a água. O nosso procedimento baseou-se primeiro em obter a estrutura do complexo soluto-solvente através de simulação de Monte Carlo com o programa DICE, que utiliza um modelo discreto para o cálculo de estruturas, o que torna possível a observação dos efeitos das pontes de hidrogênio. Os cálculos de mecânica quântica incluindo correlação eletrônica para a obtenção das propriedades elétricas foram feitos através do programa GAUSSIAN 94. Consideramos também efeitos de erro de superposição de base (BSSE) nos cálculos de energias de interação entre o soluto e o solvente. Nossos resultados apontam para a importância da ligação de pontes de hidrogênio entre o soluto e o solvente como um fator de forte influência nas propriedades elétricas desta classe de moléculas em meio solvente.

### SCHWINGER MULTICHANNEL METHOD FOR POSITRON USING PLANE WAVES AS TRIAL BASIS SET

JORGE LUIZ DA SILVA LINO

Dept. de Física do ITA/CTA, São José dos Campos, SP.

MARCO AURÉLIO PINHEIRO LIMA

Instituto de Física da UNICAMP, Campinas, SP.

Development of theoretical approaches for determination of low-energy positron-molecule cross sections is a difficult task. The Schwinger multichannel (SMC) method, adapted for positron-molecule collisions, has been used to calculate cross section of polyatomic targets. The main limitation of the SMC method resides on what makes it a general method: the expansion of the scattering functions is done in a  $L^2$  basis (Cartesian Gaussian functions) and this is effective only for short range potentials. Our first attempt to deal with long-range potentials (molecules with permanent dipole moment) was to implement the so called  $\tilde{C}$ -functional (CF) for positron scattering. This method consists in writing the wave function as a sum of a plane-wave plus a combination of  $L^2$  trial functions. The resulting scattering amplitude in this approach is a sum of 3 terms: first and second Born approximation (FBA and SBA) and a correcting third term which is variationally stable. Convergence for this method is fast for weak potentials where the SBA represent a good improvement from the FBA. We have applied the CF method for  $H_2$  and  $CH_4$ . The  $H_2$  results using the CF method converged quite quickly. However, we have observed for  $e^+ - CH_4$  scattering a very slow convergence for the cross sections with respect to the number of  $L^2$  functions. The SBA for this system provide very bad cross sections (for this system and energy, we expect that the SMC with a  $L^2$  expansion gives good results) and the use of CF method can be impracticable. We have now implemented a set of computational programs which allow inclusion of plane waves in the scattering basis of the SMC method. The SMC method with a plane waves expansion gives good results for all molecules ( $H_2$ ,  $CH_4$  and  $H_2O$ ).

*Financial support from Fapesp*

### TWO-DIMENSION QUANTUM DYNAMICS OF A CHARGED PARTICLE IN A DIPOLE FIELD

I. S. OLIVEIRA, A. P. GUIMARÃES, X. A. DA SILVA  
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rua Dr. Xavier  
Sigaud 150, Rio de Janeiro, 22290-180, Brazil

The motion of a charged particle in a magnetic field is of both practical and academic interest. Usually, these investigations are addressed to cases where the magnetic field is static and homogeneous. We have recently investigated the situation where the magnetic field is time-dependent [1]. Not less important are those cases where the field presents spatial inhomogeneity. In the present work the quantum dynamics of a particle in two dimensions with charge  $q$  in a magnetic dipole field is investigated, in a parallel to the two-dimensional hydrogen atom studied by Van Vleck [2]. In this case the effective potential becomes radial and dependent of

the azimuthal quantum number  $m$ . The exact discrete energy spectrum is calculated and found to be non-degenerate, with eigenenergies proportional to  $-n^2/\lambda^2$ , where  $\lambda = qM_0$  is a characteristic length, and  $M_0$  the dipole strength. As  $\lambda$  increases the spectrum tends to a continuum, and the problem becomes similar to that of a free electron gas in a box of length  $L$ , for which  $\epsilon_n \propto n^2/L^2$  (in the present case  $\lambda$  represents the dimension of the 'box'). As  $\lambda$  decreases the state levels become more separated, originating a sort of dipolar atom. The inclusion of the particle spin results in half-integer values of  $m$ , which, according to Van Vleck, for simple radial potentials, is the recipe to obtain the three-dimensional energy spectrum from the equivalent two-dimensional problem. The results may be of interest for the study of charge dynamics in films and surfaces. [1] I.S. Oliveira, A.P. Guimarães and X.A. da Silva, Phys. Rev. E, 55 (1997) in press. [2] Van Vleck, Chap. 3 in: Wave Mechanics, the First Fifty Years, Ed. W.C. Price, S.S. Chissick and T. Ravensdale (Butterworth, London, 1973).

#### Cálculo da Polarizabilidade de Dipolo Utilizando Teoria do Funcional da Densidade e Teoria de Perturbação de Muitos Corpos

RENATO MEDEIROS, SYLVIO CANUTO

Instituto de Física - Universidade de São Paulo

Este trabalho apresenta um estudo sistemático da determinação teórica da polarizabilidade de dipolo usando vários métodos de Teoria do Funcional de Densidade (DFT), usando funcionais de exchange, métodos com funcionais de correlação e métodos híbridos onde inclui-se uma mistura de exchange com correlação, e comparamos com cálculos *ab initio* até quarta ordem em teoria de perturbação de muitos corpos (MBPT(4)) e também Coupled Cluster incluindo substituições simples, duplas, triplas e quádruplas (CCSD(T)). A motivação deste estudo se deve ao fato do custo computacional para sistemas muito grandes, ou seja com um número de funções base muito extenso, ser muito caro uma vez que escala com  $N^4$  em cálculos HF e  $N^7$  em MBPT(4) e CCSD(T). Já para o DFT este custo é bem inferior e escala com  $N^3$ , de modo que se tivermos uma acuracidade comparável dos métodos de DFT com os métodos *ab initio*, teremos uma vantagem no tempo de CPU. Para observarmos este comportamento realizamos uma série de cálculos iniciando com sistemas pequenos e avançamos até sistemas mais complexos. Os sistemas que utilizamos foram o  $\text{Li}^-$ , o  $\text{F}^-$ , o Be, e as moléculas de  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{NH}_3$  e a de Benzeno. Para que tivéssemos uma uniformidade nos cálculos e que somente os métodos seriam os responsáveis pela mudança dos valores obtidos para a polarizabilidade de dipolo, definimos como padrão o conjunto de funções base como sendo o 6-311++G\* do Gaussian 92 para todos os sistemas em todos os cálculos. Utilizamos também a opção

polar até o nível MBPT(2) em *ab initio* e em todos os métodos de DFT. Para cálculos acima de MBPT(2) tomamos o valor do campo elétrico aplicado como sendo de  $10^{-3}$  a.u.. De posse dos resultados obtidos para a polarizabilidade de dipolo e do tempo de CPU para cada método utilizado podemos então verificar como o Funcional de Densidade se comporta com o aumento da complexidade do sistema a ser tratado.

#### Elastic scattering of low-energy electrons by $\text{B}_2\text{H}_6$ , $\text{C}_2\text{H}_6$ , $\text{Si}_2\text{H}_6$ and $\text{Ge}_2\text{H}_6$

MÁRCIO HENRIQUE FRANCO BETTEGA

Universidade Federal do Paraná

ANTÔNIO JOSÉ SILVA OLIVEIRA, ALEXANDRA PARDO POLICASTRO NATALENSE, MARCO AURÉLIO PINHEIRO LIMA, LUIZ GUIMARÃES FERREIRA

Universidade Estadual de Campinas

In these last few years, *ab initio* low-energy electron-molecule collision calculations using multiparticle theories have presented a great evolution. These close-coupling theories, specially designed to account for electronic excitations of the molecular targets, are computationally difficult to apply in cases of molecules with many-electron atoms. The reason for this is that these methods are based on quantum chemistry computational codes where the Cartesian Gaussian functions are used in the expansion of the wavefunction. The number of functions in the basis set can grow enormously when we study molecules containing atoms with many electrons since a good description of the molecular orbitals require a great combination of these functions. The best argument for this is that the molecular orbitals have nodes, and in order to describe them properly we have to combine many Cartesian Gaussian functions. The resulting large basis set quickly leads the calculations to computational limitations. With the purpose of developing an *ab initio* method able to deal with this problem we have recently shown that the Schwinger Multichannel Method with soft norm-conserving pseudopotentials is a powerful technique to study low-energy electron scattering by large molecules. In this work, we apply the Schwinger Multichannel method with pseudopotentials to study elastic scattering of low-energy electrons by  $\text{X}_2\text{H}_6$  ( $\text{X}=\text{B}, \text{C}, \text{Si}, \text{Ge}$ ). The scattering cross sections were obtained at the static-exchange level of approximation, bearing in mind that this is the natural first step towards more elaborated calculations including polarization effects and electronic excitations processes, in the energy range from 5 up to 30 eV. For  $\text{B}_2\text{H}_6$  we also made calculations at the geometry of  $\text{C}_2\text{H}_6$ . Our aim is to find similarities and differences in the cross sections of these molecules. We compare our results with those available in the literature.

### EXCITAÇÃO POR IMPACTO DE ELÉTRONS DA MOLÉCULA DE BUTADIENO

GERARDO GERSON BEZERRA DE SOUZA, MARIA  
LUIZA MIRANDA ROCCO, HELOISA MARIA  
BOECHAT- ROBERTY

UFRJ

MARIA CRISTINA ANDREOLLI LOPES

UFJF

CARLOS ALBERTO LUCAS

UFF

Este trabalho faz parte de um estudo sistemático dos processos de excitação na região do UVV (ultravioleta de vácuo) de monômeros de polímeros de interesse tecnológico, no qual estudamos a molécula de butadieno. Uma das razões para se estudar os monômeros está relacionada com o conhecido fato dos espectros de absorção de polímeros serem semelhantes aos espectros dos respectivos monômeros, com os seus picos deslocados para maiores comprimentos de onda. O estudo dos monômeros oferece conseqüentemente uma forma de acessar o espectro de absorção dos polímeros correspondentes, sem a presença de efeitos coletivos e danos por radiação. Reportamos neste trabalho, espectros de excitação eletrônica da molécula de butadieno em fase gasosa, na faixa de 2 a 50 eV. Estes espectros foram obtidos em um espectrômetro de impacto de elétrons, que trabalha na região do UVV e de raios-x, podendo cobrir uma faixa de energia de excitação de até 500 eV. Os espectros de perda de energia de elétrons do butadieno foram obtidos com variação angular e para uma energia de impacto de 1000 eV. Para pequenos ângulos de espalhamento, o espectro de excitação por impacto de elétrons assemelha-se ao espectro óptico. O estudo da variação angular dos espectros mostrou uma forte predominância de processos de excitação permitidos por regras de seleção dipolares.

### O MODELO DAS DUAS CAMADAS BASEADO NA VERSÃO "PERDA CONSTANTE" - EMISSÃO SECUNDÁRIA

CARLOS ALBERTO FONZAR PINTÃO

UNESP

Com base na teoria fenomenológica da emissão de elétrons secundários se define uma expressão para o rendimento dos emitidos (secundários), válida para um feixe monoenergético de elétrons incidentes sobre um sólido. Ao considerar a existência de um mecanismo de escape independente da produção desses elétrons durante o fenômeno da emissão, pode-se assumir que a perda de energia dos elétrons incidentes e portanto a produção dos secundários é constante, o que dá origem a uma expressão para o rendimento baseada nesta versão e denominada de "perda constante". Neste trabalho, considerou-se uma amostra formada de duas camadas de materiais distintos

e homogêneos e foi desenvolvida uma nova expressão, segundo a versão anterior, para se calcular o rendimento secundário. Para testar o novo modelo foi necessário determinar os parâmetros envolvidos e confeccionar amostras que se assemelham aquela considerada na teoria. A preparação destas amostras foram realizadas por depositar camadas de ouro por "sputtering" com espessura controlada de 50nm e 2,5nm sobre a superfície do Teflon-FEP (50 $\mu$ m). Na determinação desses parâmetros utilizou-se da própria versão considerada e dos resultados provenientes das curvas de emissão dos rendimentos total, secundário e retroespalhados em função da energia dos incidentes para as amostras confeccionadas e mais a amostra de Teflon-FEP puro. Estas curvas foram obtidas pelos métodos do pulso de corrente e/ou o dinâmico, empregando um feixe de elétrons monoenergético (0,2 a 10keV). Apesar da versão "perda constante" ser um modelo bastante simples dentro da teoria da emissão, ao confrontar as curvas experimentais com as do modelo, verificou-se uma boa concordância para as energias dos elétrons incidentes inferior a 4 vezes a energia relacionada ao máximo rendimento.

### INTERAÇÃO HIDROFÓBICA E O SHIFT SOLVATOCRÔMICO DO BENZENO EM ÁGUA.

SÉRGIO URAHATA, KALINE COUTINHO, SYLVIO  
CANUTO

Instituto de Física - Universidade de São Paulo

A variação das propriedades moleculares devido à interação com um solvente tem despertado amplo interesse nos últimos anos. No caso de sistemas apolares em água, há o aparecimento do chamado efeito hidrofóbico. Esse efeito tem importância fundamental numa variedade de processos, que vão desde o estudo de formação de micelas e membranas em sistemas biológicos até a imiscibilidade do óleo na água. Em nosso trabalho, técnicas de simulação computacional de Monte Carlo são utilizadas para analisar o efeito hidrofóbico do benzeno em água. A chamada hidratação hidrofóbica foi investigada usando-se os resultados da simulação de uma molécula de benzeno entre 343 moléculas de água. Já a interação hidrofóbica foi estudada com duas moléculas de benzeno em água. As estruturas geradas por ambas simulações são utilizadas em cálculos quânticos de supermoléculas para analisar a influência de hidrofobicidade no conhecido red shift da banda  $B_{2u}(\pi - \pi^*)$  do benzeno dissolvido em água. É encontrado que, na média, a molécula de água mais próxima do benzeno tem uma das ligações O-H paralela ao plano formado pela molécula de benzeno e que o efeito induzido pelo solvente água praticamente dobra a interação benzeno-benzeno. No caso do red shift do benzeno, concluímos que a hidrofobicidade tem pequena, mas não nula, influência na primeira banda de absorção.

### O FLUXO DE UM GÁS RAREFEITO ENTRE DOIS CILINDROS COAXIAIS

LILIANA MADALENA GRAMANI CUMIN, FELIX SHARIPOV, GILBERTO MEDEIROS KREMER  
UFR

O fluxo de um gás rarefeito entre dois cilindros coaxiais com gradiente radial de pressão é um problema clássico da mecânica dos fluidos. Neste trabalho trataremos de um único gás entre dois cilindros em rotação onde a evaporação e a condensação ocorrem nas superfícies dos cilindros. A rarefação varia desde o regime das moléculas livres (onde não há colisões entre as moléculas) até o regime do meio contínuo. O problema numérico é considerado no nível da função de distribuição das velocidades das moléculas a qual obedece a equação cinética dos gases, isto é, a equação de Boltzmann. O termo das colisões desta equação é muito complicado e para se resolver numericamente utiliza-se um modelo para simplificar os cálculos. O modelo utilizado é o de Bhatnagar-Gross-Krook cuja equação possui todas as propriedades principais (as leis da conservação de massa, momento linear e energia; o teorema H) da equação de Boltzmann. A equação cinética foi resolvida pelo método das velocidades discretas. O método foi adaptado para a função de distribuição que é descontínua no espaço das velocidades. A velocidade de rotação é considerada grande, ou seja, a velocidade da superfície tem a ordem da velocidade do som no gás. A força termodinâmica que perturba o equilíbrio está relacionada com o gradiente de pressão. Como resultado calculamos os campos da densidade, temperatura e velocidade para um intervalo amplo do número de Knudsen que caracteriza a rarefação do gás. A análise preliminar mostra que os campos da densidade e velocidade variam muito com a velocidade angular dos cilindros e embora as temperaturas dos cilindros sejam iguais existe uma pequena variação de temperatura dentro do gás. A variação atinge o máximo no regime em que o livre caminho médio é da ordem do raio do cilindro maior.

### SEÇÕES DE CHOQUE DE DISSOCIAÇÃO DO H<sub>2</sub> POR IMPACTO DE ELÉTRONS

ITAMAR BORGES JR, GINETTE JALBERT  
Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro  
CARLOS E. BIELSCHOWSKY  
Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro

Foram determinadas seções de choque de dissociação da molécula de H<sub>2</sub> por impacto de elétrons para excitações do estado fundamental  $X^1\Sigma_g^+$  aos estados eletrônicos  $B^1\Sigma_u^+$ ,  $B'^1\Sigma_u^+$  e  $C^1\Pi_u^+$ .

As curvas de energia potencial dos estados fundamental e excitados são calculadas, no contexto da aproximação de Born-Oppenheimer, a partir de funções de onda eletrônicas *abinitio* em Interação de Configurações (CI). Os orbitais moleculares utilizados para

construir a função de onda eletrônica CI, tanto para o estado fundamental quanto para cada um dos estados excitados, são determinados de forma independente. A interação entre o elétron incidente e a molécula alvo é levada em conta segundo a Primeira Aproximação de Born. Os elementos de matriz  $M_{el}$ , referentes ao processo de excitação eletrônica, são determinados a partir das funções de onda CI utilizadas na determinação das curvas de energia potencial.  $M_{el}$  depende do momento transferido  $\vec{K}$  pelo projétil, da orientação espacial da molécula  $\Theta$  e da distância internuclear  $R$ . A dependência de  $M_{el}$  como função de  $R$  é determinada por um ajuste polinomial. As funções de onda vibracionais do discreto e do contínuo são determinadas, com as mesmas curvas de potencial descritas acima, utilizando a metodologia de Le Roy [1].

Também foi utilizada, para efeito de comparação entre os presentes resultados obtidos para a Força de Oscilador Generalizada (FOG) e outros resultados teóricos, a aproximação vertical. É observado um bom acordo entre estes resultados.

[1] - R. J. Le Roy, Com. Phys. Com. 52, 383 (1989).

### IMPLEMENTAÇÃO DE EXPERIMENTOS DE ESPALHAMENTO DE ELÉTRONS POR ÁTOMOS DE CÉSIO RESFRIADOS EM UMA ARMADILHA MAGNETO-ÓPTICA.

R. S. BARBIERI  
DQ - UFSCar  
J. R. GARBIN  
DF - UFSCar

D. M. B. P. MILORI, A. M. TUBOY, V. BAGNATO,  
S. A. TONISSI JR, C. A. DE FRANCISCO, A. M. TUBOY  
IFSC - USP

Já são bem conhecidas as dificuldades de se realizar medidas absolutas de seção de choque de espalhamento utilizando-se os métodos convencionais de espectroscopia. Em 1995, Schappe e cols. [1], incidindo um feixe de elétrons com energia entre 7 e 500eV sobre um conjunto de átomos resfriados e aprisionados em uma Armadilha Magneto-Óptica (AMO), reportaram um método novo e simples de se obter valores de seção de choque total de espalhamento, onde a obtenção de valores absolutos depende apenas de uma medida absoluta da densidade do fluxo de elétrons incidindo sobre o alvo. Neste trabalho de cooperação entre DF-UFSCar/IFSC-USP, pretendemos aplicar o método exposto por Schappe utilizando como alvo átomos de <sup>133</sup>Cs aprisionados em uma AMO. Para tanto, temos voltado nossos esforços na projeção e construção de praticamente todos os equipamentos a serem utilizados no projeto, desde a câmara de vácuo onde se dará o aprisionamento, até o canhão de elétrons, responsável por um feixe com energia entre 200 e 600eV, buscando resultados que comprovem a

eficiência desta nova técnica espectroscópica, ainda em desenvolvimento.

[1] R.S. Schappe, P. Feng, L.W. Anderson, C.C. Lin & T. Walker, *Europhys. Lett.* 29, 439 (1995).

### Otimização de Geometria Molecular - Estatística de Tsallis

MAURICIO RUV LEMES, ARNALDO DAL PINO  
JUNIOR

*Instituto Tecnológico da Aeronáutica*

CARLOS RENATO ZACHARIAS

*UNESP - Campus de Guaratinguetá*

A determinação de geometrias moleculares constitui um difícil problema de otimização da energia molecular a fim de encontrar o mínimo global de energia. Sistemas com até 30 átomos apresentam  $10^{20}$  mínimos, tornando a busca pelo mínimo global uma tarefa difícil. Métodos convencionais como *conjugate gradiente* e *steepest descent* falham na busca, pois acabam caindo em mínimos locais. Métodos baseados na simulação de processos naturais, tais como: Simulated Annealing<sup>1</sup> e Algoritmo Genético, tem obtido sucesso na resolução deste tipo de problema. No Simulated Annealing Clássico<sup>2</sup>, se a temperatura for reduzida com o inverso do logaritmo do tempo, o sistema encontrará, com certeza, o mínimo global. Geralmente, contudo, esta receita exige muito tempo computacional e uma solução mais rápida se faz necessária. Um novo algoritmo baseado na estatística de Tsallis foi testado para o Problema do Caixeiro Viajante por Penna<sup>3</sup>. Este autor mostrou que a substituição da estatística de Boltzmann pela estatística de Tsallis agilizava a busca da solução. Neste trabalho, comparamos o método de Simulated Annealing Clássico - utilizando a estatística de Boltzmann - com a nova proposta de Tsallis e Stariollo, fazendo um estudo das geometrias de equilíbrio para aglomerados de Silício, com  $Si_n$  ( $n \geq 10$ ). Nossos resultados reiteram a performance extremamente positiva do novo método. A utilização da nova estatística na busca da geometria otimizada para aglomerados de Silício mostrou-se eficiente em 80 % dos casos com uma diminuição em média de 36 % no número de iterações para se atingir a energia mínima. Conforme mostraremos essa nova estratégia pode permitir a investigação da geometria de aglomerados, até então, inacessíveis pelos métodos atuais.

[1] S.Kirkpatrick, D.C.Gellat, and M.P.Vecchi, *Science* 220,671 (1983).

[2] S.Geman and D.Geman, *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.* PAMI-6, 721 (1984).

[3] T.J.Penna, *Phys.Rev.E* 51, R1 (1995).

### Ionização de Moléculas de $H_2O$ e $N_2$ por Impacto de Elétrons: Estudo Teórico de Secção de Choque Diferencial Dupla

DÉBORA COIMBRA

*Departamento de Física, Universidade Federal de São  
Carlos, São Carlos, SP.*

RONALDO S. BARBIERI

*Departamento de Química, Universidade Federal de São  
Carlos, São Carlos, SP.*

O Modelo de Encontro-Binário-Bethe, proposto por Kim e Rudd em 1994 [1], para o cálculo de secção de choque total de ionização, é estendido para possibilitar a obtenção de secção de choque diferencial dupla, nos moldes do Modelo Semi-Empírico de Rudd [2]. A aplicação para ionização de moléculas livres de  $H_2O$  e  $N_2$  por impacto de elétrons foi efetuada, tendo apresentado uma boa concordância com os dados experimentais disponíveis na literatura [3][4]. No caso de  $H_2O$ , foram utilizados dados experimentais obtidos pela interação de elétrons incidentes de 1500eV com ao alvo na forma de gás estático, para energias de ejeção 40, 80, 100 a 1400 eV (em intervalos de 100 eV) [3]. Para  $N_2$ , os dados experimentais utilizados foram obtidos pela técnica de tempo-de-vôo, considerando-se elétrons incidentes de 500, 1000 e 2000 eV, para energias de ejeção de 10, 20 e 40 eV [4].

## References

[1] Y. K. Kim & M. E. Rudd, *Phys. Rev. A* 50, 3954 (1994).

[2] M. E. Rudd, *Phys. Rev. A* 44, 1644 (1991); 47, 1866 (1993).

[3] Hollman et al., *Phys. Rev. A* 38, 3299 (1988).

[4] R. R. Gorughanthu, et. al., *Phys. Rev. A* 35, 205 (1987).

### Simulação de Monte Carlo da Molécula de DIMETHYLAMINOINDOANILINE dissolvida em Clorofórmio.

AGOSTINHO SERRANO, SYLVIO CANUTO

*Instituto de Física - Universidade de São Paulo*

O estudo de moléculas orgânicas com grande valor numérico das suas polarizabilidades e hiperpolarizabilidades tem recebido especial atenção pelo seu possível uso em tecnologia óptica. Algumas moléculas, como a molécula de DIMETHYLAMINOINDOANILINE(DIA) apresenta um valor alto calculado da primeira hiperpolarizabilidade, sendo isto confirmado pela caracterização experimental do seu  $\beta$  em uma série de solventes. Em particular, o valor experimental da primeira hiperpolarizabilidade desta molécula varia dependendo do solvente utilizado para a medição, apresentando um pico quando dissolvida em clorofórmio, mostrando a importante interação entre solvente e soluto nestas propriedades elétricas. Neste trabalho, tenta-se reproduzir teoricamente este

fenômeno a fim de estudar o papel da interação entre o solvente ( $CHCl_3$ ) e o soluto ( $DIA$ ) nestas propriedades elétricas, bem como no espectro e nos desvios solvatocromicos. Primeiramente, os potenciais intermoleculares da molécula de  $DIA$  são calculados usando-se várias bases (STO-3G, 3-21G, 6-31G) e diversos métodos de cálculo de potencial eletrostático molecular quântico, MEP's, tais como o CHELP e o CHELPG; com densidades eletrônicas calculadas em nível SCF e MBPT2. Depois, procedeu-se à simulação utilizando o método de Monte Carlo os conjuntos de potenciais intermoleculares calculados a fim de compará-los entre si. Os resultados estão sendo analisados e serão utilizados para calcular o espectro e propriedades elétricas desta mistura.

## FÍSICA ATÔMICA E MOLECULAR (Física Atômica e Molecular) - 12/06/97

### SEARCH FOR ELECTRICAL CURRENT RESONANCE AND CURRENT ECHOES

V. L. B. DE JESUS, A. K. ISSMAEL JR, A. Y. TAKEUCHI, F. GARCIA

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas*

N. V. DE CASTRO FARIA

*IF-UFRJ*

I. S. OLIVEIRA, A. P. GUIMARÃES

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas*

It has been recently suggested [1,2] that an electrical current flowing through a conducting medium can resonantly absorb energy from an oscillating magnetic field, in a fashion similar to nuclear moments in Nuclear Magnetic Resonance, giving rise to transient effects called free current decays and current echoes. We have designed experiments to detect the Electrical Current Resonance (ECR) in two distinct systems: in metals and in an electron beam. In order to minimize the effect of the skin-depth, thin films approximately 200 Å thick of Cu, Ag and Au have been grown for the experiment with metals. The magnitude of the effect is estimated to be of  $\approx 10\%$  for relaxation times of  $\approx 1-2$  ns at 4.2 K. An AC field of  $\approx 20$  gauss is produced by a pair of Helmholtz coils and applied perpendicularly to a static field, both on the plane of the sample. The resonance frequency [ $\nu_c = (q/2\pi m^*)B_0$ ] is set between 0.5 and 1 GHz. The experiments are carried out at 4.2 K. In a second experiment we try to observe ECR in an electron beam. The beam is generated in an Tektronix V859/T503 oscilloscope tube. Static ( $B_0$ ) and oscillating ( $B_1$ ) fields are generated by two mutually perpendicular pairs of Helmholtz coils, with  $B_0 \approx 250$

gauss and  $B_1 \approx 20$  gauss. The inhomogeneity of the static field was calculated numerically. The complete experimental setups and applications of the effect are discussed. We also discuss possible connections between ECR and the low-frequency resonant modes in metals, known as *helicons*. [1] I.S. Oliveira, A.P. Guimarães and X.A. da Silva, Phys. Rev. E 55 (1997) in press [2] I.S. Oliveira, Phys. Rev. Lett. 77 (1996) 139

### INVESTIGATION OF Cu I EMISSION SPATIAL PROFILES IN AN ARGON-COPPER HOLLOW CATHODE DISCHARGE

VLADIMIR HENRIQUE BAGGIO SCHEID, ROBERTO MASATO ANAZAWA

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

The hollow cathode discharge has been used as source of metal atoms and ions in lasers and in the processes of the thin film deposition. Because of the many technological applications, the hollow cathode configuration has been subject of intense investigative work in the last years. In this work a dc discharge with a copper hollow cathode in argon was investigated using emission spectroscopy techniques. The design of the electrodes ensure a well confinement of the plasma inside the cathode of 1 cm inner diameter and 7 cm length. Typical discharge parameters during our investigation are: pressure = 0.8 - 2.0 mbar, current density = 0.46 - 6.8 mA/cm<sup>2</sup>, voltage = 230 - 360 V. In the investigated pressure range the occupation distribution of the excited states can be described by the collisional radiative model. In this case the light emission of a spectral line due to the spontaneous decay from a resonant state to the ground state or a metastable state is closely related to the excitation rate. The knowledge of the excitation and ionization rates is essential for an accurate description of the discharge. In the present work the radial profiles of light intensities were measured for  $^3P_{3/2} \rightarrow ^2S_{1/2}$  (ground state) at 324.8 nm and  $^3P_{3/2} \rightarrow ^2D_{5/2}$  (metastable state) at 510.7 nm decaying transitions of the copper atoms. Although the intensity and the shape of the light profiles shown a strong dependence on the pressure and discharge current, the length of cathode fall, about 1 mm, was practically invariant. It will be shown that from the analyses of these profiles several informations concerning many important processes, which take place in the discharge, can be obtained.

**UM SISTEMA EXPERIMENTAL PARA  
APRISIONAMENTO DE ÍONS:  
CANDIDATOS, ASPECTOS TÉCNICOS E  
EVENTUAIS APLICAÇÕES**

FLÁVIO CALDAS DA CRUZ, ARTÊMIO SCALABRIN,  
DANIEL PEREIRA  
UNICAMP

O aprisionamento de íons em armadilhas eletromagnéticas tem sido objeto de grande interesse há muitos anos, tanto pelas aplicações tecnológicas (por exemplo espectrometria de massa e em novos padrões de frequência atômicos), como pela possibilidade de investigação de fenômenos e conceitos básicos da física. Armadilhas para íons são bastante "robustas" quando comparadas a armadilhas para átomos neutros, uma vez que campos elétricos e/ou magnéticos interagem diretamente com a carga do íon, e não com dipolos elétricos ou magnéticos do átomo. A possibilidade de redução, com laser, da energia cinética dos íons aprisionados, desde vários eV até eventualmente a energia de ponto zero da armadilha, renovou o interesse nestes sistemas e tem possibilitado desde a observação de saltos quânticos [1] até experimentos de interferometria de átomos aprisionados [2]. Além disto, baixa dissipação e a possibilidade de aprisionar desde um único íon até alguns milhões deles são outros atrativos destes sistemas, considerados ideais para espectroscopia de precisão e de alta resolução. Neste trabalho investigamos vários candidatos (entre eles Mg+, In+, Sr+, Ca+, Ba+, Yb+, Hg+, Be+) para aprisionamento, levando-se em conta a estrutura de níveis, lasers necessários, tipo de armadilha (Penning, Paul, esférica, linear, miniatura), regime de operação desejado (acoplamento forte ou não, regime de Lamb-Dicke, possibilidade de sideband cooling), forma de detecção, etc. Possíveis aplicações deste sistema incluem espectroscopia de alta resolução e precisão, padrões de frequência, geração de estados correlacionados, interferometria atômica, geração de estados não-clássicos de movimento e investigação da interação de Jaynes-Cummings em vários regimes.

[1] J.C.Bergquist, R.G.Hullet, W.M.Itano, and D.J.Wineland,

Phys.Rev.Lett.57, 14 (1986)1699-1702.

[2] C.Monroe, D.M.Meekhof, B.E.King, and D.J.Wineland,

Science 272 (1996) 1131-1136.

**Átomos de Rydberg em amostras Ultrafrias**

RICARDO ANTONIO DE S. ZANON, LUIZ GUSTAVO  
MARCASSA

Instituto de Física de São Carlos-USP

A área de laser cooling vivenciou um grande desenvolvimento nos últimos anos. O objetivo básico das diferentes técnicas de resfriamento, tem sido a obtenção de amostras de átomos frios em seu estado fundamental.

Até o momento pouco foi feito envolvendo átomos altamente excitados. Desta forma, a produção de átomos de Rydberg frios pode ser interessante para diferentes áreas envolvendo: a) experimentos de colisões, b) eletrodinâmica de cavidade, c) espectroscopia de alta resolução de níveis de Rydberg, d) dinâmica não linear, e) caos. Nosso grupo já vem trabalhando na área de colisões a alguns anos, sendo natural a continuidade desta linha de pesquisa. Neste trabalho pretendemos estudar processos colisionais em átomos de Rydberg ultrafrios em uma armadilha magneto-óptica de Rubídeo. Os átomos de  $^{85}\text{Rb}$  são aprisionados utilizando-se lasers de diodo. A excitação destes átomos é feita por um "dye" laser contínuo, que promove o átomo de rubídeo do estado fundamental (5S) para um nível de Rydberg (50S), via uma transição de dois fótons. Permite-se que a população de átomos de Rydberg colida durante um tempo  $t$ , que em seguida é detectada via ionização por pulso. Isto possibilita determinar o número de átomos que sofreram colisões e assim, obter a taxa de reação. Esta taxa foi medida em função do número quântico principal.

**EXCITONS LIGADOS A IMPUREZAS  
DOADORAS EM SEMICONDUTORES.**

ANTONIO SERGIO DOS SANTOS, JOSE EDUARDO M.  
HORNOS  
IFSC-USP

Excitons ligados a impurezas em semicondutores tem sido objeto de extensivas investigações, tanto do ponto de vista teórico como experimental. O passo decisivo para o entendimento de excitons ligados foi dado por Hopfield em 1964, onde os excitons são vistos como um par de partículas de cargas opostas, um elétron e um buraco, com massas efetivas  $m_e$  e  $m_b$ , interagindo via potencial de Coulomb. Os complexos efeitos da física de muitos corpos, que caracterizam os materiais semicondutores, são incorporados nesse modelo através da constante dielétrica de baixa frequência,  $\epsilon$ , e das massas efetivas obtidas experimentalmente. Desta maneira, o problema de estado sólido se reduz à solução do problema não relativístico de três corpos. O exciton forma um estado ligado com a impureza doadora apenas quando a energia de ligação é maior que a energia da impureza neutra; caso contrário o sistema decai formando uma impureza neutra e um buraco livre. Cálculos de energias de ligação foram feitos por Rodrigues e Suffczynski utilizando cálculo variacional. Neste trabalho, o sistema de três corpos exciton-impureza é analisado pelo método das coordenadas hiperesféricas. O método tem sido usado por mais de 3 décadas em física atômica e nuclear. Entretanto, nas aplicações em física atômica e molecular estava obstruído pela inexistência de procedimentos computacionais estáveis e acurados. O tratamento teórico neste trabalho consiste na generalização do método, desenvolvida em 1985 por Hornos et al para

o átomo de hélio, onde as dificuldades citadas foram resolvidas expandindo-se a função de onda angular em séries de potências numa variável adequada, gerando equações diferenciais acopladas com coeficientes polinomiais, convenientes para o tratamento computacional. Entre os resultados obtidos estão valores precisos de energias de ligação para estados fundamentais e a predição de ressonâncias.

### CURVAS DE POTENCIAL PARA O ÁTOMO DE LÍTIO NO FORMALISMO ADIABÁTICO HIPERESFÉRICO.

JOSÉ PAULO D'INCAO, JOSÉ EDUARDO MARTINHO  
HORNOS  
IFSC/USP

O problema quântico não relativístico de quatro corpos tem recebido nos últimos anos uma atenção muito especial. O desenvolvimento de técnicas matemáticas e computacionais tornou viável a obtenção de resultados para a equação de Schrödinger. Essa classe de problemas inclui o átomo de lítio, que é desenvolvido neste projeto sob o formalismo hiperesférico adiabático (HAA), por ser um sistema altamente correlacionado. O *ground state* e suas excitações tem spin total  $S = 1/2$ , portando a representação mista [21], do grupo de permutação  $S_3$ . Nós usamos como base para as funções de canal os hiperesféricos harmônicos do grupo de rotação  $SO(9)$ , os quais são as auto função do potencial em  $R = 0$ , impondo a representação mista [21] do  $S_3$ , através do uso dos operadores de projeção para esta simetria, de modo que a composição spin $\otimes$ espacial seja uma representação totalmente anti-simétrica. As curvas de potencial são calculadas, nesta base, para uma configuração de momento angular  $(l_1, l_2, l_3)$ , e posteriormente adicionamos outras funções, na configuração  $(0, 0, 0)$ , para melhorarmos a convergência da curva na região de  $R$  pequeno. Neste trabalho nós tratamos a equação hiperesférica radial dentro da aproximação adiabática extrema (EAA), sem as correções não adiabáticas  $P_{\mu\nu}(R)$  e  $Q_{\mu\nu}(R)$ , obtendo um primeiro resultado para a energia do estado fundamental  $E_{EAA}^{(0)}$ , preparando procedimento para futuras melhoras na precisão e no cálculo de um novo conjunto de funções de base, as quais incorporem o comportamento assintótico correto para o nosso problema.

### Caracterização de laser de diodo para espectroscopia de alta resolução

FERNANDO CATALANI, ARTÊMIO SCALABRIN,  
DANIEL PEREIRA  
IFGW - UNICAMP

Os lasers de semicondutores tem sido cada vez mais utilizados em diversas áreas como espectroscopia de alta resolução, resfriamento de átomos, aprisionamento de

átomos, etc. É crescente a tendência mundial de substituição de lasers caros como os lasers de corantes por lasers de diodo muito mais baratos. Fazendo parte desta tendência mundial, caracterizamos um laser de diodo comercial Sharp em uma cavidade que permite a operação entre temperaturas da ordem de 240 K à temperatura ambiente. A região de frequência deste laser é centrada em torno de 780 nm, com potência da ordem de 30 mW e corrente de operação de cerca de 75 mA. Realizamos, em primeiro lugar, a caracterização deste sistema em potência e corrente de limiar. Em seguida a caracterização em comprimento de onda, utilizando um  $\lambda$ -meter. Medimos a dependência do comprimento de onda do laser em termos da corrente e temperatura e as taxas de variação de  $\lambda$  com  $I$  e  $T$ . Medimos, também, a sua largura de linha ( em torno de 50 MHz ). Realizamos espectros da molécula de iodo com esse sistema laser, para tanto tivemos de construir um forno de manta de quartzo, afim de aquecermos a célula de iodo e obtermos medidas de melhor razão sinal-ruído. Em seguida, acoplamos este sistema à uma grade de difração, constituindo assim um laser em cavidade externa em configuração Littrow. Caracterizamos, então a largura de linha do laser em cavidade externa, observando a redução desta devida à realimentação óptica. Medimos uma largura de linha de aproximadamente 12 MHz, contudo devemos estar limitados pela finesse do Fabry-Perot, na realidade, valores em torno de 1 MHz devem ser mais realistas. Realizamos, novamente, espectros do iodo com o laser em cavidade externa na mesma região dos espectros anteriores, verificando a melhor qualidade espectral do laser com cavidade estendida.

### Compressão Transversal e Estruturas Espaciais Criadas por Pressão de Radiação num Feixe Atômico de Sódio Desacelerado

MARCOS VERÍSSIMO ALVES, SÉRGIO RICARDO  
MUNIZ, LUIS GUSTAVO MARCASSA, VANDERLEI  
SALVADOR BAGNATO

Instituto de Física de São Carlos - IFSC - USP

Nos últimos tempos, experimentos com feixes atômicos desacelerados têm sido feitos com os mais diversos fins, desde espectroscopia não-linear até experimentos de conservação de paridade, passando por interferometria atômica. Para desacelerar o feixe, existem diversas técnicas, como *frequency chirping* ou ajuste Zeeman. Entretanto, a alta divergência que apresentam, ao final do processo de desaceleração, devido ao aquecimento transversal, diminui sua densidade. Para vários experimentos, é desejável um feixe atômico de alta densidade, o que pode ser conseguido através de uma compressão do mesmo. Neste trabalho, apresentamos resultados de compressão transversal de um feixe atômico de sódio desacelerado pela técnica de ajuste Zeeman, numa configuração de MOT bi-dimensional

(2DMOT), continuando o trabalho previamente apresentado. Nesta configuração, os feixes laser aprisionantes, situados num plano transversal à direção de propagação do feixe atômico, perpendiculares entre si dois a dois, de polarizações circulares opostas, produzem dois tipos de força de pressão de radiação, juntamente com um campo magnético de gradiente constante. Com isto, o feixe é comprimido, diminuindo sua divergência transversal. Com o desalinhamento dos lasers do 2DMOT, criamos estruturas espaciais no feixe, semelhantes às vistas em 3DMOTs, tais como anéis, com e sem centro. Mostramos perfis de distribuição espacial no feixe atômico desacelerado, obtidos através de imagens capturadas diretamente por uma câmara CCD e processadas digitalmente, tanto para a compressão como para as estruturas espaciais criadas. Estes resultados são de interesse para a realização de experimentos de condensação de Bose-Einstein, assim como para a área de nanolitografia atômica, abrindo novas possibilidades.

#### FRAGMENTAÇÃO DE ÍONS METAESTÁVEIS EM ESPECTRÔMETRO DE MASSA POR TEMPO DE VÔO COM ESPELHO ELETROSTÁTICO

CÁSSIA RIBEIRO PONCIANO, ROBERTO ROSAS  
PINHO, ENIO F. DA SILVEIRA  
*Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro*

A espectrometria de massa por tempo de vôo utiliza em seu método medidas precisas de tempos de vôo livre de íons. Os íons formados com excesso de energia interna, podem se fragmentar espontaneamente em qualquer instante desde a sua formação até a sua detecção, esses são os chamados íons metaestáveis. A análise das fragmentações dos íons metaestáveis fornecem informações valiosas sobre estruturas moleculares e energias de ligação. Em geral, uma fragmentação desse tipo produz dois fragmentos: um iônico e outro neutro. Os espectrômetros de massa por tempo de vôo munidos de espelho eletrostático constituem um excelente meio para o seu estudo, porque podem ser vistos como um duplo espectrômetro de massa que operam simultaneamente, um que detecta os fragmentos neutros e o outro os iônicos. É possível nestes instrumentos fazer medidas correlacionadas de ambos os fragmentos produzidos por uma dada quebra de ligação e delas deduzir a estrutura do íon precursor, os seus sítios mais prováveis de quebra e suas sequências de fragmentações. Utilizando a espectrometria de massa por dessorção iônica induzida pelos fragmentos de fissão do isótopo radioativo 252 do elemento califórnio, técnica conhecida como Plasma Desorption Mass Spectrometry (PDMS), foram feitas uma série de medidas de alta resolução em compostos orgânicos complexos. Os resultados dessas experiências serão apresentados e discutidos.

#### Determinação de Funções de Correlação Temporal em Líquidos

ISAAC DE MELO XAVIER JR  
UFPE  
GREGORY A. VOTH  
*University of Utah*

O estudo teórico dos líquidos é de grande relevância devido ao fato da maioria dos processos químicos e biológicos ocorrerem na fase líquida. Neste trabalho, as funções de correlação temporal são determinadas utilizando-se a aproximação quadrática otimizada (J. Cao e G. A. Voth, *J. Chem. Phys.*, **102**, 3337 (1995)) das funções de energia potencial para o estado líquido. Cada mínimo local desta hipersuperfície corresponde a uma estrutura inerente a qual depende do potencial de interação, da temperatura e da densidade. Nesta aproximação torna-se então possível definir tanto as estruturas inerentes dos líquidos como as suas flutuações vibracionais, as quais levam ao conceito de modos normais otimizados. Assim cada estrutura inerente metaestável de um líquido possui um conjunto distinto destes modos normais otimizados associados com a mesma. A inclusão fenomenológica de uma função de decaimento permite a descrição da taxa média de transição entre os diferentes conjuntos de modos inerentes da estrutura, que dominam o movimento molecular nos líquidos para tempos menores do que o tempo de relaxação fenomenológica de tais modos. A identificação das estruturas inerentes, dos movimentos vibracionais em torno delas, e das transições entre os mínimos possibilita uma visão plausível do comportamento dinâmico de um líquido. A função de correlação temporal para as velocidades de um líquido atômico simples é calculada e comparada com resultados da dinâmica molecular.

#### ARMADILHA MAGNETO-ÓPTICA DE ÁTOMOS DE CÉSIO PARA AMOSTRAS DA ORDEM DE MILIGRAMAS.

PATRICIA SOARES PINTO CARDONA  
IFUSP

APARECIDA MARIKA TUBOY, DÉBORA MARCONDES  
BASTOS PEREIRA MILORI  
IFSC-USP

RENATO EJNISMAN  
*University of Rochester*  
VANDERLEI SALVADOR BAGNATO  
IFSC-USP

Amostras atômicas resfriadas e aprisionadas em armadilhas magneto-ópticas têm sido utilizadas para a elaboração de estudos espectroscópicos de alta precisão. Dentre estes estão os importantes testes que podem ser efetuados ao "Modelo Padrão", sendo um deles a investigação do fenômeno de não-conservação de paridade em isótopos radioativos de Césio. Com auxílio de um feixe de laser obtém-se de forma indireta uma

transição proibida pelas regras de seleção e a partir de um outro feixe, denominado laser de prova, realiza-se a contagem do número extremamente pequeno que compõem a população do estado proibido, podendo-se desta forma medir grandezas relacionadas com os efeitos das interações fracas. Como o manuseio de átomos radioativos impõem a utilização de amostras com massa extremamente reduzida, o primeiro passo num experimento deste gênero é a constatação da capacidade de aprisionamento das armadilhas acima citadas para amostras desta grandeza. Para tanto necessita-se de um vácuo rigoroso, obtido através de extremos cuidados durante toda a montagem do sistema. Um vácuo da ordem de  $10^{-10}$  torr como o atingido em nosso experimento implica numa redução das perturbações na nuvem eletrônica, pois neste regime ocorre uma grande diminuição das colisões entre os átomos aprisionados e o vapor de fundo que poderiam resultar na destruição da possível nuvem aprisionada impossibilitando a realização da espectroscopia descrita. Uma vez constatada a possibilidade de aprisionamento, a viabilidade de tais projetos fica livre de limitações relativas ao confinamento. Além disso, a partir desta verificação este método de resfriamento-aprisionamento tem sua importância substancialmente elevada, pois mais uma vez reafirma sua robustez e eficiência na captura de átomos eletricamente neutros e possibilita o trabalho com amostras menores implicando numa grande redução de custos mesmo em experimentos com átomos estáveis.

**Particle Trapping by Oscillating Fields:  
Influence of Dissipation upon the Squeezing  
Effect**

B. BASEIA, V. S. BAGNATO

*Instituto de Física de São Carlos, USP*

M. A. MARCHIOLLI, M. C. DE OLIVEIRA

*Departamento de Física, UFSCar*

The investigation of nonclassical effects in mechanical motion of trapped particles by oscillating fields constitute a "hot-topic" in the literature, with special emphasis to the recent observation of nonclassical motional states of trapped atoms, by M.D. Meekhof *et al.*<sup>a</sup>. The main purpose of techniques of trapping atomic particles is to minimize the particle motion which naturally implies a quantum mechanical analysis to understand the influence of residual particle motion on radiative interactions and also fundamental limits obtained with very low temperature ( $\mu$ -Kelvin). Employing an effective Hamiltonian accounting for dissipation, which constitutes a modified version of a model by Glauber for this system in the absence of friction we have investigated the influence of dissipation upon the squeezing effect

occurring in a particle trapped by oscillating fields<sup>b</sup>. As emerging results we emphasize that: (i) dissipation degrades the squeezing effect in this system more effectively in the Kapitza region; (ii) if dissipation parameter increases degradation of squeezing also increases, as expected; (iii) squeezing becomes more fragile when the temperature of the loss-reservoir increases. Being the equations that govern the motion of the Mathieu-Hill kind, stability regions with bounded solutions and instability regions with unbounded solutions exist suggesting the possibility of trapping or not, respectively. The inclusion of dissipation promotes a change in these regions. Here we also investigate the influence of dissipation upon these instability-stability regions in quantum fluctuations<sup>c</sup>.

<sup>a</sup>M. D. Meekhof, C. Monroe, B. E. King, W. M. Itano and D. J. Wineland, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1796 (1996)

<sup>b</sup>B. Baseia, V. S. Bagnato, M.A. Marchioli and M.C. de Oliveira, *Quantum Semiclass. Opt.* **8**, 1147 (1996)

<sup>c</sup>B. Baseia, V. S. Bagnato, M.A. Marchioli and M.C. de Oliveira, *Particle Trapping by Oscillating Fields: Influence of Dissipation upon Instabilities in Quantum Fluctuations*, submitted to *Quantum Optics* (1997)

**Projeto de uma linha de luz com ondulator  
para o LNLS**

ANTONIO RUBENS BRITTO DE CASTRO

*IFGW/UNICAMP e Lab Nac de Luz Sincrotron*

GIANCARLO TOSIN

*Lab Nac de Luz Sincrotron*

O anel de armazenamento de elétrons do LNLS tem quatro trechos retos livres para a colocação de dispositivos de inserção, num dos quais poderá ser instalado um ondulator para radiar na região de ultra violeta de vacuo. Esse ondulator teria 2.8 m de comprimento e períodos de 8 cm. Sua construção magnética seria do tipo híbrido por utilizar magnetos permanentes de Nd-FeB para excitar os polos de aço 1020. O campo magnético foi simulado através do programa Pandira-2D, de Los Alamos Accelerator Code Group. O espectro de emissão esta relacionado com a altura do gap do ondulator, sendo que para este projeto a faixa espectral coberta vai de 20 eV a 700 eV, considerando-se a fundamental e os harmônicos de ordem 3 e 9. O fluxo de fôtons no cone central, em uma faixa de 0.1 % de banda passante, e com .1 A de corrente armazenada no anel, dara'  $5 \times 10^{14}$  @ 22eV e  $5 \times 10^{13}$  @ 668 eV. A linha de luz para esse ondulator consistirá de front-end, espelho plano funcionando como filtro espectral passa-baixos, monocromador de grades planas e espelho toroidal refocalizador. Para selecionar o cone central da radiação do ondulator serao usados quatro bloqueios de incidencia rasante, refrigerados a agua, com ajuste de precisão. O desempenho do monocromador foi simulado com o

programa Shadow; a resolução espectral calculada em 600 eV da'  $E/\Delta E = 1300$ , e em 20 eV da'  $E/\Delta E = 5000$ . A resolução espectral é limitada pelo tamanho da fonte de luz (o feixe de elétrons armazenado no sincrotron). A instalação será adequada para pesquisas de física atômica e molecular usando as técnicas de fluorescência, espectroscopia de foto-elétrons, absorção e foto-dissociação. As amostras poderão ser feixes atômicos, moleculares e de clusters, nanocristais, filmes finos, multicamadas e sólidos monocristalinos ou amorfos.

### USO DA TÉCNICA DE INDUÇÃO DE RAIOS X POR PRÓTONS PARA ESTUDOS AGRÍCOLAS ASSOCIADOS COM METAIS PESADOS.

PAULO ESTEVÃO CRUVINEL

*Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária- CNPDIA*

PAULO ARTAXO

*Instituto de Física da Universidade de São Paulo*

SÍLVIO CRESTANA

*Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária- CNPDIA*

Discute-se neste trabalho a potencialidade da técnica de indução de raios X por prótons como metodologia analítica para o estudo de processos de contaminação de áreas agrícolas por metais pesados. Adicionalmente, o uso dessa metodologia é ilustrada com o estudo da variabilidade espacial dos metais pesados Cobre (Cu), Crômio (Cr) e Zinco (Zn) em uma parcela da Fazenda Experimental do Instituto Agrônomo de Campinas, situada no município de Pindorama, SP, Brasil, a qual tem área de 532,8 ha e aproximadamente as coordenadas 48,55 graus W e 21,13 graus S. Resultados desta técnica de análise mostram que o método de indução de raios X por prótons é rápido, não destrutivo e útil para identificar e medir metais pesados em amostra de solo e outros meios porosos. Análises das amostras de solo foram feitas utilizando-se um acelerador Pelletron instalado no Instituto de Física da Universidade de São Paulo, SP. Utilizou-se energia de 2,4MeV, corrente típica de 15nA e tempo da ordem de 400 segundos/amostra. Para a calibração utilizou-se o material padrão de referência NIST-SRM No. 1646, o qual é recomendado para análises de sedimentos, solos ou materiais com matriz similar. Os instrumentos usados para o processamento do sinal foram um detector de Si(Li) da Kevex modelo 3000 com resolução de 175eV em 5,9keV, com outros equipamentos convencionais para medidas nucleares associados a um multicanal ADCAM Analyst, Modelo 100U da EG&G ORTEC.

(Desenvolvido com suporte do projeto SEP 12.0.94.090)

### TÉCNICA DE RECONSTRUÇÃO ALGÉBRICA MODIFICADA E INTERPOLAÇÃO SPLINE PARA IMAGENS EM UM MINITOMÓGRAFO DEDICADO A CIÊNCIA DO SOLO

GILMAR CAÇÃO RIBEIRO

*Universidade Federal de São Carlos, Departamento de Computação.*

PAULO ESTEVÃO CRUVINEL

*Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária-CNPDIÁ.*

Uma das técnicas de imagens bastante utilizada nos dias de hoje é a tomografia. Os tomógrafos possibilitam a reconstrução bidimensionais ou tridimensionais de objetos a partir de um conjunto de projeções que são adquiridas durante um processo de varredura. Em geral a tomografia utiliza um feixe colimado de radiação, onde a união dos vários feixes colimados paralelos definem um plano vertical tão fino quanto o próprio feixe. Em tomografia a radiação útil não incide diretamente sobre um filme, como na radiografia convencional, mas informações relacionadas a projeções são processadas e armazenadas, sendo a partir desse ponto utilizadas em algoritmos reconstitutivos, dando origem a imagens bidimensionais ou tridimensionais. A imagem produzida por tomógrafos é representada por uma matriz de  $N \times N$  pixels, onde o valor de cada pixel representa o coeficiente de atenuação linear do material componente da amostra ou corpo em estudo. O coeficiente de atenuação de massa, por sua vez, depende do número atômico do material e da energia do feixe de radiação. Assim, a composição e a densidade do material em um pixel determinará seu coeficiente de atenuação linear. Em tomografia é usual utilizar a escala Hounsfield para a avaliação e a representação dos coeficientes de atenuação linear. Discute-se neste trabalho um algoritmo para reconstrução 3D de imagens tomográficas a partir de cortes 2D reconstruídos através da técnica de reconstrução algébrica aditiva com modificações e utilização da função spline para interpolação dos planos intermediários na reconstrução volumétrica. O método foi desenvolvido primeiramente dedicado à reconstrução de imagens do minitomógrafo do Centro Nacional de Pesquisa e desenvolvimento de Instrumentação para a Agricultura (CNPDIÁ) da Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária (EMBRAPA), o qual é dedicado à física dos solos. Os resultados do método foram avaliados a partir de imagens obtidas de phantom e amostras de solo, com resolução espacial de 2mm e 60 amostras por projeção, ângulo de 3 graus entre projeções, fonte de Americium ( $^{241}\text{Am}$ ) com energia de 59.9 keV e tempo de contagem de 10 segundos por amostra. Resultados mostram a utilidade e a confiabilidade do método, o qual encontra aplicações também em outros sistemas tomográficos.

## FÍSICA ATÔMICA E MOLECULAR (Novos Modelos Teóricos)

### FÍSICA ATÔMICA E MOLECULAR (Novos Modelos Teóricos e Aplicações) – 12/06/97

#### O USO DO TEOREMA DE HELMANN-FEYMANN NA DETERMINAÇÃO DO MOMENTO DE DIPOLO POR MÉTODOS SEMI-EMPÍRICOS

IVAN SOUZA COSTA, DELMIRO MARTINEZ BAQUEIRO  
IFUFBA

JOSÉ DAVID MANGUEIRA VIANA  
I.FUFBA, DFUnB

A determinação do momento de dipolo molecular com métodos semi-empíricos é assunto de interesse[1]. O valor esperado desta quantidade, a nível Hartree-Fock, é dado por

$$d = \sum_a \left[ (Z_a - P_{aa}) R_a^0 - \sum_{\mu, \nu \in a} P_{\mu\nu} r_{\mu\nu} - \sum_{b \neq a} \sum_{\mu \in a, \sigma \in b} P_{\mu\sigma} r_{\mu\sigma} \right]$$

Devido à aproximação ZDO, a expressão acima não pode ser usada com os métodos semi-empíricos pois o momento de dipolo das moléculas neutras perde sua invariância translacional. Um procedimento alternativo para o cálculo de momento de dipolo, derivado do teorema de Hellmann-Feymann, foi recentemente proposto [2] e aplicado utilizando-se os métodos CNDO e INDO. Estuda-se a molécula na presença de campo elétrico fraco. O hamiltoniano do sistema é  $H = H_0 - \vec{p} \cdot \hat{d}$ , onde  $H_0$  é o hamiltoniano sem campo,  $\vec{p}$  um campo fraco e  $\hat{d}$  o operador de dipolo. Os elementos de matriz  $\langle \mu | \hat{d} | \nu \rangle$  são calculados de modo coerente com as aproximações dos métodos semi-empíricos. A componente  $x$  do dipolo é calculada, no limite  $p = 0$  como,

$$\begin{aligned} \frac{\delta H}{\delta p_x} &= \frac{\delta E}{\delta p_x} = -d_x \\ &= \sum_a [(P_{aa} - Z_a) X_a^0 + \eta_a \sum_{\mu, \nu \in a; \mu \neq \nu} P_{\mu\nu} \chi_{\mu\nu}] \end{aligned}$$

Neste trabalho estamos aplicando a expressão acima com os métodos MNDO e o AM1. Resultados promissores foram obtidos utilizando-se o método MNDO para moléculas compostas de átomos H, B, C, N, O, F, Si, P, S, Cl. Estamos iniciando os cálculos com o método AM1.

#### Referências:

- 1.a) Dewar, MJS, Zoebisch, EG.; Healy, EF.; Stewart, JJP - J. Am. Chem. Soc. 1985, 107, 3902; b) Stewart, JJP. - J. Comput. Chem. 1989, 10, 209;
- 2) Baqueiro, DM - Tese de Doutorado. (Orient. J. David M. Vianna), CBPF, 1991

#### ESTUDO TEÓRICO DOS CLUSTERS DE VAN DER WAALS $C_5H_5 \cdots (N_2, He, Ne)$

C. CUNHA, SYLVIO CANUTO  
Instituto de Física da USP

O estudo de complexos fracamente ligados vem sendo uma área muito promissora, tanto na física, como também na química. Dispõem-se de uma quantidade razoável de dados, informações, sobre estes sistemas relacionados à sua estrutura e também à sua dinâmica. No entanto, realizam-se poucos estudos em sistemas de camada aberta envolvendo radicais livres instáveis. Os resultados obtidos para complexos de camada aberta, de certa forma, evidenciam a diferença dos daqueles obtidos para sistemas de camada fechada. Complexos envolvendo dois sistemas fracamente ligados estão sujeitos às assim chamadas "forças físicas de van der Waals", que, a princípio, podem ser expressas como uma interação eletrostática multipolar, tanto entre os momentos de multipolos estáticos como também os instantâneos de seus constituintes. Sabe-se que a união de dois radicais livres que possuam camada aberta, com o consequente emparelhamento dos "elétrons ímpares" é a descrição clássica da formação de uma ligação química forte. Entretanto, complexos formados entre sistemas de camada aberta e sistemas de camada fechada requerem uma descrição intermediária de dois casos distintos, entre ligações químicas e físicas. O estudo de sistemas que possuem ligações químicas fortes (principalmente covalentes) já está bem estabelecido. Neste trabalho estudamos o complexo envolvendo o radical livre ciclopentadienil (que é um sistema dubleto, com estado fundamental degenerado) em presença de nitrogênio e também de alguns gases nobres ( $He, Ne$ ), diferentemente do estudo de espécies aromáticas de camada fechada ( $Benzene \cdots N_2$ , por exemplo). O estudo do  $C_5H_5 \cdots N_2$  é diferente do  $C_6H_6 \cdots N_2$ , pois um radical livre com camada aberta deve interagir com átomos e moléculas de uma forma bastante diferente àquela forma com que interagem os radicais livres de camada fechada. Obtemos a estrutura geométrica do complexo deduzida a partir da análise de sua superfície de energia potencial obtida via cálculo *ab-initio* com inclusão de correlação. Estes resultados, aliados aos obtidos com complexos aromáticos de camada fechada fornecem consideráveis informações acerca da natureza

da ligação e sua aplicabilidade nas regras que governam os complexos de van der Waals para sistemas de camada aberta.

**EXACT SOLUTION OF PROBLEMS OF DIELECTRIC SPHERE (CYLINDER) IN ARBITRARY EXTERNAL FIELD AND MACROSCOPIC OPTICAL PROPERTIES OF COMPOSITE MEDIA**

ALEXANDER GHINER  
UFMA

GREGORY SURDUTOVICH  
UNICAMP

Under calculations of the optical constants of the composite media it is suitable to use the concept of mesoscopic field, instead of direct solving of Maxwell equations. In such approach an impurity is treated as an isolated elementary radiator and usually assuming to be an ideal dipole. One may notice that such approach is valid only in two special cases: (i) under random displacement of impurities and (ii) when the sizes of impurity are much lesser than the distances between them. In the course of solving of this problem in a general case we come to the necessity of generalization of the well known problem of calculation of the field configurations for a dielectric sphere (cylinder) in external homogeneous field on the case of the arbitrary inhomogeneous external field. The exact solution is obtained by means of Taylor series expansion of the external field in the region occupied by the sphere (cylinder). It occurred that each  $n$ -order term of the expansion produces the field of  $2(n+1)$ -multipole moment configuration proportional to the value of the external field term. The field inside the sphere (cylinder) has the same coordinate-dependent configuration as the external field, with some reductive factor specific for each term of Taylor's series. In distinction from the spherical configuration for cylinder geometry all this factors occur to be equal to each other. So we come to a general conclusion that any arbitrary inhomogeneous external field produces inside a cylinder the field just the same spatial configuration. The exact solutions for field producing by multipoles placed at the center of dielectric sphere (cylinder) were found. We apply these solutions for calculation of the optical properties of composite media.

**ESTUDO TEÓRICO DO ESPECTRO DE ABSORÇÃO E DE PROPRIEDADES CONFIGURACIONAIS DO BENZENO LÍQUIDO**

KALINE COUTINHO, SYLVIO CANUTO

*Instituto de Física - Universidade de São Paulo*  
MICHAEL C. ZERNER  
*QTP - University of Florida, USA*

Usando um tratamento supermolecular, estudamos o deslocamento do espectro de absorção do benzene em fase sólida e líquida quando comparado a fase gasosa. As configurações, que definem as estruturas supermoleculares, foram obtidas experimentalmente (raio-x) para o benzene sólido, e através de simulação Monte Carlo para o benzene líquido. A configuração *herringbone* proposta experimentalmente para o líquido também foi considerada.

Como a simulação computacional de sistemas em fase líquida utiliza um número de moléculas maior que os cálculos quânticos são capazes de suportar, desenvolvemos uma técnica sistemática para definir a supermolécula, ou seja, definir o número de moléculas que são incluídas no cálculo quântico; como também o número de supermoléculas necessárias para descrever o sistema em fase líquida, pois a propriedade de interesse é obtida como uma média sobre configurações e não com o cálculo sobre uma configuração apenas.

Nossos resultados, para o cálculo do deslocamento do espectro do benzene em fase condensada, estão em excelente concordância com os resultados experimentais e mostram que para o caso do líquido as configurações desordenadas, geradas na simulação computacional, estão em melhor concordância com os resultados experimentais, que a configuração *herringbone*.

**Método PG2 para o cálculo Ab Initio de energia moleculares e de reação.**

ANTÔNIO LUCIANO DE ALMEIDA FONSECA

*Dpto. Física, Universidade de Brasília, Brasília, DF.*

CARLOS FREDERICO DE SOUZA CASTRO

*Dpto. Física e Química, Universidade Católica de Brasília, Taguatinga, DF.*

John A. Pople e colaboradores propuseram, em uma série de artigos entre 1989 e 1991, metodologias compostas por correções aditivas para o cálculo de energias moleculares Ab Initio: os métodos G1 e G2. Desta forma, tornou-se possível substituir um cálculo extenso e com grande demanda computacional por vários cálculos menores. Tais métodos tem a vantagem de ter um baixo custo computacional e um erro médio de 2-3 kcal/mol, em relação aos dados experimentais. Entretanto, por utilizar o formalismo Hartree-Fock não-restrito (UHF) sofrem da contaminação de spin inerente ao mesmo, especialmente para estados de multiplicidade de spin superiores - dubletos, tripletos, etc.-. Tal contaminação é maior nos estados de transição, os quais são necessários para a determinação das energias de ativação das reações químicas. Através do forma-

lismo proposto por Schelegel, podemos projetar as contaminações de spin e obter energias corrigidas. Tais energias serão de estados puros, sem a contaminação de spin. Esta é alteração, por nós proposta, no método PG2. Das 100 espécies moleculares, neutras e iônicas, calculadas até o presente, o procedimento PG2 tem se mostrado superior. Na determinação das energias de reações químicas também houve melhora na descrição das mesmas. Aplicamos o método PG2 para as reações na formação de Carbetto de Silício, através da deposição por vapor químico, nos modelos radicalar e iônico. Em ambos os casos, houve melhoria na determinação das energias de reação e das energias de ativação, especialmente na reação  $\text{H} + \text{CH}_4 \rightarrow \text{H}_2 + \text{CH}_3$ . Cálculos teóricos, reportados na literatura, indicam-na como sendo endotérmica, entretanto, experimentalmente é exotérmica (-4,68 kcal/mol). O método PG2 determina-a como sendo, corretamente, exotérmica (-1,05 kcal/mol).

hinsky from University of Mexico. This construction was based upon a technique developed by M. Moshinsky which consist of embedding the  $sp(6)$  algebra into a unitary algebra of larger dimension. Doing so, extending a previous analysis, which holds for unitary groups, to the symplectic series. The handleness of that basis was improved, with Maple routines, by means of a suitable scalar product on that polynomial field. We correlate the aminoacids to the degenerated spaces of that symplectic representation just as in the original paper of Hornos & Hornos. But now with a slight diferent assignement to express symmetry properties of the code more clearly, lasting the freedom of this assign procedure. In this way, the impact of all lowering simplectic operators actions on the process of translation due by the genetic code, in course of evolution, was classified. We set, with this mathematical distinction between aminoacids, and within a dynamical symmetry framework to connect them, a vast ambient to search for patterns in biophysical properties of the aminoacids along evolution.

#### SIMPLETIC TRANSITIONS ON HORNOS & HORNOS GENETIC CODE MODEL

MARCONI SOARES BARBOSA, JOSÉ EDUARDO M.  
HORNOS  
USP

In this present work we analyse the symplectic transitions on codons in the Hornos's genetic code evolution model. In this analysis we make use of a representation of the symplectic group, performed by polynomials, recently constructed in colaboration with Marcos Mos-

#### FÍSICA ATÔMICA E MOLECULAR (Novos Desenvolvimentos) – 12/06/97

#### ATOMIC INTERACTIONS AT THE NANO-KELVIN SCALE AND THEIR ROLE IN QUANTUM DEGENERATE GASES

R. G. HULET, E. R. I. ABRAHAM, W. I. MCALEXANDER, J. GERTON  
Rice University, Houston, TX 77005, USA.

Photoassociative spectroscopy of ultracold atoms has dramatically increased our knowledge of interatomic potentials. Molecular spectra can be recorded by scanning a laser frequency through the resonance between a pair of colliding atoms and a bound molecular level. We have used this technique with laser-cooled trapped atoms to precisely determine the interaction potentials between ground-state lithium atoms. The s-wave scattering lengths can then be extracted from these potentials. For  $7\text{Li}$ , a composite boson, we have found that the scattering length is negative, corresponding to attractive interactions. These interactions have a profound effect on the formation, stability, and dynamics of Bose-Einstein condensates of  $7\text{Li}$ . For  $6\text{Li}$ , we have identified a threshold resonance, for which the scattering length is enormous in magnitude and negative. I will discuss the possibility of observing a BCS-like phase transition to a superfluid state. Finally, I will describe how photoassociative spectroscopy can determine an atomic radiative lifetime with unprecedented precision. This measurement is also sensitive to radiative retardation in the long-range portion of the interaction (Casimir-Polder effect).

---

**QUANTUM PROPERTIES OF AN ELECTRIC CHARGE IN AN OSCILLATING MAGNETIC  
FIELD: CURRENT ECHOES**

I. S. OLIVEIRA, A. P. GUIMARÃES, X. A. DA SILVA  
*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas*

The Schrödinger equation is exactly solved for a charged particle in the presence of a time-dependent oscillating magnetic field  $\mathbf{B}_1(\omega; t)$ , superimposed to a static one,  $\mathbf{B}_0$ , in two situations: (i) the oscillating field is applied continuously and (ii) it is applied as a sequence of pulses of duration  $\tau$  [1]. The problem acquires a simple form if the idea of a rotating reference frame is introduced. In case (i) it is shown that the energy eigenstates of the particle (Landau levels) are rotated by  $90^\circ$  as the frequency of the oscillating field is swept over the particle cyclotron frequency  $\omega_c = (q/m)B_0$ . In case (ii) we consider the application of one and two magnetic pulses along the  $x$  axis at the resonance ( $\omega = \omega_c$ ), and calculate the expected value of the particle momentum on the  $y$ -axis,  $m \langle \dot{Y} \rangle$ . The results agree with the classical derivation of *current echoes* and *free current decays*, proposed recently [2], and extends the possibilities of applications of the effect to other areas of Condensed Matter and Atomic Physics. [1] I.S. Oliveira, A.P. Guimarães and X.A. da Silva, Phys. Rev. E 55 (1997) in press [2] I.S. Oliveira, Phys. Rev. Lett. 77 (1996) 139

---

**MASS SCALING IN THE MOLECULAR APPROACH**

JOSÉ RACHID MOHALLEM  
*UFMG*

The molecular approach (MA) to ABA coulomb systems [J. R. Mohallem, Phys. Rev. A 51, 3541 (1995)] was designed for systems that show a "molecular behaviour". It was applied for such systems from the hydrogen molecular ion to the positronium negative ion. The main feature of the MA is that the adiabatic solution point out the most relevant "nuclear" configurations that should then appear in the construction of the nonadiabatic wavefunction. Now, it is successfully extended to atomic systems, for which we change the roles of nuclei and electrons. Adiabatic and nonadiabatic energies of some low-lying  $S=0$  bound states of the helium atom are calculated. The adiabatic energies seem to be the best obtained so far. They reveal the separability of the wavefunctions of these systems, predicted a long time ago by Hunter and collaborators [J. Chem. Phys. 46, 2146 (1967) and references therein]. These energy levels are directly related to vibrational levels of the hydrogen molecular ion in a correlation diagram, a procedure that is equivalent to mass scaling, relative to the mass ratio  $\lambda = m_A/m_B$ , of the adiabatic and nonadiabatic wavefunction, that has the same analytical form for all  $\lambda$ . Molecular quantum numbers can then be assigned to electronic atomic levels without the drawbacks of another approach [J. M. Feagin and J. S. Briggs, Phys. Rev. Lett. 57, 984 (1986)] where the Born-Oppenheimer molecular-orbital wavefunction of the hydrogen molecular ion is scaled to generate the helium levels. In the last approach the assignment of quantum numbers is made just through symmetry considerations and lead to similar qualitative conclusions for states of the same symmetry of different atomic two-electron systems. Such problems can not appear with the MA direct correlation.

---

## FÍSICA ATÔMICA E MOLECULAR (Espectroscopia e Aplicações)

### FÍSICA ATÔMICA E MOLECULAR (Espectroscopia e Aplicações, Íons Pesados) – 13/06/97

#### DETECTANDO BIFURCAÇÕES CLÁSSICAS EM ÁTOMOS A PARTIR DE DADOS EXPERIMENTAIS.

MARCUS WERNER BEIMS  
UFRGS

Um experimento com átomos de Rydberg resolvido *simultaneamente* na energia e no tempo é proposto. A existência de bifurcações clássicas pode ser detectada diretamente de dados experimentais e portanto, informações sobre a não-integrabilidade das equações clássicas de movimento podem ser obtidas. Este experimento é baseado em técnicas de pump-probe [1], onde um pump-laser excita um elétron de um estado inicial a uma coerente superposição de vários estados de Rydberg, criando assim um pacote de onda radial não-estacionário. A localização do pacote de onda pode ser testada com um probe-laser que induz o elétron excitado a um estado final através da emissão espontânea de um fóton. Num passo subsequente, a energia dos lasers e portanto, a energia do centro do pacote de onda, é variada e a dependência do pacote de onda como função simultânea do tempo e da energia pode ser estudada. Resultados são mostrados para o caso do átomo de hidrogênio sujeito a um campo magnético uniforme. Em particular serão discutidos pacotes de onda excitados ao longo da órbita perpendicular ao campo magnético. Acentuados máximos são observados na dependência do pacote de onda quando bifurcações clássicas ocorrem [2].

1. G. Alber, H. Ritsch e P. Zoller, Phys. Rev. A **34**, 1058 (1986).
2. M. W. Beims, submetido para publicação.

(FAPERGS)

#### EVIDÊNCIA DE TRANSIÇÕES LASER DO METANOL OCORRENDO EM UM PROCESSO DE 4 NÍVEIS

JOÃO CARLOS SILOS MORAES

Departamento de Física e Química - Unesp - Ilha Solteira

Logo após o primeiro sucesso na geração de radiação laser IVL (Infra-Vermelho Longínquo) através do bombeamento óptico utilizando um laser de  $CO_2$ , o metanol e seus isótopos foram reconhecidos como sendo o

meio ativo mais rico e eficiente. Até o momento, somente o metanol,  $^{12}CH_3OH$ , tem gerado um pouco mais de 600 linhas laser IVL e se, considerarmos os seus isótopos, este número ultrapassa 2000 linhas. Apesar dos esforços, o "assignment" (identificação dos números quânticos envolvidos numa transição) para mais da metade destas transições laser ainda não foi determinado. A ação laser para a maioria das transições IVL observadas, do metanol e seus isótopos, ocorre num sistema de 3 níveis. Recentemente, Li-Hong e seus colaboradores propuseram que a ação laser IVL pode também ocorrer por um processo de 4 níveis. Como consequência de nossa análise sistemática de "assignment" de espectros de absorção a Transformada de Fourier do metanol, na região IV (Infra-Vermelho) e IVL, foi possível determinarmos o "assignment" de várias linhas laser IVL do metanol. Em particular, algumas destas transições laser ocorrem num sistema de 4 níveis, o que vem confirmar a proposta de Li-Hong, cujo processo até então não tinha sido confirmado.

Apoio Financeiro: FAPESP e CNPq.

#### ELECTRONIC AND STRUCTURAL TRENDS IN SMALL GaAs CLUSTERS

PAULO CÉSAR PIQUINI  
UFMS

SYLVIO CANUTO, ADALBERTO FAZZIO  
USP

Using the Hartree Fock Roothaan method, followed by second order Møller Plesset perturbation theory we studied the structural and electronic properties of the  $Ga_nAs_m$  ( $n + m \leq 8$ ) clusters and its positive and negative ions (forty clusters in total). We determined the ground state structures of these clusters through geometry optimization calculations without spatial symmetry constraint. The extreme points found in the optimization procedure were verified to be minima after calculation of the vibrational frequencies. The ionization potential, electron affinities, Mulliken population analysis, binding energies, bond orders, etc, were evaluated. We verify, for the first time, the experimentally observed alternating behavior in the ionization potential beyond the three-atom clusters. Analyzing the results, we deduce a structural pattern followed by these small clusters of GaAs, where the embryonic forms of these clusters are observed to present highly symmetrical configurations formed by the As atoms at the central part of the cluster. The Ga atoms are observed to appear at positions that enhance a hybridization and chemical ordering which tends to that presented by the bulk. The change for a layer-type structure, similar to

that presented by the GaAs bulk, is observed to initiate already at the eight-atom stoichiometric cluster,  $\text{Ga}_4\text{As}_4$ . This is in agreement with experiments involving reactions of these clusters with  $\text{NH}_3$ . An explanation of the mass spectrum results is also presented.

### ON THE STABILITY OF FULLERENE-LIKE $(\text{BN})_n$ CLUSTERS

MÁRIO S. C. MAZZONI, HÉLIO CHACHAM  
UFMG

In 1985 Kroto et al proposed that a new form of pure carbon with 60 carbons arranged in a regular truncated icosahedron geometry could be obtained in gas phase by laser vaporization. Five years later, Krätscher et al discovered a simple method to prepare large quantities of  $\text{C}_{60}$  molecules. Since then, the study of  $\text{C}_{60}$  and other molecules of the same family, named fullerenes, attracted considerable interest due to its unusual electronic and structural properties. In this work, we propose a family of fullerene-like clusters  $B_{30+n}N_{30+n}$ , with  $n$  from zero to six.  $B_{36}N_{36}$  has only 4 and 6-membered rings and has the lowest total energy per atom. The reduction of  $n$  by one, in the family, eliminates a 4-membered ring and creates two 5-membered rings. This results in a "wrong" B-B bond and a "wrong" N-N bond, increasing the total energy per atom at the HF level. The resulting  $B_{30}N_{30}$  in the family has a  $\text{C}_{60}$ -like topology with the smallest possible number of B-B and N-N bonds. This  $B_{30}N_{30}$  cluster has also a total energy (at the HF level) lower than that of a  $B_{30}N_{30}$  nanotube-shaped cluster. We also estimate that the energy necessary to create a pair of "wrong" B-B and N-N bonds by atom exchange in the  $B_{30}N_{30}$  fullerene cluster is 4.3eV, at the HF level. All the geometries used in the calculations were previously optimized by means of the MNDO method and all the calculations employed the GAUSSIAN/92 program package. The Hartree-Fock calculations were performed for selected clusters using Dunning/Huzinaga valence double-zeta basis set.

### Reflection Spectroscopy of a Metal / Resonant Vapour Interface

M. ORIÁ, M. CHEVROLIER

Departamento de Física - Universidade Federal da Paraíba  
D. BLOCH, M. FICHET, M. DUCLOY  
Laboratoire de Physique des Lasers - Université  
Paris-Nord - FRANCE

The reflection spectroscopy has been shown to be an important tool to probe atomic vapours near an interface with a dielectric. This kind of technique gives access, for instance, to the homogeneous linewidth of resonant transitions by way of the frequency modulated selective reflection [1]. Among the possibilities opened by this technique, sensitive to very thin vapour layers

close to the surface, one is to obtain informations related to cavity-QED atomic effects [2]. Also the behaviour of neutral atoms close to a metallic surface may be explored by reflection spectroscopy techniques. These techniques include the use of inhomogeneous fields, like surface plasmons, and selective reflection from metal coated windows of cells containing atomic vapours. The reflection at an interface between a metal and a resonant vapour is considered in the realistic case of a dielectric substratum, metallic film and low density vapour structure. A simple semiclassical theory is used to describe the normally reflected field considering an incident monochromatic radiation which frequency is scanned around the atomic resonance (selective reflection), and the absorptive/dispersive character of the reflected field lineshape is observed, with strong dependence on the metallic film width. The experiments of selective reflection are realized with a frequency modulated laser at 852 nm and Cs-filled, silver-coated glass window cells. The resultant spectra are sub-Doppler and show the mixed contributions of the real and imaginary parts of the vapour refraction index. 1 -J. P. Woerdman, and M. F. H. Schuurmans, "Spectral narrowing of selective reflection from sodium vapour" Opt. Commun. 14 248 (1975); M. F. H. Schuurmans, "The fluorescence of atoms near a glass surface". Contemp. Phys. 21 (1980) 463. 2 - M. Oriá, M. Chevrollier, D. Bloch, M. Fichet, and M. Ducloy, "Spectral observation of surface-induced van der Waals attraction on atomic vapour" Europhys. Lett. 14(6) (1991) 527.

### Medidas Absolutas de Seções de Choque de Captura e Perda Eletrônica de Íons $\text{C}^{3+}$ Colidindo com Hidrogênio Atômico.

WILSON DE SOUZA MELO, MARCELO MARTINS  
SANT'ANNA  
UFF

ANTÔNIO CARLOS FONTES DOS SANTOS, GERALDO  
MONTEIRO SIGAUD, EDUARDO CHAVES  
MONTENEGRO  
PUC-Rio

WALTER MEYERHOF  
Stanford University

MANSUKH BHAMAL SHAH  
Queen's University of Belfast

São apresentadas medidas absolutas de seções de choque de captura e perda eletrônica de íons  $\text{C}^{3+}$  colidindo com hidrogênio atômico na faixa de energia de 1.1 a 3.5 MeV. Foram medidas também seções de choque de captura (simples e dupla) e perda de  $\text{C}^{3+}$  colidindo com  $\text{H}_2$  na faixa de energia de 1.0 a 3.0 MeV. Estes resultados estendem medidas anteriores de perda eletrônica para velocidades do projétil acima do limiar do *antiscreening*. As medidas foram realizadas no acelerador Van de Graaff de 4 MV da PUC-RIO. O alvo de Hidrogênio atômico foi obtido por dissociação térmica em um forno

de tungstênio, construído para esta finalidade, com calibração absoluta obtida pelos canais de dupla captura e de espalhamento elástico coulombiano<sup>2</sup>. Onde ocorre superposição, nossos dados estão em bom acordo com as medidas de Goffe et al<sup>1</sup>. Os resultados experimentais são comparados com cálculos baseados no modelo de elétron independente unitarizado com os canais de captura e perda determinados através das distribuições de probabilidade dadas pelas aproximações semiclássica e de primeira ordem, respectivamente<sup>3,4</sup>. O papel da contribuição de *it* antiscreening no desacordo entre teoria e experimento no regime de alta energia para o canal de perda é discutido a luz da aproximação de impulso e sua relação com colisões elétron íons.

1 T.V. Goffe, M.B. Shah and H.B. Gilbody, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **12**, 3763(1979).

2 M.M. Sant'Anna, Tese, PUC-Rio(1997), não publicada.

3 I. Ben-Itzhak, A. Jain and O.L. Welter, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **26**, 1711(1993).

4 E.C. Montenegro, G.M. Sigaud and W.E. Meyerhof, *Phys. Rev. A* **45**, 1575(1992). (CNPq, FINEP e NSF)

#### O Fator de Forma Molecular do $H_2$ em Colisões de Perda Eletrônica

MARCELO MARTINS SANT'ANNA, WILSON DE SOUZA MELO  
UFF

ANTÔNIO CARLOS FONTES DOS SANTOS, GERALDO MONTEIRO SIGAUD, EDUARDO CHAVES MONTENEGRO  
PUC-Rio

WALTER MEYERHOF  
Stanford University

MANSUKH BHARMAL SHAH  
Queen's University of Belfast

O efeito da estrutura molecular do  $H_2$  na perda eletrônica do projétil é estudado através da medida da razão das seções de choque de perda para projéteis de  $He^+$  incidentes em  $H_2$  e em  $H$ ,  $\sigma_{12}^{H_2}/\sigma_{12}^H$ . O uso desta razão para analisar o efeito do fator de forma molecular é conveniente, já que permite cancelar eventuais incertezas nos modelos teóricos. Além disso, o comportamento de  $\sigma_{12}^{H_2}/\sigma_{12}^H$  com a velocidade do projétil, comparado ao das seções de choque  $\sigma_{12}^{H_2}$ , é menos dependente da dinâmica da colisão e mais sensível ao fator de forma molecular.

Um forno de filamento de tungstênio foi usado para produzir um alvo gasoso de hidrogênio parcialmente dissociado. A dupla captura e o espalhamento elástico coulombiano foram usados para a calibração absoluta do alvo. Os dados apresentados neste trabalho são as primeiras medidas absolutas de  $\sigma_{12}^{H_2}/\sigma_{12}^H$ , tanto no regime de altas velocidades como no de velocidades intermediárias. Os resultados experimentais para  $\sigma_{12}^{H_2}/\sigma_{12}^H$ , juntamente aos dados para  $\sigma_{12}^{H_2}$ , são também usados

para obter seções de choque de perda eletrônica de  $He^+$  incidente em hidrogênio atômico.

As diferenças entre os resultados presentes e anteriores obtidos por Shah et al. e Hvelplund et al. são atribuídas principalmente a diferenças nos processos de normalização. Aqueles conjuntos de dados foram normalizados por dados anteriores para outros sistemas de colisão envolvendo  $H$ , que por sua vez, foram obtidos utilizando um forno calibrado pelas medidas absolutas de McClure para a captura por prótons em  $H$  e em  $H_2$ . Foi obtido um bom acordo com cálculos PWBA utilizando o fator de forma modificado de Weinbaum. O uso dos fatores de forma de Stewart e Hubbell-Cooper subestima os resultados experimentais.

#### OBTENÇÃO DE SEÇÕES DE CHOQUE DE IONIZAÇÃO ELÉTRON-ION A PARTIR DE DADOS DE PERDA ELETRÔNICA EM HIDROGÊNIO ATÔMICO

ANTÔNIO CARLOS FONTES DOS SANTOS, GERALDO MONTEIRO SIGAUD, EDUARDO CHAVES MONTENEGRO

PUC-Rio

MARCELO MARTINS SANT'ANNA, WILSON SOUZA MELO

UFF

WALTER MEYERHOF

Stanford University

MANSUKH BHARMAL SHAH

Queen's University of Belfast

Durante os últimos dez anos, um grande esforço teórico e experimental tem sido feito para estabelecer a equivalência entre a contribuição elétron-elétron para a perda eletrônica e a ionização por impacto de elétrons de íons multicarregados. Esta equivalência correlaciona dois ramos i a altas por um alvo neutro é relacionada a dois mecanismos. O primeiro é relacionado à interação nuclear do átomo alvo com o elétron ativo do projétil. Neste caso, o projétil é ionizado enquanto o alvo permanece no seu estado fundamental. A segunda possibilidade é a interação elétron-elétron entre os elétrons do alvo e o elétron ativo do projétil. Neste caso, tanto o projétil quanto o alvo são ionizados. Estes dois mecanismos tem sido chamados de "screening" e "antiscreening", respectivamente. Uma importante visão alternativa tem sido proposta na literatura na qual a contribuição elétron-elétron para a perda eletrônica pode ser simulada como uma colisão ionizante entre um elétron livre e o projétil. Vários autores adotaram esta idéia, identificando várias assinaturas da interação elétron-elétron e da interação elétron-núcleo. Estas descobertas permitem-nos olhar para a analogia mencionada acima do modo inverso, isto é, obter dados de ionização de íons por impacto de elétrons a partir de medidas de perda eletrônica. Do ponto de vista experimental, esta é uma alterna-

tiva vantajosa porque experiências de perda eletrônica são mais simples de realizar do que experiências com feixes cruzados de elétrons e íons. A análise desta possibilidade é o principal propósito deste trabalho. O uso de Hidrogênio atômico fornece não somente um perfil Compton agudo, fazendo deste alvo um candidato ex-

celente para simular um feixe de elétrons livres, bem como por eliminar processos de dois elétrons os quais ocorrem se alvos de dois elétrons, tais como Hidrogênio molecular ou Hélio são usados.

---

## FÍSICA ATÔMICA E MOLECULAR (Confinamento de Átomos e Colisões Frias)

### FÍSICA ATÔMICA E MOLECULAR (Confinamento de Átomos e Colisões Frias, Íons Pesados) – 11/06/97

#### Estudo da Colisão com Mudança de Estrutura Hiperfina para uma Amostra de Sódio e Potássio Aprisionados Simultaneamente em uma Armadilha Magneto-Óptica

M. S. SANTOS, A. ANTUNES, J. FLEMMING, S. C. ZILIO, V. S. BAGNATO

*Instituto de Física de São Carlos - USP*

P. NUSSENZVEIG

*Instituto de Física - Universidade de São Paulo*

Medimos a taxa de perdas por colisão com mudança de estrutura hiperfina para uma amostra de sódio e potássio frios como função da intensidade do laser aprisionador. O procedimento usual usado para medir a dinâmica de perdas se baseia no processo de carregamento da armadilha. Entretanto, no regime de baixas intensidades, o processo de carga da armadilha fica prejudicado. Neste trabalho, utilizamos uma técnica que nós desenvolvemos e já aplicamos ao aprisionamento de potássio. Essa técnica, nos permite alcançar o regime de baixas intensidades, inclusive abaixo da intensidade de saturação, sem as limitações da técnica tradicional. Nos concentramos no estudo de colisões no regime de baixas intensidades, em que as perdas por colisão com mudança de estrutura hiperfina do estado fundamental são dominantes. O estado fundamental do átomo de Sódio possui dois estados hiperfinos  $F = 1$  e  $F = 2$  separados por 1,77 GHz. De maneira que, em uma colisão com um átomo de potássio no estado fundamental em que ambos passam do estado  $F = 2$  para  $F = 1$ , o ganho em energia adquirido pelo átomo de Sódio é de 1,04 GHz. Esse ganho é convertido em energia cinética e é suficiente para que os átomos escapem da armadilha. Esse processo apesar de sempre estar presente só causa perdas quando o potencial confinante é raso, ou seja, a intensidade do laser aprisionador é baixa.

Esse trabalho é interessante para o estudo de átomos no estado fundamental pois pode trazer informações novas e relevantes a respeito dos potenciais de interação entre esses átomos a baixíssimas temperaturas.

Apoio: FAPESP, PRONEX-Centro de Excelência em Física Pura e Aplicada

#### ESTUDO EXPERIMENTAL DA IONIZAÇÃO FOTOASSOCIATIVA EM ÁTOMOS DE SÓDIO ULTRAFRIOS COM DUAS CORES

GUSTAVO DECZKA TELLES, SÉRGIO RICARDO MUNIZ, VANDERLEI SALVADOR BAGNATO, LUIS GUSTAVO MARCASSA

*Grupo de Óptica, DFCM / IFSC - USP*

A possibilidade de controlar e estudar o átomo isoladamente vem ganhando uma importância fundamental devido às inúmeras aplicações tecnológicas possíveis. Como exemplo de áreas que podem ser beneficiadas pelos resultados desse tipo de pesquisa citamos: a ciência dos materiais e a engenharia genética. O desenvolvimento de técnicas para o controle do movimento atômico já permitiu a obtenção de amostras bastante densas e frias, onde a natureza quântica do átomo se revela de forma extraordinária. Além disso, essas amostras são ideais para se investigar os processos colisionais entre átomos, que levam à formação de ligações químicas. A Ionização Fotoassociativa (PAI) é um processo colisional que envolve estados excitados em amostras de átomos com energia cinética muito baixa. Neste processo, dois átomos iniciam uma colisão com ambos em seus estados fundamentais, absorvem um único fóton e passam a uma interação potencial atrativa de longo alcance. Nessa situação, eles são acelerados um contra o outro, ganhando energia cinética. Em seguida, o par absorve outro fóton que os leva ao estado duplamente excitado, onde há probabilidade dos átomos atingirem uma pequena distância relativa e daí ionizar. Isso torna possível a investigação dos passos intermediários numa colisão que, nesse caso, resulta na formação de moléculas ionizadas. A grande vantagem de se estudar tal processo está na facilidade de detecção direta do número de íons formados, produto da colisão. Neste trabalho, realizou-se experimentos para estudar o comportamento da PAI em átomos de Sódio através da varredura de duas frequências distintas, envolvidas em etapas individuais do processo. Finalmente, resultados como aqueles obtidos aqui não foram ainda reportados na literatura. Além disso, a determinação dos valores e parâmetros pertinentes ao problema, apresentou resultados que vêm a comprovar uma importante teoria dessa área do conhecimento conhecida como teoria do Equilíbrio Local.

### Measurement of Collisional Losses in a Rubidium Trap

SUBRATA K. DUTTA

*Center for Ultrafast Optical Science University of Michigan Ann Arbor, MI USA*

GUSTAVO DECZKE TELLES, RICARDO A. DE S. ZANON, SÉRGIO RICARDO MUNIZ, VANDERLEI SALVADOR BAGNATO, LUIS GUSTAVO MARCASSA  
*Instituto de Física de São Carlos - USP São Carlos, SP*  
JOHN WEINER, WILLIAM DEGRAFFENREID  
*University of Maryland, MD USA*

We have studied the loss due to collisions in a Rb atomic trap. Collisions between trapped atoms result in a gain of kinetic energy which can result in the atoms escaping from the trap. These losses limit the maximum density and number that the trap can support. There are two collisional loss mechanisms: radiative escape (RE) and fine structure change (FSC). Our goal is to quantify the loss due to each of these mechanisms. The total loss due to collisions has been measured before. In our study, we in addition make the first measurement of the FSC loss. The total loss is the sum of RE and FSC and so by knowing the FSC loss, we thus can calculate RE. The trap operates by exciting Rb atoms from the  $5S_{1/2}$  ground state to the  $5P_{3/2}$  excited state. Collisions can occur between an atom in the ground state and one in the excited state due to the  $R^{-3}$  potential between them. FSC occurs when an atom pair on the  $5S_{1/2}$ - $5P_{3/2}$  molecular potential makes a transition to the  $5S_{1/2}$ - $5P_{1/2}$  potential due the crossing of the potentials, and the pair gains an energy equal to the difference in fine structure energies. This added kinetic energy is sufficient for the atom pair to escape from the trap. Because the only mechanism for the  $5P_{1/2}$  state being populated is by FSC, we determine the FSC loss by measuring the population in  $5P_{1/2}$ . To do this, we shine a probe beam tuned on the trapped atoms to the transition  $5P_{1/2} \rightarrow 8S_{1/2}$ . From  $8S_{1/2}$  state, the atom needs to absorb one more photon to ionize. The  $Rb^+$  ions are then counted using an ion detector. Thus by counting ions we can calculate the population in  $5P_{1/2}$ . Similar measurements were also made in a Ks trap.

### RESONANT COOLING IN POSITION-DEPENDENT MAGNETIC FIELDS

JAYME VICENTE DE LUCA FILHO, REGINALDO DE JESUS NAPOLITANO, VANDERLEI SALVADOR BAGNATO

*Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo*

Recently there has been much interest in confining an ultracold atomic vapor of neutral atoms in a spatially dependent magnetic field. It has been argued that interaction with a slowly-varying radio frequency external magnetic field can cause evaporation, cooling the va-

por to the Bose-Einstein phase transition. The interaction with the ramping down external radio frequency is thought to remove the atoms oscillating with gradually lower energies, thereby cooling the atomic vapor. In this work we show that interaction with the radio frequency produces other effects besides evaporation; in particular, not all the resonant atoms are removed by the radio frequency. The combination of a resonant radio frequency and a spatially dependent magnetic field is capable of trapping the atoms to oscillate about the resonance point by a nonlinear mechanism. The spatially dependent magnetic field is obtained by two coils placed in the anti-Helmholtz configuration, which produce a field varying linearly away from the midpoint between the coils. In the original experiments it was also used a bias magnetic field rotating about the  $z$  axis for reasons of keeping the adiabatic effects that confine the atoms, preventing Majorana transitions. We consider this special configuration, but we note that only a position dependent magnetic field is the essential condition for the effect here described. We consider the dynamics of a neutral atom of magnetic moment  $\mu$  in this spatially dependent magnetic field. Interaction with a resonant radio frequency brings in a novel nonlinear dynamics for the slow motion of the center of mass. We derive asymptotically exact equations for the slow dynamics, which are compared to the numerical solution of the full nonlinear problem. We also calculate the frequency of small oscillations for resonant trapped motions.

### SUPRESSÃO DE COLISÕES INELÁSTICAS ENVOLVENDO ÁTOMOS FRIOS NO ESTADO FUNDAMENTAL.

SÉRGIO RICARDO MUNIZ, LUIS GUSTAVO MARCASSA, REGINALDO NAPOLITANO, GUSTAVO DECZKA TELLES, SÉRGIO CARLOS ZILIO, VANDERLEI SALVADOR BAGNATO  
*Grupo de Óptica, DFCM / IFSC - USP*

O avanço alcançado na área de manipulação de átomos neutros, via pressão de radiação, ao longo dos últimos anos é indiscutível. Desde os primeiros experimentos de desaceleração de feixes atômicos, no início da década de 80, quando átomos de Sódio eram resfriados a temperaturas de algumas centenas de graus Kelvin (cerca de 16% da temperatura inicial) em amostras com densidades de cerca de  $10^6$  átomos/cm<sup>3</sup>, até os dias atuais onde é possível obter amostras a temperaturas da ordem de  $nK$  com densidades que podem chegar a  $10^{12}$  átomos/cm<sup>3</sup>, obteve-se progressos extraordinários. Durante este período um dos assuntos que tem sido extensivamente estudado é o das colisões ultrafrias. Uma das razões desse interesse é fato de que esse tipo de processo limita a densidade das armadilhas magneto-ópticas. Dentre os vários processos colisionais, um é

de particular interesse: as colisões que ocorrem entre átomos no estado fundamental, também conhecida como colisão por mudança de estrutura hiperfina. Neste trabalho relatamos a observação da supressão deste processo em átomos ultrafrios de Sódio. Mostramos que o processo utilizado para suprimir a fotoionização associativa, (*Phys. Rev. Lett.* **76**, 2033 (1996)) é também capaz de suprimir os processos colisionais envolvendo átomos no estado fundamental. Observamos com esse esquema uma supressão de até 80% na taxa de perda de átomos da armadilha. Os resultados experimentais são comparados com uma teoria de multicanais acoplados e com um modelo Landau-Zener simples. Constatamos que ambas as teorias concordam com os resultados para baixas intensidades, porém no regime de altas intensidades, os experimentos mostram uma saturação que é qualitativamente descrita apenas pela teoria de multicanais. Estes resultados são importantes, pois mostram que é possível controlar processos que causam perda de átomos (e consequentemente limitam a densidade) em sistemas condensados de Bose-Einstein.

**MeV NITROGEN BOMBARDMENT OF LiF:  
FROM THE NUCLEAR TO THE  
ELECTRONIC SPUTTERING REGIMES**

J. A. M. PEREIRA, E. F. DA SILVEIRA

*PUC-Rio*

K. WIEN

*Institut für Kernphysik, Technische Hochschule, Darmstadt*

The time-of-flight technique was used to measure axial kinetic energy distributions of secondary ions emitted from LiF surfaces bombarded with nitrogen ions in the 0.075 -7.5 MeV range. Desorption yields were also measured as function of the projectile energy. The analysis of the Li<sup>+</sup> and F<sup>-</sup> secondary ions indicate that, at energies below 0.5 MeV, these ions are sputtered from the surface by a linear collision cascade (nuclear sputtering). This is clearly seen in the asymptotic behavior of the energy distribution ( $E_z^{2(m-1)}$ , where  $0 < m < 1$ ). The  $m$  factor is related to the repulsive potential of the atoms in the cascade. Pair potentials between Li<sup>+</sup> and F<sup>-</sup> were calculated using the Hartree-Fock method and the different  $m$ -values ( $m \sim 0$  for Li<sup>+</sup> and  $m=2/5$  for F<sup>-</sup>) are in good agreement with the experiment. Both ions are emitted with similar kinetic energies. At projectile energies above 0.5 MeV there is a change in the Li<sup>+</sup> emission behavior: the desorption yield increases because of the electronic sputtering contribution. In the energy spectra this mechanism produces a distribution with an exponential decay and produces lower energies of emission. The electronic sputtering contribution is maximum at 2.0 MeV in an energy range where the electronic energy loss is still increasing. These results can be interpreted considering the track dimensions and the linear collision cascades theory.

## FÍSICA ESTATÍSTICA (Sistemas Dinâmicos e Caos)

### FÍSICA ESTATÍSTICA (Sistemas Dinâmicos e Caos) -- 11/06/97

#### BOLHAS CAÓTICAS

ALBERTO TUFÁILE, JOSÉ CARLOS SARTORELLI  
IFUSP-DFGE-LFNL

O estudo de bolhas em líquidos tem grande interesse em várias aplicações [1,4]. Na formação de bolhas de ar em líquidos observamos algumas características dos sistemas caóticos como duplicação de período através de bifurcação flip [5,6], período 3 [7] e comportamento não periódico medindo-se o tempo entre bolhas [8]. O sistema pode ser controlado por uma onda sonora periódica injetada no tubo e novos resultados foram obtidos como aceleração das bolhas, formação de toro com travamento de frequência em período 5. O experimento é mais sensível ao controle sonoro quando a frequência de ressonância do tubo é próxima à frequência em bolhas. Também serão apresentados resultados quando se acrescenta uma terceira fase (óleo), em condições de borbulhamento que possibilitam a formação de uma coluna de água dentro do óleo, por onde as bolhas sobem com maior velocidade do que no óleo.

[1] G. B. Wallis, ONE DIMENSIONAL TWO-PHASE FLOW, McGraw-Hill Book Co., New York (1996).

[2] D. A. Drew, ANNUAL REVIEW OF FLUID MECHANICS 15, 261 (1993).

[3] C. Pauchon, S. Banerjee, International Journal of Multiphase Flow 12, 559 (1986).

[4] Y. Taitel, D. Barnea, A. E. Dukler, AIChE Journal 26, 345 (1980).

[5] J. Argyris, G. Faust, M. Haase, AN EXPLORATION OF CHAOS, North-Holland, 333 (1994).

[6] M. J. Feigenbaum, QUANTITATIVE UNIVERSALITY FOR A CLASS OF NONLINEAR TRANSFORMATIONS, J. Stat. Phys. 19, 25 (1978).

[7] T. Y. Li, J. A. Yorke, PERIOD THREE IMPLIES CHAOS, Amer. Math. Monthly 82, 985 (1975).

[8] A. Tufaile, J. C. Sartorelli, W. M. Gonçalves, CAOS NUM EXPERIMENTO HIDRODINÂMICO SINTONIZADO, XIX ENFMC Resumos, 96 (1996).

#### Exploring the Collective Behavior on the Coupled Quartic Map

LEONARDO GREGORY BRUNET, JASON A. C. GALLAS

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Since the last decade, different systems composed of coupled map lattices have been studied as simple models to describe extended systems such as thermal convection. Despite of the enormous reduction on the degrees freedom so obtained such systems can not be analytically integrated. Most works found in the literature [1] use the logistic map to describe the local dynamics, this restricts the local dynamics to just one attractor and the competition due to coupling of different attractors on different units is *a priori* excluded. We have approached this subject generalizing the description of the local dynamics [2] and the way these units couple [3].

Starting from random initial conditions we ran a system composed of units whose local dynamics follows of quartic map [2],

$$x_{t+1} = (x_t^2 - a)^2 - b$$

, where  $x_t$  is a real variable representing some quantity of interest measured at time  $t$ ,  $a$  and  $b$  are real parameters. After each generation  $t$  the value of  $x_t$  is averaged over the first neighbors. A square lattice of sizes up to  $512 \times 512$  units is the geometry used.

We have found the presence of non-trivial collective behavior (NTCB) over a wide range of parameters even on regions where the local dynamics is periodic. This has been compiled on an image on the parameter space showing the regions of NTBC and the regions where the system synchronizes. We have also found that the NTCB is robust, that is, small variations of the parameters of the local map do not alter the collective behavior

#### References

1- H. Chaté, A. Lamaitre, Ph. Marcq, P. Manneville, **Physica A** 224 (1996) 447-457 and references therein.

2 - J.A.C. Gallas, **Physica A** 202 (1994) 223, **Phys. Rev. E** 48 (1993) R4159.

3 - Brunnet, Chaté, Manneville, **Physica D** 78 (1994) 141.

#### TEORIA DE MATRIZES ALEATÓRIAS E O PROBLEMA DE CROSSOVER EM CAOS QUÂNTICO

A. M. S. MACÊDO, GLAUBER J. F. T. DA SILVA  
UFPE

Neste trabalho apresentamos uma teoria geral de matrizes aleatórias para a descrição do crossover integrável-caótico em sistemas que exibem caos quântico. Sistemas deste tipo têm sido objeto de inúmeras investigações recentes, incluindo simulações numéricas e ex-

perimentos em cavidades balísticas construídas em heteroestruturas semicondutoras. A conexão entre caos quântico e a teoria de matrizes aleatórias é bastante robusta e têm sido exaustivamente verificada em cálculos analíticos e simulações. Nossa abordagem consiste na dedução de uma equação de Fokker-Planck, que descreve um movimento Browniano numa variedade diferenciável definida por simetrias gerais do sistema. Estas simetrias especificam classes de universalidade denominadas ortogonal, unitária e simplética. Um sistema é classificado como ortogonal quando possui simetria de reversão temporal na ausência de interação spin-órbita; na ausência desta simetria ele é classificado como unitário e finalmente se o sistema apresenta interação spin-órbita e simetria de reversão temporal ele é dito simplético. O movimento Browniano é efetuado por certas matrizes aleatórias relevantes para o problema específico em estudo. Para sistemas isolados a matriz aleatória relevante é a própria Hamiltoniana, enquanto que para sistemas abertos podemos usar a matriz de espalhamento ou a matriz de transferência. Mostramos que sob certas condições a equação de Fokker-Planck multidimensional pode ser resolvida analiticamente usando a técnica de funções biortogonais. Resultados para o ensemble de Legendre são discutidos e comparados com outras abordagens, dando particular ênfase à estatística espectral local nas bordas e no centro do suporte da densidade média de níveis. Concluímos apresentando uma breve discussão de possíveis implicações da teoria aqui apresentada no esquema global de classificação de ensembles de matrizes aleatórias em termos de espaços simétricos associados.

### CARA OU COROA: UM MODELO DE PASSAGEM DO DETERMINISMO AO ALEATÓRIO

FILADELFO CARDOSO SANTOS, ILDEU DE CASTRO MOREIRA

*Instituto de Física - UFRJ*

O lançamento de uma moeda e a análise posterior de sua face (cara ou coroa), após o seu retorno a uma superfície horizontal, é um exemplo paradigmático de um evento aleatório. Por outro lado, o lançamento de um objeto em um campo gravitacional constante - seu movimento de subida e descida - é um dos exemplos clássicos de sistema mecânico completamente determinista. No lançamento da moeda convivem, portanto, dois aspectos aparentemente contraditórios: o determinismo no movimento da moeda, com sua previsibilidade absoluta, e a aleatoriedade máxima na obtenção de cara ou coroa. O propósito do trabalho foi construir um modelo simplificado para o lançamento da moeda que

permitisse esclarecer melhor e quantificar a passagem do comportamento determinista para o comportamento aleatório. A moeda, inicialmente colocada em um plano horizontal, é lançada com alguma incerteza inicial em sua velocidade. As equações da mecânica são utilizadas para calcular todo o movimento subsequente da moeda. Fizemos a simulação computacional de um grande número de lançamentos, o que permitiu a construção de um gráfico em cores que esclarece como ocorre a passagem do comportamento determinista (quando a incerteza inicial não existe) para o aleatório. Pelo gráfico podemos analisar também as situações intermediárias, de previsibilidade parcial, quando os efeitos da incerteza inicial e do valor do impulso total não são ainda suficientes para produzir uma probabilidade igual para cara ou coroa. Mostramos também que a convergência para a equiprobabilidade final de cara ou coroa independe da distribuição de velocidades iniciais.

### ÓRBITAS PERIÓDICAS E SUAS BIFURCAÇÕES EM BILHARES MAGNÉTICOS

LUIS GREGÓRIO GODOY DE V. DIAS DA SILVA,  
MARCUS A. MARTINEZ DE AGUIAR  
*UNICAMP*

Recentes avanços técnicos na área de litografia em heteroestruturas tornaram possível a observação da dinâmica de elétrons confinados em potenciais integráveis e caóticos. Tal dinâmica pode ser muito bem aproximada pelo movimento em poços de potencial infinito, os chamados Bilhares, sistemas físicos bidimensionais onde uma partícula move-se livremente e sofre reflexões especulares ao atingir uma fronteira. A geometria da fronteira determina a característica caótica ou integrável do movimento eletrônico. Um modelamento teórico possível neste contexto é o de um gás de elétrons semi-clássico confinado. A introdução de um campo magnético ortogonal ao plano do Bilhar permite o estudo de propriedades magnéticas do gás, tais como susceptibilidade e magnetização. O papel das Órbitas Periódicas e suas bifurcações é de grande relevância neste modelo. Podemos destacar que correções semi-clássicas de primeira ordem para a densidade de níveis dependem intimamente das Ações e dos Períodos destas órbitas, via fórmula de Gutzwiller. Neste trabalho, apresentamos um método numérico de busca de Órbitas Periódicas em dois tipos de Bilhares Magnéticos: o Bilhar Quadrado e o Bilhar de Sinai. Usando simuladores numéricos para estes sistemas, é feita uma busca por "órbitas-candidatas" diretamente na Seção de Poincaré. Através de iterações sucessivas, obtemos a convergência da órbita periódica correspondente e de sua *Matriz de Monodromia M*. São determinadas numericamente a

Ação clássica e a estabilidade da órbita, dada pelos autovalores de  $M$ . O comportamento do Traço de  $M$  em função do campo nos permite encontrar as bifurcações com duplicação de período dentro de uma família de órbitas de mesmo período.

### Bifurcações e Caos para o Bouncing Ball Quase-Periódico

CÉSAR R. DE OLIVEIRA, PAULO S. GONÇALVES  
*UFSCar - Departamento de Matemática*

Systems subjected to quasiperiodic forces can present rather "exotic" behaviors. Here we begin with a standard system, the so-called periodic bouncing ball problem (PBB). The (PBB) consists of a particle, in a constant gravitational field, falling down vertically on a periodically oscillating table. From the point of view of nonlinear dynamics the PBB is very interesting since it presents a cascade of period doubling bifurcations, strange attractors and is relatively easy to be studied experimentally.

We then investigate the influence of a second frequency on the bouncing ball motion, i.e., how the second frequency modifies the (PBB) periodic motion as well as its chaotic motion.

Although the map that describes the ball motion is

exact, it is an implicit function and this puts some difficulties on its investigations. For instance, in theoretical studies one usually assumes that the maximum height the ball travels between impacts is much larger than the amplitude of oscillations of the table, and we are not aware of any calculations of the largest Lyapunov exponent for this model.

We indicate how to compute (numerically) the largest Lyapunov exponent for systems given by implicit maps and apply this procedure to the case of the bouncing ball; we then check that, in fact, chaotic attractors occur for the (PBB), since we have found cases whose attractors have positive Lyapunov Exponents. We have found a series of nontrivial bifurcations when a second frequency is turned on, with transitions from regular motion to chaotic attractors and vice versa. We have also, from the numerical point of view, found robust cases of (apparently) nonperiodic attractors with negative values of the largest Lyapunov exponent.

## Palestra Convidada – 12/06/97

---

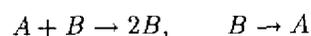
### PROPAGATION VERSUS EXTINCTION OF AN EPIDEMIC: A REACTION-DIFFUSION MODEL

H. J. HILHORST

*Université de Paris XI, Centre d'Orsay*

Healthy and sick individuals ( $A$  and  $B$  particles) diffuse freely in a world of dimension  $d$ . Sick individuals spontaneously recover (at rate  $1/\tau$ ), but upon encounter infect healthy ones (at rate  $k$ ). The epidemic therefore tends to propagate (to become extinct) in regions with high (low) population density  $\rho$ . Below a critical density  $\rho_c$  global extinction occurs, and an important question is how the epidemic evolves near this threshold, which is analogous to a phase transition point in equilibrium critical phenomena. In particular, at threshold strong local fluctuations are expected to occur, with a potentially decisive impact on the global critical behavior.

The evolution of the epidemic may be formulated as a diffusion-reaction-decay process of two chemical species,



This is but one instance of a large class of such processes whose theoretical study has considerably advanced over the last decade. On this example we illustrate some of the basic analytic approaches: rate equations and path integral formulation. Answers for critical exponents are obtained within mean-field theory and in an  $\epsilon$  expansion (carried out by Wilson renormalization) below the critical dimension  $d_c = 4$ . New results concern (i) the case in which the diffusion constants  $D_A$  and  $D_B$  of the  $A$  and  $B$  particles are unequal, and (ii) critical initial time behavior at the extinction threshold. Heuristic interpretations are offered, a comparison with Monte Carlo simulations is made, and some unresolved questions are indicated.

---

## FÍSICA ESTATÍSTICA (Sistemas Dinâmicos e Caos) - 13/06/97

### O ALGORITMO DE CONTAGEM DE CAIXAS MÓVEIS.

N. N. OIWA, N. FIEDLER-FERRARA  
IF/USP

Algoritmos para estimar a função de distribuição de probabilidades  $P$  têm sido utilizados nos métodos para caracterização de séries temporais associadas a atratores de sistemas não lineares. Contudo, existem muitas limitações para determinar  $P$  nesses algoritmos, uma vez que eles cobrem o atrator utilizando uma grade fixa. Por exemplo, a estimativa das dimensões generalizadas de Renyi e do espectro de singularidades nos algoritmos baseados em métodos de contagem de caixa (Block *et al.*, **A42**, 1869 (1990)) não são triviais porque eles são muito sensíveis à posição das caixas que cobrem o atrator (Yamaguti, dissertação de mestrado, USP (1992)). Propõe-se um novo método para contornar esse problema. Trata-se de um algoritmo baseado no trabalho de Friedman *et al.* (ACM Trans. Math. Soft. **3**, 209 (1977)). Nesse algoritmo o atrator é coberto por caixas de tamanhos diferentes. Nós o adaptamos para cobrir o atrator utilizando caixas com o mesmo comprimento. A rotina é recursiva e os dados estão estruturados segundo uma árvore binária. Nesse método as caixas que cobrem o atrator movem-se no espaço adaptando-se à geometria do atrator. Assim, otimiza-se o número de caixas. Comparamos o algoritmo com o método devido a Block *et al.* Além disso, apresentamos duas aplicações desse algoritmo: o cálculo dos espectros de Lyapunov e de singularidades.

### BOUNDARY CONTRIBUTIONS TO THE SEMICLASSICAL TRACES OF THE BAKER'S MAP

FABRICIO TOSCANO, RAUL OSCAR VALLEJOS  
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF).  
MARCOS SARACENO

Departamento de Física, Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA), Buenos Aires, Argentina.

We evaluate the leading asymptotic contributions to the traces of the quantum baker's map propagator. Besides the usual Gutzwiller periodic orbit contribution, we identify boundary paths giving rise to anomalous  $\log \hbar$  terms. Some examples of these anomalous terms are calculated both numerically and analytically.

The usual derivation of the periodic orbit trace formula for chaotic systems extracts as stationary phases the actions of isolated periodic orbits while the amplitudes are given by the contributions of their hyperbolic nei-

ghourhoods. However, when the orbits lie on discontinuities or at the boundary of classically allowed regions, anomalous contributions are expected. We analyze and calculate the origin of these contributions for the simplest piecewise-linear map: the baker's transformation. In spite of many generic properties and its inherent simplicity, the baker's map has shown some "anomalies", both in the statistical properties of the quasi-energy spectrum and in the asymptotic behaviour of the lowest traces of the propagator. It is now understood that these anomalies are related to the discontinuous way in which the map transforms phase space and to the singular nature of the fixed point: it lies on the discontinuity and does not have a whole hyperbolic vicinity (in this sense, all the other periodic points are regular). It has been shown that when the map is quantized, and its semiclassical traces considered in the context of periodic orbit theory, the contributions coming from singular symbols (related to the fixed point and its repetitions) show anomalous terms with a  $\log \hbar$  dependence. Some indications of anomalous behaviour for regular symbols (related to regular periodic orbits) were also communicated.

Our main result is that not only the singular symbols contribute anomalously to the trace but *every* regular symbol also does. We trace these contributions to classical paths (not periodic orbits) whose action is stationary at the vertices of classically allowed (hypercube-shaped) domains.

### ESCOAMENTO DE UM FLUIDO EM ROTAÇÃO NUMA CAVIDADE SEMI-ABERTA: COMPORTAMENTO ASSINTÓTICO DE SOLUÇÕES NUMÉRICAS PRÓXIMO A BIFURCAÇÃO PARA ESTADO NÃO ESTACIONÁRIO.

MARCUS B. LACERDA SANTOS

UnB

JENS N. SORESENSEN

DTU, Dinamarca

O problema clássico de um fluido viscoso girando dentro de uma cavidade cilíndrica fechada tem sido revivido nos últimos anos por ser um bom sistema-modelo para se estudar rotas para o caos e turbulência. Recentemente realizamos simulações numéricas [1] numa variante desse problema, que se caracteriza pela presença de uma superfície livre. Especificamente, a configuração estudada consiste de um recipiente cilíndrico que contém o líquido, que é posto em rotação por um disco em contato com a superfície do mesmo. O grau de abertura da cavidade é controlado pelo raio do disco rotor, geralmente menor que o raio da cavidade. Os resultados são obtidos através da solução numérica das equações de Navier-Stokes dependente do tempo e com simetria axial. O estudo focaliza a bifurcação (de Hopf) para o estado não estacionário (oscilatório), que

pode ser considerado um primeiro precursor da turbulência. Valores correspondentes do número de Reynolds crítico são obtidos para uma série de cavidades com diferentes graus de abertura. Uma dificuldade com esses cálculos é que as computações tornam-se extremamente custosas no limite de cavidades muito abertas. No presente trabalho mostramos, entretanto, que tal dificuldade pode ser contornada ao se reconhecer que, justamente nesse limite, um cálculo analítico aproximado leva a resultados razoáveis que complementam o domínio paramétrico de interesse.

[1] M.B.L. Santos e J.N. Sørensen, *Phys. Fluids* 8 (1996) 3057.

### CONTROLE DE CAOS EM UM DIODO LASER

ELISANGELA FERRETTI MANFRA, IBERÊ LUIZ CALDAS  
IFUSP

Devido à crescente importância dos lasers de semicondutor para as comunicações ópticas, estudos teóricos e experimentais sobre instabilidades e caos em tais dispositivos têm sido realizados por vários grupos de pesquisa em todo mundo, entre os quais pode-se citar o de Bennet et. al., cujo trabalho analisa a dinâmica de lasers com restrições em comprimento de onda, tais como VCEL's e DFB's, quando sob modulação direta. O resultado dessa análise mostrou a existência de diferentes regimes dinâmicos (quasiperiódicos, periódicos e caóticos) para diferentes valores da corrente de modulação. Apesar dos regimes caóticos serem geralmente indesejáveis em dispositivos com aplicações tecnológicas, eles podem se tornar vantajosos se alguma técnica de controle de caos puder ser aplicada. Atualmente há muitos métodos de controle de caos e grande parte deles deriva do método de Grebogi, Ott e York em que é necessário haver algum tipo de realimentação. Em outros métodos, como o de Braiman e Goldhirsh, a realimentação não é necessária. Neste trabalho, usou-se o método de Braiman e Goldhirsh para realizar (através de simulações numéricas) o controle de caos para o laser de diodo estudado por Bennet. O método foi aplicado acrescentando-se à corrente de modulação outro termo de corrente alternada a que denominou-se perturbação (é uma corrente de pequena amplitude e com frequência diferente da de modulação). A análise dos expoentes de Lyapunov e espectros para diferentes valores dos parâmetros da perturbação (amplitude e frequência) mostrou que há supressão do caos para alguns desses valores. Em vários casos, esta supressão está associada à existência de órbitas periódicas. Escolheu-se o método de Braiman para a simulação do controle de caos neste caso porque este pode, facilmente, ser reproduzido num experimento, como o realizado por F-J. Kao e J-L. Chen em que um diodo laser semelhante ao citado aqui é utilizado para codificar informação depois

de submetido a este método de controle.

### PROCESSOS MARKOVIANOS NA EXPERIÊNCIA DA TORNEIRA GOTEJANTE

WILK MARCELINO GONÇALVES, JOSÉ CARLOS SARTORELLI, REYNALDO DANIEL PINTO  
IFUSP

A experiência da torneira gotejante apresenta uma grande diversidade de fenômenos não lineares, tais como crises, intermitências, duplicações de período, histereses [1] e bifurcação de Hopf [2].

Devido a simetrias geométricas presentes em alguns atratores experimentais, foram empregadas técnicas de dinâmica simbólica para a geração de seqüências simbólicas obtidas a partir de partições tridimensionais [3].

Recentemente Penna [4] mostrou que os tempos entre batidas do coração humano saudável e os tempos entre gotas são anticorrelacionados. Dados similares do coração humano foram analisados por Destexhe [5] empregando técnicas de dinâmica simbólica, determinando que processos Markovianos de ordem superior estão presentes.

Neste trabalho são apresentados os resultados da determinação da ordem de processos Markovianos presentes nos dados experimentais da experiência da torneira gotejante.

#### REFERENCIAS

- [1] Sartorelli J C, Goncalves W M, and Pinto R D (1994) Crisis and intermittence in a leaky faucet experiment, *Phys. Rev.*, E49, 3963.  
[2] Pinto R D, Goncalves W M, Sartorelli J C, and de Oliveira M J (1995) Hopf bifurcation in a leaky faucet experiment, *Phys. Rev.*, E52, 6892.  
[4] Goncalves W M (1996) A experiencia da torneira gotejante, Phd Thesis, Instituto de Fisica, Universidade de Sao Paulo: Sao Paulo.  
[3] Penna T J P, de Oliveira P M C, Sartorelli J C, Goncalves W M, and Pinto R D (1995) Long-range anticorrelation and non-Gaussian behavior of a leaky faucet, *Phys. Rev.*, E52, R2168.  
[5] Destexhe A (1990) Symbolic dynamics from biological time series, *Phys. Lett.*, A143, 373.

### PROPRIEDADES DINÂMICAS DE UM MODELO DE CRISTAL BCC COM FRACA ANARMONICIDADE

C. G. RODRIGUES, V. I. ZUBOV, M. F. PASCUAL  
*Instituto de Física, UFG*

Os momentos de correlação quadrático (QCM) entre os deslocamentos atômicos dos átomos de seus pontos de equilíbrio na rede e seus deslocamentos relativos médios quadráticos (MSRD) expressando as amplitudes efetivas das vibrações atômicas nos cristais são as mais im-

portantes características da dinâmica de redes. Neste trabalho usamos o Método Correlativo Não Simetrizado do Campo Autoconsistente (CUSF) para calcular QCM e MSRD entre primeiros, segundos, terceiros e quintos vizinhos num modelo de cristal fracamente anarmônico com rede BCC. Devido ao menor empacotamento de um cristal BCC, as interações entre átomos mais distantes são consideradas, pois, elas têm um papel importante, em particular, tais interações fornecem a estabilidade termodinâmica da rede. Discutimos também a utilização de diferentes potenciais interatômicos. Devido a simetria do cristal ambas componentes transversais das correlações entre primeiros, segundos e quintos vizinhos são iguais. Em geral os momentos de correlação transversal são muito menores que os longitudinais. Alguns momentos são negativos, isto implica que os átomos correspondentes nestas direções oscilam fora de fase. A utilização de diferentes potenciais (Morse e Lenard-Jones) fornecem resultados muito próximos, exceto para  $C_{xx}(1)$  e  $C_{xx}(5)$ : nestes existe uma considerável diferença entre os resultados quando aumentamos a temperatura, especialmente para primeiros vizinhos, mostrando que em altas temperaturas os efeitos anarmônicos são fortes. Num modelo de cristal BCC o QCM e o MSRD são maiores que aqueles num cristal "close-packed FCC" recentemente estudado [1]. Notamos que a aproximação de fraca anarmonicidade aqui usada fornece bons resultados quantitativos em temperaturas abaixo do ponto de fusão.

[1] *Modern Physics Letters B*10, No 21, 1043-1051 (1996)

### CÁLCULO DAS PROPRIEDADES DINÂMICAS DE UM MODELO DE CRISTAL FCC COM FORTE ANARMONICIDADE

C. G. RODRIGUES, V. I. ZUBOV, M. F. PASCUAL  
*Instituto de Física, UFG*

O CUSF Método Correlativo Não Simetrizado do Campo Autoconsistente, tem sido utilizado com sucesso para calcular os Momentos de Correlação Interatômica (QCM) e os Desvios Relativos Médios Quadráticos (MSRD) dos deslocamentos atômicos entre os vizinhos mais próximos de modelos de cristais com fraca anarmonicidade [1,2]. Neste trabalho calculamos QCM e MSRD entre primeiros, segundos, terceiros e quartos vizinhos para um cristal cúbico de face centrada utilizando uma aproximação de forte anarmonicidade e teoria de perturbação de segunda ordem. Para altas temperaturas, a anarmonicidade afeta significativamente as propriedades aqui estudadas. Para os diversos vizinhos são comparadas as aproximações harmônica, quase harmônica, de fraca e forte anarmonicidade. A análise numérica dos resultados é feita utilizando-se o potencial de Lenard-Jones, onde tomamos para a profundidade do poço do potencial o valor tópico

do Argônio que cristaliza-se na forma FCC. Plotamos então as curvas de QCM e MSRD variando-se a temperatura até a temperatura de fusão ( $T_m$ ) e até a temperatura de perda de estabilidade ( $T_s$ ). As correlações para a rede FCC com forte anarmonicidade são maiores que para o caso de fraca anarmonicidade recentemente estudado [2]. A baixas temperaturas as aproximações harmônica, de fraca e forte anarmonicidade convergem, porém, os intervalos de temperatura nos quais elas coincidem não são os mesmos para os diversos momentos de correlações e desvios relativos estudados. Quanto aos Desvios Relativos Médios Quadráticos mais uma vez podemos ver o importante papel dos efeitos anarmônicos em altas temperaturas.

[1] *Modern Physics Letters B*9, No 14, 839-847 (1995).

[2] *Modern Physics Letters B*10, No 21, 1043-1051 (1996).

### Transição Suave para o Caos na Experiência da Torneira Gotejante

REYNALDO DANIEL PINTO, JOSÉ CARLOS SARTORELLI

*Instituto de Física da USP - CX. Postal 66318 05315-970  
São Paulo - SP*

THADEU JOSINO PEREIRA PENNA, PAULO MURILO CASTRO DE OLIVEIRA

*Instituto de Física - Univ. Federal Fluminense - 24210-340  
Niterói - RJ*

Temos observado muitos comportamentos complexos, como duplicações de período, bifurcações, leis de escala, crises e intermitências[1-5] na experiência da torneira gotejante.

Esta grande quantidade de fenômenos não lineares torna esta experiência um modelo de sistema dinâmico muito interessante. Entretanto, pelo que sabemos até o momento, não existem evidências quantitativas da caoticidade do sistema, como por exemplo cálculos de expoentes de Lyapunov confiáveis.

Neste trabalho, usamos um programa[6] desenvolvido para calcular o expoente de Lyapunov dominante a partir de séries experimentais ruidosas aplicado a um conjunto de 31 atratores em altas taxas de vazão (aproximadamente 37 gotas/s).

Iniciando em um atrator periódico ( $\lambda = 0$ ) os resultados mostram um crescimento suave do expoente de Lyapunov com a diminuição da taxa de vazão. Tal comportamento pode ser devido a uma transição para o caos de acordo com o modelo de Curry-Yorke[7].

#### REFERÊNCIAS:

[1] Sartorelli J C, Gonçalves W M, and Pinto R D (1994), *Phys. Rev.*, E49, 3963.

[2] Pinto R D, Gonçalves W M, Sartorelli J C, and de Oliveira M J (1995), *Phys. Rev.*, E52, 6892.

[3] Penna T J P, de Oliveira P M C, Sartorelli J C, Gonçalves W M, and Pinto R D (1995), *Phys. Rev.*, E52, R2168.

[4] da Rocha M S F, Sartorelli J C, Gonçalves W M, and Pinto R D (1996), *Phys. Rev.*, E54, 2378.

[5] da Silva J G M, Sartorelli J C, Gonçalves W M, and Pinto R D (1997), *Phys. Lett.*, A226, 269.

[6] Ellner S, Nychka D W, and Gallant A R (1992), Institute of Statistics Mimeo Series #2235 (BMA Series #39), Statistics Department, North Carolina State University, Raleigh NC 27695-8203.

[7] Curry J H, and Yorke J A (1977) A transition from Hopf bifurcation to chaos: computer experiments with maps on  $R^2$ , *Lectures Notes in Math*, 668, 48.

(CNPq e FAPESP)

### Quebra de Toro e Caos na Experiência da Torneira Gotejante

REYNALDO DANIEL PINTO, JOSÉ CARLOS

SARTORELLI, MURILO DA SILVA BAPTISTA, IBERÊ

LUIZ CALDAS

*Instituto de Física da USP - CX. Postal 66318 05315-970*

*São Paulo SP*

Na Experiência da Torneira Gotejante são observados comportamentos dinâmicos complexos como intermitências, crises e bifurcações, além de regimes periódicos e quasi-periódicos [1-5].

Recentemente, obtivemos os primeiros resultados confiáveis de cálculo do expoente de Lyapunov dominante que confirmaram o aparecimento suave de caos no sistema, quando diminuimos a vazão, após uma bifurcação de Hopf [2] e um travamento de frequências resultando num atrator de período 5.

Neste trabalho, analisamos um conjunto de séries de dados tomados após o travamento, onde pudemos observar como ocorre a quebra do Toro. Aparentemente, logo após o travamento começam a desenvolver-se estruturas semelhantes a atratores de Rössler que substituem os antigos pontos fixos do Toro. Estas estruturas crescem com a diminuição da vazão tendendo a se aproximar cada vez mais umas das outras, até que ocorre uma transição abrupta (crise), com uma brusca diminuição da vazão e uma grande alteração na aparência do atrator.

Uma análise deste cenário sugere que cada um dos pontos fixos do Toro, após o travamento, é substituído por um par de focos (quebra do Toro), sendo um deles estável e o outro instável (atrator de Rössler). A distância entre estes focos, inicialmente muito pequena, vai aumentando com a diminuição da vazão, até que o foco estável de uma das estruturas colide com o foco instável de outra, desestabilizando o sistema e provocando a transição.

#### REFERÊNCIAS:

[1] Sartorelli J C, Gonçalves W M, and Pinto R D (1994), *Phys. Rev.*, E49, 3963.

[2] Pinto R D, Gonçalves W M, Sartorelli J C, and de Oliveira M J (1995), *Phys. Rev.*, E52, 6892.

[3] Penna T J P, de Oliveira P M C, Sartorelli J C,

Gonçalves W M, and Pinto R D (1995), *Phys. Rev.*, E52, R2168.

[4] da Rocha M S F, Sartorelli J C, Gonçalves W M, and Pinto R D (1996), *Phys. Rev.*, E54, 2378.

[5] da Silva J G M, Sartorelli J C, Gonçalves W M, and Pinto R D (1996), *Phys. Lett.* A226, 269.

(CNPq, CAPES e FAPESP)

### Caos Homoclínico na Experiência da Torneira Gotejante?

REYNALDO DANIEL PINTO, JOSÉ CARLOS

SARTORELLI, MURILO DA SILVA BAPTISTA, IBERÊ

LUIZ CALDAS

*Instituto de Física da USP - CX. Postal 66318 05315-970*

*São Paulo SP*

A caracterização topológica é uma das ferramentas mais poderosas oriunda da teoria de sistemas dinâmicos. A identificação de órbitas homoclínicas, embora muito difícil de ser feita em sistemas experimentais, é um indicador bastante preciso da existência de caos, pelo menos sob determinadas condições [1].

Neste trabalho iremos mostrar os resultados obtidos com a aplicação de algumas destas técnicas em determinados atratores obtidos na experiência da torneira gotejante [2-6].

O conjunto de atratores caóticos estudado pertence a uma região de média vazão (aprox. 25 gotas/s). Partindo do atrator correspondente a menor vazão e aumentando-a lentamente, observamos que o sistema começa a visitar intermitentemente uma região de mais alta vazão, descrevendo uma órbita semelhante a um ciclo limite instável. O formato e posição do atrator no espaço de fases reconstruído não se alteram com o aumento da vazão, apenas o ciclo limite é visitado mais frequentemente até que, em uma das passagens pelo ciclo limite, ocorre uma transição (de 27 para 39 gotas/s), e obtém-se um atrator periódico.

Pouco antes de ocorrer a transição, observa-se que a órbita intermitente constitui um ciclo básico que se repete várias vezes, tão frequentemente como é de se esperar quando existe uma órbita homoclínica conectando este ciclo a ele mesmo. Novas medidas estão sendo realizadas para verificar estas hipóteses levantadas com os resultados preliminares.

#### REFERÊNCIAS:

[1] Palis J and Takens F (1993), "Hiperbolicity and sensitive Chaotic Dynamics at Homoclinic Bifurcations", Cambridge University Press, New York.

[2] Sartorelli J C, Gonçalves W M, and Pinto R D (1994), *Phys. Rev.*, E49, 3963.

[3] Pinto R D, Gonçalves W M, Sartorelli J C, and de Oliveira M J (1995), *Phys. Rev.*, E52, 6892.

[4] Penna T J P, de Oliveira P M C, Sartorelli J C, Gonçalves W M, and Pinto R D (1995), *Phys. Rev.*, E52, R2168.

[5] da Rocha M S F, Sartorelli J C, Gonçalves W M,

and Pinto R D (1996), Phys. Rev., E54, 2378.  
 [6] da Silva J G M, Sartorelli J C, Gonçalves W M, and  
 Pinto R D (1996), Phys. Lett. A226, 269.  
 (CNPq, CAPESP e FAPESP)

### FAMÍLIAS E BIFURCAÇÕES DE ÓRBITAS PERIÓDICAS NO PÊNDULO ELÁSTICO

DELCIDES FLÁVIO DE SOUSA JR, K. FURUYA

*Universidade Estadual de Campinas*

O pêndulo elástico é um dos sistemas físicos mais simples que se pode imaginar em dois graus de liberdade: uma massa presa à uma mola, posta a oscilar sob ação da gravidade. Apesar desta simplicidade, o sistema apresenta uma dinâmica extremamente rica e complexa. Este sistema tem sido estudado extensivamente como um paradigma de sistema caótico com poucos graus de liberdade, embora uma parte crucial da dinâmica não tenha sido estudada em profundidade: as órbitas periódicas. Já mencionadas no trabalho pioneiro de Henri Poincaré, tais órbitas periódicas representam a única fonte de informação global sobre um sistema que não possui integrais de movimento suficientes (não-integrável), pois são na verdade trajetórias singulares no espaço de fases quadridimensional desses sistemas, formando o esqueleto do fluxo hamiltoniano nesse espaço de fases, e podendo ser estáveis ou instáveis. Sabe-se ainda que essas órbitas naturalmente se agrupam em famílias, que são representadas por linhas quando plotamos sua energia ( $E$ ) contra o correspondente período ( $\tau$ ). As linhas não são isoladas em geral, podendo sofrer bifurcações. Este gráfico  $E$  versus  $\tau$  é tão característico do sistema clássico em questão quanto o espectro de energias é para o sistema quântico. Para um sistema com dois graus de liberdade como o nosso o estudo das famílias baseia-se no Método da Matriz de Monodromia, desenvolvido por Baranger et al. Este método possibilita não só a compilação das famílias de órbitas periódicas como também a região de estabilidade das mesmas. Estudamos especificamente a influência de uma peculiaridade que pode ocorrer no pêndulo elástico - a ressonância autoparamétrica - sobre as principais famílias de órbitas periódicas.

### DIFUSÃO EM FLUIDOS CAÓTICOS TURBULENTOS

FÁBIO H. PALLADINO, IBERÊ L. CALDAS

*Instituto de Física da Universidade de São Paulo*

Muitos modelos têm sido propostos para descrever ou simular um fluido turbulento. Neste trabalho utilizamos um modelo de contaminante passivo convecionado por um fluido bidimensional com linhas de fluxo caóticas (para um campo de velocidades conhecido). Nesse modelo é introduzida uma variável aleatória para simular um comportamento típico de um fluido turbulento. Para uma melhor análise é obtido a partir do

modelo um mapa de Poincaré, bidimensional, do fluxo do fluido, o qual descreve as trajetórias do contaminante no fluido. O mapa obtido corresponde ao conhecido Mapa Padrão, modificado por uma fase aleatória, ou ruído branco. As trajetórias do modelo assim perturbadas tornam-se menos definidas; as estruturas regulares do mapa, quando comparadas ao mapa padrão, são destruídas a medida que a intensidade do ruído aumenta. Espectros de trajetórias individuais mostram que a intensidade do ruído modula os espectros originais com um envelope gaussiano, de forma análoga ao que ocorre em sistemas reais. Calculamos o coeficiente de difusão para esse mapa bidimensional e obtemos a curva de difusão global de trajetórias para o modelo proposto, em função do parâmetro de não linearidade do sistema. Observamos que a introdução do ruído provoca uma queda acentuada nos modos aceleradores do mapa padrão. Presenciamos uma competição entre regimes de difusão anômala (modos aceleradores) e difusão ordinária provocada pelo ruído a medida que a não linearidade do sistema aumenta.

### ON THE QUANTUM MANIFESTATIONS OF CHAOTIC SCATTERING

RAÚL O. VALLEJOS, ALFREDO M. OZORIO DE

ALMEIDA

*CBPF*

CAIO H. LEWENKOPF

*UERJ*

In this work we study a simple model for chaotic scattering, both from the classical and quantum points of view. The main interest is to relate the fluctuations of the quantum observables to the nature of the underlying classical dynamics. (Much work has been dedicated to the analogous question in closed systems, accumulating a large body of numerical and analytical evidences of universality; on the other hand the scattering problem still lacks some solid fingerprints which serve to clearly distinguish integrable from chaotic classical scattering.) The model is constructed from a semi-infinite guide of straight section. 'Defects' are created by making two cuts and then shifting the pieces transversally. Inside each one of the three parts of the guide the dynamics is free in the longitudinal direction and bounded by a parabolical potential in the transverse one. The iterated Poincaré scattering map - the classical analogue of the scattering matrix - is studied. It is shown to be equivalent to a system of coupled maps of the disc of the form  $\theta(n+1) = \theta(n) + \omega(r)$ , where  $\omega(r)$  is monotonous increasing. The resulting dynamics may range from integrable to chaotic as parameters are varied. Moreover, for a particular choice of the defects this leads (approximately) to a linked twist map. The quantum problem is solved by a mode matching method. This allows for obtaining an explicit expression for the generalized scattering matrix (including both

propagating and evanescent modes). We discuss the relationship between the fluctuations of the scattering matrix and the structure of the corresponding classical phase space. We also test the predictions of semiclassical and random matrix theories.

### RECOVERING PHYSICAL PARAMETERS FROM THE SELF-SIMILAR GEOMETRY OF THE PHASE SPACE.

PAULO CÉSAR RECH

*Universidade do Estado de SC*

MARCUS WERNER BEIMS, JASON ALFREDO

CARLSON GALLAS

*UFRGS*

JASON ALFREDO CARLSON GALLAS

*Höchstleistungsrechenzentrum, Forschungszentrum Jülich, Alemanha*

Is it possible to recover physical parameters of dynamical systems directly from the structure of basin boundaries in phase space? We present a remarkable example of a situation in which a certain macroscopic parameter, the rate of dissipation, for the Hénon oscillator may be recovered solely from the study of geometric properties of its phase-space. In other words, by performing measurements exclusively on the space of variables we are able to recover the macroscopic rate of dissipation of the system for a given point in parameter space. This is done by computing the convergence rate with which certain self-similar "fingers" accumulate towards basin boundaries. The fingers are pairs of stripes of basins of stable attractors which accumulate towards the basin boundary of the attractor at infinity. The above finding motivated us to compute accumulation rates for additional points in parameter space. Such computations were done for parameters defined by the intersection of algebraic varieties resulting from the two bifurcation cascades starting with lowest possible periods. See Refs. 1 and 2.

1. M. W. Beims and J. A. C. Gallas, *Physica A*, 1997, in print; J. A. C. Gallas, Units: remarkable points in dynamical systems, *Physica A*, **222** (1995) 125-151.
2. P. C. Rech, M. W. Beims and J. A. C. Gallas, preprint.

(FAPERGS, CESUP-UFRGS, CNPq)

### DINÂMICA DE CHOQUE NA EQUAÇÃO NÃO-LINEAR DE SCHRÖDINGER

CARLOS ALBERTO DE LIMA RIBEIRO, MARCO

ANTÔNIO GAMEIRO DE MOURA

*Universidade Federal de Pernambuco*

A equação de onda de Schrödinger surgiu na física em 1926 para a descrição do mundo sub-atômico. Ao

considerarmos no seu potencial um termo de amortecimento linear e outro de não-linearidade obtemos a famosa Equação Não-Linear de Schrödinger Modificada (ENLSM). Esta equação é de grande interesse não só na física como também nas outras ciências naturais. Modelos não-lineares podem ser aplicados em inúmeros campos na física da matéria condensada. Estudamos a propagação de ondas num meio não-linear com perda. A dinâmica deste sistema pode ser mapeada pela ENLSM. Já é sabido que o papel da perda é o de atenuação da amplitude, no nosso último trabalho [1] mostramos que não só existe essa atenuação como também há um estreitamento, já que esses são dois possíveis mecanismos de dissipação de energia para o pulso propagante. Determinamos uma solução para a amplitude e a fase desta onda a partir de expressões para as partes real e imaginária da ENLSM usando o método analítico. A dependência na velocidade dos pontos do perfil do pulso com a intensidade do mesmo pode ser provocada pela presença de um termo de auto-encurtamento, embora nosso sistema não tenha esse termo detetamos que a perda influencia no pulso um comportamento semelhante. Determinamos a partir do conhecimento da amplitude da onda o tempo crítico para o qual ocorrerá o choque e de posse dessa informação poderemos evitá-lo. Neste momento a região central do pulso (o pico) viaja mais lentamente que a parte trazeira levando a uma singularidade e posteriormente a não descrição matemática dele. Podemos aplicar esse mesmo formalismo anterior para problemas de propagação de pulso óticos num meio que apresente uma resposta do tipo Kerr com perda.

[1] Soluções Analíticas da Equações Não-Linear de Schrödinger na Presença de um Termo de Amortecimento Linear, Carlos A.L. Ribeiro, Jairo R. de Oliveira e Marco A. de Moura- XIX ENFMC set.96

### CONTROLE DO ESTADO FINAL

ILDEU DE CASTRO MOREIRA, MARCELO QUINTELAS LOPES

*Instituto de Física - UFRJ*

Em sistemas não-lineares dissipativos, a existência freqüente de bacias de atração entrelaçadas ou a presença de fronteiras fractais requerem condições iniciais muito precisas para a previsão correta do estado final do sistema. Essa sensibilidade do estado final é uma obstrução à previsibilidade. Em analogia com os métodos de controle do caos, que usam a estabilização de trajetórias específicas, procedimentos podem ser usados para o controle do estado final. Um deles, e mais imediato, é o de aplicar uma pequena perturbação nas variáveis que o descrevem e lançar o ponto na bacia de atração do atrator desejado; a partir daí o sistema é deixado sem perturbação e, por si mesmo, converge para o atrator. Esse método será prático e viável somente se o ponto se aproximar suficientemente da fron-

teira, em um certo instante de tempo; mas padece das limitações teóricas e experimentais: erros numéricos ou ruídos podem alterar a trajetória do sistema lançando-o em bacias indesejadas. Um segundo método, mais interessante e promissor, aproveita a propriedade de muitos sistemas dinâmicos que exibem uma grande sensibilidade das bacias de atração a pequenas variações dos parâmetros. Uma pequena variação em um parâmetro poderá fazer com que o ponto mude de uma bacia para outra. Nesse caso, também a propriedade histerética pode ajudar na mudança de um atrator para outro. Como exemplo, aplicamos os procedimentos propostos a dois mapeamentos unidimensionais com atratores múltiplos. Foi definida também uma quantidade que permite quantificar a sensibilidade das bacias de atração à variação dos parâmetros. Sua expressão é similar à generalização do expoente de Lyapounov feita por Plastino, Tsallis e Zheng. Ela mede, ao contrário desse expoente (que quantifica a sensibilidade da trajetória à variação das condições iniciais), a sensibilidade da bacia de atração à variação do parâmetro; fornece uma medida dos pontos que deixaram de pertencer a uma determinada bacia de atração (região insegura) quando o parâmetro é variado.

### O EXPOENTE PTZ PARA UM MAPEAMENTO RACIONAL

FILADELFO CARDOSO SANTOS, ILDEU DE CASTRO MOREIRA, MARIA ANTONIETA DE ALMEIDA  
*Instituto de Física - UFRJ*

Comportamentos complexos surgem, em geral, no chamado limiar do caos. Uma das caracterizações matemáticas desta região de transição é a anulação do expoente de Lyapounov, o que significa que a incerteza, proveniente da sensibilidade às condições iniciais, cresce a uma taxa polinomial e não mais exponencialmente. Nesse caso, é interessante introduzir uma quantidade que generalize o expoente de Lyapounov e que se aplique mesmo em situações de crescimento polinomial. Isso foi feito recentemente por Plastino, Tsallis and Zheng, que definiram a quantidade  $\lambda_q$  tal que:  $\epsilon(t) = \epsilon(0)(1 + (1 - q)(\lambda_q t)^{\frac{1}{1-q}})$ . Ela se reduz ao expoente de Lyapounov, para  $q = 1$ . No caso polinomial,  $q \neq 1$ , a quantidade fisicamente importante passa a ser o expoente  $q$ ; ele mede a taxa de crescimento polinomial da incerteza nos pontos ou regiões em que o expoente de Lyapounov se anula, o que ocorre, em geral, em pontos de bifurcação e no limiar do caos. Em seu trabalho original, os autores acima calcularam o valor de  $q$  para o mapa logístico:  $q = 5/3$ , nas bifurcações por dobra de período;  $q = 3/2$ , nas bifurcações tangentes e  $q = 0,244\dots$  para a entrada no caos. Em nosso trabalho, analisamos o expoente de PTZ para outras duas famílias de mapeamentos. Na primeira delas, consideramos mapeamentos lineares por partes e descontínuos, que possuem atratores múltiplos. Nesse

caso, devido à linearidade da função, o valor de  $q$  obtido numericamente, é zero, como esperado, para os casos (dependendo aqui da condição inicial) em que o expoente de Lyapounov se anula. Como um segundo exemplo, analisamos um mapeamento racional com a forma  $X_{i+1} = 4bX_i(1-X_i)/[a+b(1-a)X_i]$ , no intervalo  $a \in (0, 1]$ . Este mapeamento, que se reduz para  $a = 1$  ao mapeamento logístico, foi construído a partir de uma discretização modificada da equação logística. De posse do diagrama de bifurcações deste mapeamento, calculamos numericamente os valores de  $q$  nos pontos onde o expoente de Lyapounov se anula e confirmamos, no caso das bifurcações por dobra de período e das bifurcações tangentes, os valores já determinados anteriormente.

### UM MÉTODO PARA DISTINGUIR BACIAS DE ATRAÇÃO EM MAPEAMENTOS

ILDEU DE CASTRO MOREIRA  
*Instituto de Física - UFRJ*

A existência de atratores múltiplos, que coexistem para os mesmos valores dos parâmetros, é um fenômeno importante em muitos sistemas não-lineares. Em tais casos, o estado final atingido dependerá da bacia de atração em que o sistema estava no instante inicial. Para analisar a dinâmica do sistema, necessitamos determinar as bacias de atração dos diferentes atratores. Essa tarefa é usualmente difícil, sendo que raramente pode ser implementada por métodos analíticos. Frequentemente o uso de métodos numéricos, com consumo alto de tempo de máquina, é o único meio de executá-la. Daí o interesse em métodos alternativos para identificar e distinguir bacias de atração. Richter et al. [Z. Naturforsch. 49a, 871 (1994)] determinaram, no mapeamento logístico, os incrementos ao comprimento total do trajeto e mostraram o surgimento de uma nova estrutura fractal (denominada *triptych*). Mostramos aqui como uma modificação desse método, pela introdução de um incremento médio no comprimento do trajeto, pode ser usada para determinar bacias de atração em mapeamentos. O incremento médio de ordem  $k$  do comprimento do trajeto em um mapeamento unidimensional é definido como:  $T_k[F_N] = (1/N) \sum_{n=0}^N |X_{(n+1)k} - X_{nk}|$ . Essa função mede o incremento médio no gráfico  $X_{i+k}$  versus  $X_i$ . Se o trajeto for uma órbita periódica, com período  $k$ , a função  $T_k[F_N]$  tenderia a zero, quando  $N \gg 1$ . Se o trajeto tiver um período diferente, essa função dará o incremento médio a cada  $k$  iterações. Portanto, ao se achar o valor de  $T_k$  em função da condição inicial poderemos distinguir as bacias de atração de atratores diferentes. No trabalho, como exemplos, determinamos as bacias de atração para dois mapeamentos unidimensionais - um deles o chamado mapeamento TB (Tent-Bernoulli) [Lima, Moreira and Serra, Phys. Lett. A190 (1994) 403] - ambos possuidores de múltiplos atratores para variados valores dos parâmetros.

**BILLIARD IDEAL GAS: DYNAMIC AND THERMODYNAMIC CHARACTERISTICS**

VALERY B. KOKSHENEV, MARIA C. NEMES,  
EDUARDO VICENTINI

*Departamento de Física, ICEx, Universidade Federal de Minas Gerais*

The study provides a combined method of investigation of the two-dimensional version of the finite-horizon Lorentz gas problem, *i.e.* billiard systems. We introduce the so-called Billiard Ideal Gas (BIG) as a macroscopic system of non-interacting particles placed in a  $2L \times 2L$  square massive box containing a hard disk of radius  $R$ , fixed at its center. The consideration is based on deduction of dynamical and thermodynamical variables and, thereby, introducing of a coarse-grained specification for the mean free length related to the free access volume of a given billiard system. Then, employing the equal-distribution energy law, known for the classical ideal gases, the frequency density spectrum is formulated for the BIG system. Unlike the well-known Maxwell Boltzman gas the BIG is critically characterized by the anisotropic angle-velocity particle wall-collision distribution function. Dynamical (high-order angle-velocity correlation functions) and thermodynamical (pressure, dynamically accessible volume, configurational entropy) BIG characteristics, including the equation of state of the BIG, are analyzed in detail. This is given through the order-disorder dynamical parameter, which accounts all real billiard geometry constraints, *i.e.*,  $\eta = 1 - R/L$ . Predictions for the escape-particle experiments are given in terms of the critical geometrical constraints and the observation temporal windows for the universal channels of relaxation. Financial support of CNPq is acknowledged.

**BILLIARD DECAY DYNAMICS: UNIVERSAL RESPONSE WITHIN TWO-DIMENSIONAL GEOMETRICAL CONSTRAINTS**

VALERY B. KOKSHENEV, MARIA C. NEMES

*Departamento de Física, ICEx, Universidade Federal de Minas Gerais*

Billiard systems are known as highly investigated models in the field of classical chaos. They deal with point particles moving inside a regular bounded area containing a convex scatterer. Only a few rigorous results heavily based on numerical analyses are still available [1]. A new description to the decay dynamics of billiard systems and, in particular, of the Sinai's billiard is reported. This is based on the Gaussian form, proposed for the normal-to-wall-velocity-distribution function. The variance of this function describes geometrical constraints of the problem. It is obtained in an analytical form for the two the limiting cases of small and big scatterers and interpolated within the intermediate region of parameters. We show how the escape-particle analysis can give a clear signature of three distinct dynamical regimes driving a given system from chaotic to regular motion, namely, i) a short-time exponential, ii) an intermediate-time stretched-exponential and iii) a long-time algebraic decays. These billiard-system generic regimes are found to be governed solely by the geometrical constraints. The number of escaped particles observed in numerical experiments and the computed collision distribution function are given in an analytical form. The chaotic motion observation conditions are formulated and the recent simulation findings on Sinai's billiard [1] are reproduced analytically. Financial support of CNPq is acknowledged. [1] Garrido P.L. and Gallavotti, *J. Stat. Phys.*, v.76, 549 (1994)

## FÍSICA ESTATÍSTICA (Transições de Fase e Fenômenos Críticos)

### FÍSICA ESTATÍSTICA (Transições de Fase e Fenômenos Críticos) – 11/06/97

#### Renormalization group of probabilistic cellular automata with one absorbing state

MÁRIO JOSÉ DE OLIVEIRA, JAVIER EDUARDO SATULOVSKY  
IFUSP

Recently, a general dynamical renormalization group scheme, called Dynamically Driven Renormalization Group (DDRG) has been proposed in order to treat nonequilibrium critical phenomena (A. Vespignani *et al.* Phys. Rev. Lett. 77, 4560 (1996)). The scheme consists in coupling a real space Renormalization Group (RG) scheme to a stationary condition that drives the RG group equations through the parameter space. The method has been applied to self-organized critical phenomena, specifically to critical height sandpile and forest fire models. We apply the DDRG scheme to one-dimensional probabilistic cellular automata having one absorbing state. The appropriate real space RG parameter space for these nonequilibrium models is the space of the transition probabilities, instead of being the space of coupling constants as is the case of equilibrium models, defined by a Hamiltonian. We have found one unstable fixed point with one relevant direction. By using a block renormalization to treat properly the absorbing state we have figured the value of the critical exponent corresponding to the divergence of the spatial correlation,  $\nu_{\perp}$ , using three different approximations, which consider correlations among clusters up to 1, 3, and 5 neighboring sites in the lattice, respectively. Our best calculations give  $\nu_{\perp} = 1.04 \pm 0.02$  which is rather close to the one obtained from numerical simulations reported in the literature, namely  $\nu_{\perp} = 1.067 \pm 0.005$ . In the limit of small transition probability one of the cellular automata reduces to the contact process revealing that the cellular automata are in the same universality class as that process, as expected.

#### The Blume-Emery-Griffiths Spin Glass

MAURO SELLITTO, MARIO NICODEMI  
Università di Napoli, ITALIA  
JEFFERSON J. ARENZON  
Istituto de Física, UFRGS

The static properties of a version of the Blume-Emery-Griffiths model (in which orientational and particle degrees of freedom are explicitly introduced) with bilinear

quenched disorder are calculated for the case of attractive as well as repulsive biquadratic interactions. Some limiting cases of the model include the standard Ising spin glass, the Ghatak-Sherrington model and the Ising Frustrated Lattice Gas that is a version of the *Frustrated Percolation* model, whose properties suggest a possible close connection with the theories of *structural glasses*. The phase diagram of the system is studied in the context of the replica symmetric mean field approximation<sup>1</sup>. The phase diagram we found displays a large variety of interesting critical behaviors. When the biquadratic interaction is attractive or weakly repulsive the transition between the paramagnetic and spin glass phase may be either continuous or discontinuous, depending on the value of the chemical potential; this different behaviors being separated by a tricritical line. For strong repulsive interaction between particles, new different phases with a sub-lattice structure emerge: the antiquadrupolar and the antiquadrupolar glassy phase. In particular, for the Ising Frustrated Lattice Gas, although presenting a weakly repulsive term, it does not present broken sub-lattice symmetry.

1. J.Physique I France (1997) submitted

#### Sine-Gordon mean field theory of a Coulomb Gas

ALEXANDRE DIEHL, MARCIA C. BARBOSA, YAN LEVIN  
UFRGS

The Coulomb gas provides a paradigm for the study of various models of critical phenomena. In particular, it is well known that the two dimensional (2d) Coulomb gas can be directly used to study the superfluidity transition in <sup>4</sup>He films, arrays of Josephson junctions, melting of two dimensional crystals, roughening transition, etc. Notwithstanding its versatility, our full understanding of the most basic model of Coulomb gas, namely an ensemble of hard spheres carrying either positive or negative charges at their center, is still lacking. It is now well accepted that at low density the two dimensional plasma of equal number of positive and negative particles undergoes a Kosterlitz-Thouless (KT) metal insulator transition. This transition is of an infinite order and is characterized by a diverging Debye screening length. As the density of particles increases, the validity of the KT theory becomes questionable and the possibility of the KT transition being replaced by some kind of first order discontinuity has been speculated for a long time.

In this work Sine-Gordon field theory is used to investigate the phase diagram of a neutral Coulomb gas. A variational mean field free energy is constructed and the corresponding phase diagrams in two (2d) and three dimensions (3d) are obtained. When analyzed in terms of chemical potential, the Sine-Gordon theory predicts the phase diagram topologically identical with the Monte Carlo simulations and a recently developed Debye-Hückel-Bjerrum theory. In 2d, we find that the infinite order Kosterlitz-Thouless line terminates at a tricritical point, after which the metal-insulator transition becomes first order. However, when the transformation from chemical potential to the density is made the whole of the insulating phase is mapped onto zero density.

### General Spin Ising Model with Diluted and Random Crystal Field in the Pair Approximation

J. A. PLASCAK, D. PEÑA LARA

*Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Física, C. P. 702, 30161-970 Belo Horizonte, MG, Brasil*

The spin  $\sigma \geq 1$  Blume-Capel model with diluted and random crystal field has been studied by means of the pair approximation. A variety of rich phase diagrams has been achieved, some of them new and different from those predicted through mean field approximation and effective field theory for the  $\sigma = 1$  case. Regarding the  $\sigma = 1$  case, we have for the two-dimensional model: i) For  $p_1^* < p < 1$  the system presents a tricritical point and two different ordered phases at low temperatures; ii) For  $p^* < p < p_1^*$ , where  $p^* = (z - 2)/(z - 1)$  is independent of  $\sigma$ , the phase diagrams are similar. However, we have no tricritical points. Instead, the corresponding second-order transition line ends at a critical end point and the first-order line penetrates into the ferromagnetic phase terminating in an isolated critical point; iii) For  $p < p^*$ , the second-order transition line extends to the infinity as  $\Delta \rightarrow \infty$ . Just the phase diagrams in the iii) case above are analogous to those from mean field approximation. Although the existence of a  $p^*$  is in agreement with more reliable results of effective field theory, the latter approach is not capable to determine the complex structure of the ferromagnetic phases at low temperatures. This same qualitative behavior is also found for the three-dimensional version of the model. The phase diagrams for  $\sigma > 1$  are similar. The main difference is the existence of additional ferromagnetic phases at low temperatures. On the other hand, for  $\sigma = 3/2$ , the results are in the whole analogous to the pure case. Finally, by considering the random crystal field model we have achieved results for  $\sigma = 1, 2$  and  $3/2$  which are qualitatively the same regarding the second-order transition lines. The main difference in this case is also with respect to the number of ferromagnetic phases at low temperatures.

### Percolação em Clusters Desordenados

MAURÍCIO BALDAN, MAURÍCIO FABBRI

*Universidade São Francisco*

Consideramos um modelo de hopping de uma partícula entre estados localizados em uma matriz rígida desordenada, onde a probabilidade dos saltos decai com a distância entre sítios. O sistema pode ser considerado como um autômata simples, cujo estado é determinado pelo sítio que está ocupado; sua evolução, dentro de um esquema discreto, corresponde a uma cadeia de Markov sobre  $N$  estados e  $N(N+1)/2$  probabilidades de transição (onde  $N$  é o número de sítios). O objetivo é determinar a distribuição de probabilidade da ocupação a longo prazo, com respeito à extensão espacial dos autoestados. Este sistema é simulado em computador através de um aglomerado de  $N$  sítios sob condições de contorno periódicas, e determinando-se os autovalores e autoestados da matriz de transição. Tomando-se um número grande de tais configurações, toma-se a média estatística (ensemble average), e procura-se o limite da distribuição de probabilidades dos caminhos de percolação. A localização espacial é estudada para os casos de interações de longa distância, e para interações com um comprimento de corte exponencial. No limite termodinâmico, a transição de fase correspondente deve ser análoga à localização de Anderson. Com relação ao espectro de autovalores (densidade de estados), as simulações podem corroborar a existência de um limite de mobilidade, separando as regiões entre estados estendidos e localizados. Investiga-se também o efeito da dimensionalidade. Mesmo sob condições periódicas, os efeitos de tamanho finito tornam difícil observar o caráter assintótico da localização em duas dimensões.

### Solução das Equações de Campo de Fase por Transformada Rápida de Fourier

PATRÍCIA DE CÁSSIA APPEZZATO, MAURÍCIO FABBRI

*Universidade São Francisco*

Os métodos de Campo de Fase (PF) possibilitam resolver numericamente um problema multidimensional de solidificação utilizando um domínio fixo sem fronteiras livres. Em problemas de transporte térmico, considera-se a equação usual de transporte de calor (acrescida de um termo fonte de liberação de calor latente), acoplada a uma equação de evolução parabólica não-linear para o parâmetro de ordem (que determina o estado de fase do material). A interface sólido-líquido (SL) é determinada a posteriori, como uma simples curva de nível do campo de fase, e as soluções consideram implicitamente os efeitos cinéticos e de curvatura local, bem como a anisotropia da tensão superficial. A principal dificuldade numérica encontrada nos métodos PF é o fato da equação de fase apresentar uma solução localizada, com

um comprimento característico quasi-microscópico; embora seja possível utilizar uma largura de interface maior que a real, o problema numérico resultante ainda exige o emprego de malhas densas, tornando-o computacionalmente pesado. Uma alternativa interessante é o uso de algoritmos baseados em um núcleo linear tratado pela Transformada Rápida de Fourier (FFT); a solução correta do problema original é então obtida por um esquema de iterações (com possível relaxamento) sobre as aproximações lineares. Empregando-se um esquema implícito-explicito de evolução temporal, o procedimento numérico é ainda mais simplificado, exigindo apenas a solução de um pequeno sistema de equações lineares a cada passo no tempo. Neste trabalho, descrevemos um esquema FFT para a solução das equações PF, e validamos o mesmo para o caso unidimensional (o núcleo FFT estende-se naturalmente a problemas multidimensionais). O ganho em CPU decresce exponencialmente com a dimensionalidade do problema. A técnica compete com algoritmos de malha adaptativas, sendo porém de implementação mais simples. Resultados específicos são mostrados para os modelos de Stefan, e para problemas com cinética generalizada e em meios superresfriados.

### Interações de longo alcance e não extensividade no ferromagneto de Potts

AGLAÉ C. N. DE MAGALHÃES  
CBPF

SERGIO A. CANNAS, FRANCISCO A. TAMARIT  
Universidad Nacional de Córdoba

Analisamos o modelo de Potts com  $q$  estados com interações ferromagnéticas que decaem com  $1/r^\alpha$  (onde  $r$  é a distância entre pares de spins de uma rede hipercúbica  $d$ -dimensional) no regime não-extensivo  $0 \leq \alpha \leq d$ , onde o limite termodinâmico não é definido. Visando estudar as propriedades assintóticas deste modelo no limite  $N \rightarrow \infty$  ( $N$  sendo o número de spins), propomos uma generalização deste modelo de tal forma que este limite passa a ser bem definido para todo  $\alpha \geq 0$ . Este modelo se reduz, para  $\alpha > d$ , ao modelo original (com acoplamento  $J$  entre primeiros vizinhos reescalado), e para  $\alpha = 0$ , ao modelo de Potts com interações de mesma intensidade entre todos pares de spin (isto é, modelo de Potts tipo Curie-Weiss). Calculamos então a solução de campo medio para este modelo estendido que contem, como caso particular para  $\alpha > d$ , o resultado de Mittag e Stephen [1]. Estamos fazendo simulações Monte Carlo com dinâmica de "heat bath" para o caso unidimensional ( $d = 1$ ), visando calcular a curva da magnetização (extrapolada para  $N \rightarrow \infty$ )  $M(\alpha, q; T)$  em função da temperatura  $T$  para diversos valores de  $\alpha \geq 0$  e número de estados  $q$ . Com isto pretendemos verificar se a teoria de campo medio é exata para o modelo estendido para todo valor de  $q$  e de  $0 \leq \alpha \leq 1$ , tal como foi constatado recentemente para

$q = 2$  [2]. Outrossim, pretendemos testar para diversos valores de  $q$  uma recente conjectura de Tsallis [3], que permite a unificação de regimes extensivo ( $\alpha > d$ ) e não-extensivo ( $0 \leq \alpha \leq d$ ), cuja validade foi confirmada no caso  $q = 2$  [2]. Este trabalho é uma extensão da ref. [2] recentemente publicada para o modelo de Ising ( $q = 2$ ) com interações de longo alcance.

[1] L.Mittag e M.J.Stephen, J.Phys. **A7**, L109 (1974).

[2] S.A.Cannas e F.A.Tamarit, Phys.rev. **B54**, R12661 (1996).

[3] C.Tsallis, Fractals **3**, 541 (1995).

### Diagrama de fases do modelo de Ising com competição

MÁRCIO SANTOS

Instituto de Física - Universidade de São Paulo

WAGNER FIGUEIREDO

Departamento de Física - Universidade Federal de Santa Catarina

O modelo de Ising numa rede quadrada é estudado através do formalismo da equação mestra, e a evolução temporal dos estados do sistema segue o processo estocástico de Glauber dentro da aproximação de pares dinâmica. Levamos em conta interações de troca não homogêneas entre os spins primeiros vizinhos. Em nosso modelo o acoplamento de intercâmbio na direção horizontal tem seu valor dado por  $J_1$ , enquanto seu valor na direção vertical é dado por  $J_2$ . Desta forma é possível considerar a rede quadrada como sendo formada por duas subredes alternadas. Os estados estacionários do sistema, obtidos quando as magnetizações de cada subrede e as funções de correlação horizontal e vertical independem do tempo, possibilitam a construção de um diagrama de fases estacionário para o modelo. Mostramos que para um valor positivo e fixo do acoplamento de troca horizontal, podemos passar continuamente de uma fase ferromagnética para uma fase paramagnética se o acoplamento de troca da vertical também for positivo. Por outro lado, quando  $J_2$  assume valores negativos, obtemos a transição contínua de uma fase paramagnética para uma fase antiferromagnética. Embora não exista nenhum campo externo aplicado a este sistema, a mudança contínua do parâmetro  $J_2$  produz o fenômeno da auto-organização. Neste sentido nosso diagrama de fases é similar àquele obtido para o modelo de Ising ferromagnético sob a ação de um fluxo externo de energia. A auto-organização neste sistema pode ser obtida mecanicamente se o acoplamento inter-subrede depender de uma força externa aplicada sobre o sistema, e se as interações spin-rede forem levadas em consideração.

**Dinâmica crítica de uma cadeia dupla de spins**

MÁRCIO SANTOS

*Instituto de Física - Universidade de São Paulo*

WAGNER FIGUEIREDO

*Departamento de Física - Universidade Federal de Santa Catarina*

Estudamos o comportamento crítico dinâmico de uma cadeia dupla de spins. Nosso modelo leva em consideração interações de troca entre dois e quatro spins primeiros vizinhos. Este sistema é exatamente solúvel apenas no equilíbrio termodinâmico utilizando o procedimento de matriz de transferência. Utilizamos o método da taxa da resposta inicial do parâmetro de ordem juntamente com uma relação de escala que associa o tempo de relaxação do sistema com seu comprimento de correlação, a fim de estabelecer um limite inferior para o expoente crítico dinâmico  $z$ . Mostramos que se o sistema evolui para o seu estado estacionário com uma dinâmica no qual o parâmetro de ordem não é conservado, como ocorre no processo estocástico de Glauber, o expoente crítico  $z$  não apresenta qualquer dependência dos detalhes microscópicos da hamiltoniana se múltiplas inversões simétricas de spins são consideradas. Por outro lado, quando o parâmetro de ordem é conservado, como na dinâmica que envolve a de troca de spins vizinhos, denominada processo estocástico de Kawasaki, o expoente crítico dinâmico exibe um comportamento não universal por uma simples troca de spins primeiros vizinhos. Se, entretanto, trocarmos simultaneamente dois pares de spins de duas barras adjacentes da cadeia dupla de spins, o caráter universal do expoente crítico  $z$  é restaurado. Mostramos que o caráter universal do expoente crítico dinâmico pode ser obtido desde que as correspondentes taxas de transição envolvam blocos de spin que preservem a simetria básica de inversão ou troca de spins. Isso ocorre porque quando tomamos blocos de spins que preservam a simetria evitamos estados metaestáveis que surgem naturalmente na vizinhança do ponto crítico.

**DIAGRAMA DE FASES E EXPOENTES CRÍTICOS DE UM SISTEMA DE ISING ANTIFERROMAGNÉTICO COM DINÂMICAS COMPETITIVAS**

BARTIRA C. S. GRANDI, WAGNER FIGUEIREDO

*Universidade Federal de Santa Catarina - Departamento de Física Florianópolis - SC*

Neste trabalho estudamos o comportamento crítico de um modelo de Ising antiferromagnético numa rede quadrada sujeito a um fluxo externo de energia. A evolução no tempo do sistema de spins ocorre devido à competição entre dois processos dinâmicos: o de Glauber, no qual apenas transições devido à inversão de um único spin por vez é permitida, e o do tipo de Kawasaki, onde apenas são permitidas transições que envolvem a troca entre spins considerados primeiros vizinhos. O processo

estocástico de Glauber simula o contato do sistema com o banho térmico, enquanto que o do tipo Kawasaki está associado com um fluxo externo de energia sobre o sistema. Isso é possível desde que permitimos uma troca entre spins vizinhos que favoreça o aumento de energia do sistema. Simulamos o nosso sistema através do algoritmo de Monte Carlo considerando redes de dimensão linear desde  $L = 4$  até  $L = 64$ . Mostramos que o sistema evolui para estados estacionários do tipo antiferromagnético e paramagnético. Determinamos a transição entre esses estados estacionários de não equilíbrio através dos cumulantes de quarta ordem. Calculamos para essa fronteira de fases os expoentes críticos associados ao comprimento de correlação, à magnetização alternante e à suscetibilidade. Mostramos que esses expoentes são os mesmos que aqueles do correspondente sistema de Ising de equilíbrio. Isso está de acordo com argumentos bastante gerais segundo os quais sistemas que apresentam simetria do tipo 'up-down' encontram-se na mesma classe de universalidade. Um aspecto bastante interessante do diagrama de fases desse modelo é que a fase antiferromagnética ocupa uma região muito pequena: se a probabilidade de ocorrência do processo de Kawasaki for maior que 3.5%, esta dinâmica destrói a ordem antiferromagnética de longo alcance, e o único estado possível é o paramagnético.

**AUTÔMATO CELULAR PROBABILÍSTICO PARA O ESTUDO DE SISTEMAS IMUNOLÓGICOS**

NELI REGINA SIQUEIRA ORTEGA, TÂNIA TOMÉ

MARTINS DE CASTRO

*IFUSP*

A cooperação entre as células B e T do sistema imunológico é mediada por células auxiliaadoras (Th). As células Th que não foram apresentadas ao antígeno são chamadas Th0, e uma vez ativadas podem se desenvolver em Th1 ou Th2. É conhecido da literatura que para altos níveis de infecção ocorre uma polarização das células Th e o sistema torna-se imune ou suscetível a depender do tipo de célula que predominar. O sistema estudado é um autômato de três estados cuja evolução temporal obedece regras estocásticas locais que possuem simetria "up-down". O modelo apresenta uma transição de fase dinâmica de um estado desordenado para um estado ordenado devido a uma quebra espontânea de simetria. A transição de fase foi estudada através da aproximação de campo médio simples, com pares e com simulações de Monte Carlo. Os resultados estão de acordo entre si e mostram que o estado desordenado é obtido quando a taxa  $r/p$  é suficientemente grande. Para um valor fixo de  $p$  a fase ordenada é obtida na região em que  $r < r_c$ . Um estudo do espalhamento de danos no sistema mostra que a distância de

Hamming no modelo com dimensão  $d=1$  e  $d=2$  é nula. Os expoentes críticos foram calculados mostrando que o modelo pertence à mesma classe de universalidade do modelo de Ising, corroborando assim a conjectura "up-down" proposta por Grinstein e colaboradores.

### EVOLUÇÃO DO AUTÔMATO CELULAR "JOGO DA VIDA" A PARTIR DE ILHAS PERCOLANTES

KATHIA MARIANE FEHSENFELD, MARCELO  
ANDRADE DE FILGUEIRAS GOMES  
UFPE

TASSO ROBERTO DE MELO SALES  
*The Institute of Optics, Rochester*

O autômato "Jogo da Vida" (*JV*), introduzido por Conway, em 1970, simula a evolução de uma sociedade de organismos vivos, incorporando processos de crescimento, morte, sobrevivência, auto-propagação e competição. A dinâmica do *JV* ocorre numa rede quadrada com a variável celular assumindo apenas dois valores: 0/1 (morto/vivo). O *JV* tem despertado interesse devido a seus múltiplos aspectos, entre os quais destaca-se: capacidade de computação universal e de emergência de complexidade e diversidade a partir de regras locais simples; (sub)criticalidade do estado assintótico; existência de leis de escala dinâmicas espontâneas; propagação de danos; existência de transições de fase irreversíveis descontínuas; etc. (veja Monetti e Albano, *Phys. Rev. E* **52** (1995) 5825; Nordfalk e Alstrom, *idem* **54** (1996) R1025 e referências nestes citadas). Contudo, nesses trabalhos o estado inicial é sempre uma distribuição não-correlacionada de sítios vivos com probabilidade de ocupação  $p$ . Devido ao interesse no *JV* como modelo de dinâmica de população para problemas ecológicos, onde se espera distribuições correlacionadas de seres vivos, estuda-se aqui a evolução do *JV* a partir de estados correlacionados não-triviais: configurações de sítios vivos na forma de ilha percolante. Examinou-se o comportamento temporal da população de sítios vivos,  $M(t)$ , do número  $N(t)$  de grupos de sítios vivos conexos, da diversidade de tais grupos, do tamanho médio destes, etc. Conheciam-se que estados iniciais não-correlacionados levavam a leis de escala dinâmicas por duas décadas temporais para essas funções estatísticas, se  $0.15 < p < 0.75$ , para redes com tamanho  $L \geq 150$  (Gomes et alii, *Phys. Rev. E* **48** (1993) 3345). Encontrou-se que as mesmas leis de escala aparecem na evolução do *JV* quando estados iniciais de ilhas percolantes são usados. Mais precisamente,  $M \sim t^{-\alpha}$  e  $N \sim t^{-\beta}$ , onde  $\alpha = 0.28$  e  $\beta = 0.15$ , para ilhas percolantes, e  $\alpha = 0.36$ ,  $\beta = 0.28$ , para estados iniciais não-correlacionados de mesma população inicial ( $M(0)$ ) que os primeiros. As outras funções apresentam expoentes críticos iguais para ambos os estados iniciais. Essas simulações sugerem que a dinâmica não-linear do *JV* talvez seja robusta a ponto de gerar comportamento

dinâmico crítico independente em larga escala do tipo de estado inicial considerado.

### MODELO DE ISING COM INTERAÇÕES COMPETITIVAS E APERIÓDICAS

ROBERTO FERNANDES SILVA ANDRADE  
*Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia*  
SILVIO ROBERTO SALINAS  
*Instituto de Física, Universidade de São Paulo*

O análogo do modelo ANNNI definido sobre uma árvore de Cayley, com interações competitivas, ferro e antiferromagnéticas, respectivamente entre primeiros e segundos vizinhos ao longo dos ramos da árvore apresenta um diagrama bastante rico. Nele estão presentes as usuais fases ferro e paramagnética além de uma sequência de fases moduladas e uma pequena região com fases caóticas. O problema pode ser formulado como um mapeamento discreto não linear, cujas atratores correspondem a soluções físicas no interior de uma árvore suficientemente grande. Neste trabalho incluímos interações adicionais, de caráter aperiódico, entre alguns pares de segundos vizinhos. Em dois exemplos distintos, as interações aperiódicas, mas deterministas, são escolhidas de acordo com as regras que geram uma curva de Koch e sequência de Fibonacci. Um das principais mudanças no diagrama de fases consiste no aparecimento de saliências, associadas a um fenômeno de congelamento de certas estruturas, ao longo da fronteira entre a fase paramagnética e a região espacialmente modulada. Quando as interações aperiódicas se tornam mais intensas, observamos a destruição das sequências de Farey de estruturas moduladas e o domínio de novas fases relacionadas à geometria das ligações aperiódicas. Também observamos a proliferação de regiões de co-estabilidade e o aumento das bacias dos atratores caóticos do mapeamento. No caso particular de interações aperiódicas que anulam as interações originais entre segundos vizinhos, isto é, num caso de diluição aperiódica, podemos obter diversos resultados analíticos exatos para a fronteira de fase da região paramagnética. Também neste é possível identificar as fases moduladas com a regra de geração das sequências aperiódicas.

### Propriedades Críticas dos Vidros de Spin de Ising em Redes Hierárquicas.

EDVALDO NOGUEIRA JR, FERNANDO DANTAS  
NOBRE  
UFRN  
SÉRGIO COUTINHO  
LFTC - UFPE  
EVALDO M. F. CURADO  
ICOMP - CBPF

A questão da natureza da fase vidro de spin, para sistemas com interações de curto alcance e dimensões finitas, permanece em aberto. Na ausência de uma te-

oria satisfatória que descreva as propriedades críticas destes sistemas, diversas abordagens têm sido utilizadas na tentativa de elucidar este problema através da determinação da temperatura crítica  $T_c$ , da dimensão crítica inferior  $d_l$  e dos expoentes críticos que governam esta transição. Os resultados obtidos não permitem inferir uma descrição completa do problema, embora exibam fortes evidências de que para a dimensão  $d = 3$ , em campo externo nulo, a transição ocorra numa temperatura finita  $T_c$  e a dimensão crítica inferior seja tal que  $2 < d_l < 3$ . Diante deste cenário, torna-se relevante estudar modelos de vidros de spin, com interações de alcance finito, onde soluções exatas, analíticas ou numéricas, possam ser alcançadas. Neste trabalho, estudamos as propriedades críticas do modelo do vidro de spin de Ising em redes hierárquicas do tipo diamante com dimensões fractais  $d_f = 2.6$  e  $d_f = 4$ , usando a técnica do grupo de renormalização de Migdal-Kadanoff, que fornece resultados exatos nesta rede. Em estudos anteriores, aplicamos esta técnica para obtermos o comportamento crítico deste sistema em redes hierárquicas do tipo diamante com  $d_f = 3$ . Utilizando um procedimento exato, calculamos o parâmetro de ordem de Edwards-Anderson local, em função da temperatura, com diferentes distribuições das constantes de acoplamento (gaussiana, bimodal, exponencial e uniforme). Para o caso,  $d_f = 2.6$  (rede diamante com 3 conexões e fator de escala 2), obtivemos uma temperatura crítica próxima, porém, inequivocamente diferente de zero. Em ambos os casos,  $d_f = 2.6$  e 4, determinamos o expoente crítico  $\beta$  e através de uma análise de escala por tamanhos finitos obtivemos, também, o expoente crítico  $\nu$ , associado ao comprimento de correlação. Nossos resultados foram analisados e confrontados com outros obtidos por diferentes abordagens.

#### DIAGRAMA DE FASES DO MODELO DE GOLDSCHMIDT VIA MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA

A. C. SILVA FILHO, J. R. DRUGOWICH DE FELÍCIO  
*Departamento de Física e Matemática Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto Universidade de São Paulo*

O modelo de Goldschmidt é uma versão assimétrica do modelo de Ashkin-Teller com três cores ( $N=3$ ) em duas dimensões que, de acordo com o autor, deveria apresentar um ponto multicrítico tipo Kosterlitz-Thouless. A conclusão de Goldschmidt, embora sugerida pelo estudo das equações do grupo de renormalização obtidas para a teoria de campos subjacente do modelo, só foi testada na versão clássica do modelo através de campo médio. Mais tarde, Chahine et al. investigaram esse modelo, aplicando o Grupo de Renormalização via simulações Monte Carlo (MCRG). Os resultados não confirmam as previsões do autor no tocante a diversas características

do diagrama de fases. Há, porém, uma certa dificuldade na aplicação do Monte Carlo a esse modelo, principalmente na região de acoplamentos em que duas linhas de transição se aproximam e eventualmente se cruzam. Em virtude disso, decidimos investigar o modelo de Goldschmidt através do Grupo de Renormalização Fenomenológico. Apresentamos, na presente comunicação, um estudo detalhado do diagrama de fases desse modelo, diagonalizando exatamente a matriz de transferência de cintas infinitas cuja largura varia entre 2 e 6 sítios. Considerações de simetria (invariância translacional, setores de carga e simetria por reflexão) foram fundamentais para a redução da dimensão das matrizes (que, no caso  $L = 6$ , chega a 262144) mas também foram úteis para reconhecer qual era a simetria que estava se quebrando em cada transição. Resultados de invariância conforme foram utilizados para o cálculo dos expoentes críticos bem como para estimar a carga central em diferentes regiões do espaço de parâmetros. Nossa análise suporta os resultados previamente obtidos com o MCRG, mas acrescenta informações importantes sobre o ponto de cruzamento das linhas que descrevem as diversas quebras de simetria do modelo.

#### CÁLCULO DOS EXPOENTES $\eta$ E $\nu$ E DO EXPOENTE DE CROSSOVER PARA MODELOS COM PONTOS DE LIFSHITZ CARLOS MERGULHÃO JÚNIOR, CARLOS EUGÊNIO IMBASSAHY CARNEIRO USP

Os primeiros cálculos das propriedades universais dos modelos do tipo ANNNI, que são modelos que apresentam pontos multicríticos do tipo de Lifshitz, foram realizados por Mukamel (1977), Hornreich e Bruce (1978) e Sak e Grest (1978) utilizando técnicas do grupo de renormalização desenvolvidas por Wilson (1974). Nestes trabalhos, foram calculados, até ordem  $\epsilon^2$ , os expoentes críticos  $\eta$  e  $\nu$  e o expoente de "crossover" para  $m$  qualquer, onde  $m$  representa a dimensão do subespaço  $\alpha$  onde há competição. Comparando estes resultados, verificamos que para  $m = 1$  os valores encontrados por estes autores estão em concordância. Contudo, os resultados de Sak e Grest discordam dos obtidos por Mukamel para os casos  $m = 2$  e  $m = 6$ .

Diante esta controvérsia na literatura, recalculamos estes expoentes usando uma outra técnica. Utilizando o formalismo do grupo de renormalização, via teoria de campos, de Brèzin, LeGuillou e Z. Justin (1976) obtém-se as funções de Wilson  $\gamma_\phi(u)$ ,  $\gamma_{\phi^2}(u)$  e  $\beta(u)$  via uma expansão perturbativa na constante de acoplamento  $u$  e uma expansão  $\epsilon$ . Estas funções calculadas no ponto fixo fornecem os valores dos expoentes críticos  $\eta$  e  $\nu$ . Fizemos este cálculo até ordem  $\epsilon^2$  (2-loops) para os casos que apresentam discordâncias:  $m = 2$  e  $m = 6$ . No XIX ENFMC (vide livro de resumos pg.320) foram apresentados os resultados destes expoentes para o caso  $m = 6$

até ordem  $\epsilon^2$ . Em prosseguimento a estes cálculos, estamos exibindo neste trabalho os valores dos expoentes obtidos para o outro caso  $m = 2$  que apresenta um maior interesse experimental.

O cálculo do expoente crítico  $\beta_k$  foi realizado mediante um esquema de renormalização matricial também até ordem  $\epsilon^2$ . Como não há uma definição apropriada para o expoente de "crossover" quando  $m = 6$ , o cálculo deste expoente foi realizado apenas para o caso  $m = 2$ .

### ISING CHAIN WITH RANDOM SHORT- AND LONG-RANGE INTERACTIONS

LINDBERG LIMA GONÇALVES, ANDRÉ DE PINHO VIEIRA

*Departamento de Física da UFCE, Campus do Pici, Caixa Postal 6030, 60451-970 Fortaleza, Ceará, Brazil*

The one-dimensional Ising model, closed chain ( $N$  sites), with random short- and long-range interactions is considered. The model is studied in the framework of the bond problem, and the random variables are considered to satisfy bimodal annealed distributions, which are adjusted by introducing pseudo-chemical potentials. The distribution of the short-range interactions  $J_i$  is explicitly given by

$$p(J_i) = p\delta(J_i - J_A) + (1 - p)\delta(J_i - J_B)$$

and the long-range interactions are considered to satisfy a strongly correlated distribution [1]. The exact solution is obtained by performing a decimation and using the functional integral method, which turn the system into a nearest neighbour Ising chain in an effective strongly correlated random field [2]. For the particular case of uniform ferromagnetic long-range interactions, which generalizes a model discussed by Paladin et al. in a recent paper [3], explicit results are given. The spontaneous magnetization as a function of temperature, as well as the isotherms, are plotted. It is shown that for suitable choices of the parameters, namely for dilute antiferromagnetic or competing short-range interactions, the spontaneous magnetization can increase with temperature in a certain interval and present discontinuities between finite values, in addition to the usual first- and second-order phase transitions shown by the pure model [4], and the isotherms can present discontinuities at zero and non-zero values of the field.

[1] T. Horiguchi and L. L. Gonçalves, *Mod. Phys. Lett. B2*, 1137 (1988).

[2] L. L. Gonçalves, *J. Magn. Magn. Mater.* 140-144, 265 (1995).

[3] G. Paladin, M. Pasquini and M. Serva, *J. Phys. I France* 4, 1597 (1994).

[4] A. P. Vieira and L. L. Gonçalves, *Cond. Matter Phys. (Ukraine)* 5, 210 (1995).

### Modelo de Blume-Capel com Campo Cristalino Aleatório em Duas Dimensões

BEATRIZ BOECHAT

*Universidade Federal Fluminense, Depto. de Física*

NILTON DA SILVA BRANCO

*Universidade Federal de Santa Catarina, Depto. de Física*

Usando o formalismo do Grupo de Renormalização no Espaço Real (GRER), estudamos o diagrama de fases do modelo de Blume-Capel com campo cristalino aleatório em duas dimensões. A hamiltoniana do modelo é dada por:  $\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \sum_i \Delta_i S_i^2$ , onde  $J$  é a constante de troca,  $\Delta_i$  é o campo cristalino no sítio  $i$ , a primeira soma é sobre ligações entre primeiros vizinhos de uma dada rede, a segunda soma é sobre todos os sítios da rede e  $S_i = \pm 1, 0$ . Este modelo foi originalmente proposto no estudo de misturas de  $^3\text{He}$ - $^4\text{He}$  em meios porosos; a desordem no campo representa então o presença do meio aleatório. Em nosso trabalho, o campo cristalino em cada sítio segue uma distribuição bimodal, dada por  $\mathcal{P}(\Delta_i) = p \delta(\Delta_i - \Delta) + (1 - p) \delta(\Delta_i + \Delta)$ . Através da transformação de escala associada ao GRER, esta distribuição evolui para uma forma diversa da inicial; forçamos, entretanto, a distribuição renormalizada a manter a forma bimodal, com parâmetros renormalizados  $p'$  e  $\Delta'$ . Note ainda que as constantes de interação bilinear,  $J$ , e biquadrática ( $K$ , gerada no processo de renormalização mas sempre tomada como zero inicialmente), também são forçadas a manterem a distribuição inicial, ou seja,  $\mathcal{P}'(J) = \delta(J - J')$  e  $\mathcal{P}'(K) = \delta(K - K')$ , respectivamente. Como é usual em tratamentos usando o GRER, aproximamos uma rede de Bravais por uma rede hierárquica, a qual deve respeitar certas simetrias da rede original. Nossos resultados indicam que, para o modelo desordenado ( $p \neq 1$ ), o diagrama apresenta uma linha de transição contínua, na mesma classe de universalidade do modelo de Ising, a qual separa uma fase ferromagnética da fase desordenada. Ao contrário do caso puro ( $p = 1$ ), não encontramos transição de primeira ordem. Este resultado está de acordo com argumentos gerais propostos por Berker e Hui para o comportamento crítico de modelos com desordem. Ele exclui ainda a possibilidade de um ponto fixo a temperatura finita, separando duas linhas de transição contínua, uma com os expoentes críticos do modelo de Ising e a outra pertencente a uma classe de universalidade diferente. A temperatura zero, a transição também é contínua, mas o atrator agora é um ponto fixo aleatório, ( $p^* = 1/2, J^* = \infty, K^* = \frac{3}{4} \ln 2 - J^*, \Delta^* = \infty$ ; com  $J^*/\Delta^* = 0$ ), o qual apresenta um autovalor marginal, indicando correções logarítmicas às leis de escala.

### Estudo do Modelo de Blume-Emery-Griffiths Degenerado em Duas e Três Dimensões

LUCIANO BACHMAN, NILTON DA SILVA BRANCO  
Universidade Federal de Santa Catarina, Depto. de Física

Recentemente, foi introduzido o modelo de Blume-Emery-Griffiths degenerado (DBEG), no estudo de transformações martensíticas [1]. Este modelo tem a mesma hamiltoniana do modelo de Blume-Emery-Griffiths (BEG), ou seja:  $\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^2 S_j^2 + \Delta \sum_i S_i^2$ , onde  $J$  é a constante de troca bilinear,  $K$  a interação biquadrática,  $\Delta$  é o campo cristalino, as duas primeiras somas são sobre ligações entre primeiros vizinhos de uma dada rede, a terceira soma é sobre todos os sítios da rede e  $S_i = \pm 1, 0$ . Entretanto, a fim de levar em consideração efeitos vibracionais na transição estrutural de certos materiais, é suposto que os estados  $S_i = 0$  têm uma degenerescência  $p$  ( $p=1$  corresponde ao modelo BEG usual e o subíndice  $i$  se refere a diferentes sítios de uma rede cristalina). Este sistema foi estudado, para um valor específico do campo cristalino  $\Delta$ , através da aproximação de campo médio e de simulação numérica. Foi verificado que, quanto maior o valor de  $p$ , menor a região onde se encontra a transição contínua, ou seja, a degenerescência favorece a transição de primeira ordem. Neste trabalho, estudamos o comportamento crítico do modelo DBEG tridimensional, através de uma aproximação de campo médio; explorando o diagrama de fases para valores arbitrários das constantes de interação e do campo cristalino, foi possível estabelecer o efeito do parâmetro  $p$  na presença das diversas fases ordenadas, assim como no tipo de transição entre estas fases e entre as fases ordenadas e desordenadas. Para sistemas bidimensionais, a aproximação de campo médio não produz, em geral, resultados qualitativamente corretos. Usamos então o Grupo de Renormalização no Espaço Real, na aproximação de Migdal-Kadanoff no estudo do modelo na rede quadrada. Como extensão do trabalho, vamos incluir desordem na interação bilinear  $J$ , se aproximando, desta forma, das condições experimentais encontradas. [1] E. Vives, T. Castán e P.-A. Lindgård, Phys. Rev. B 53, 8915 (1996).

### Vidros de Spin unidimensionais com interações de muitos vizinhos.

ALEXANDRE SOARES RAMOS, JAIRO ROLIM LOPES  
DE ALMEIDA  
UFPE

No presente trabalho fizemos simulações de Monte Carlo em vidros de spin unidimensionais utilizando o seguinte Hamiltoniano:  $H = -\sum J_{ij} S_i S_j - h \sum S_i$ , onde  $h$  é o campo magnético aplicado, e com os valores dos  $J_{ij}$  (que só as constantes de acoplamento entre spins) assumindo valores distribuídos aleatoriamente com distribuição de probabilidade gaussiana ou bimodal. As cadeias utilizadas tinham da ordem de  $10^6$  spins com

condições de contorno periódicas, e as médias dos valores medidos foram feitas sobre 10 amostras. A taxa de resfriamento foi de:  $\frac{dT}{dt} = 2 \times 10^{-5} J/MCS$  a fim de assegurar que  $M_{FC}$  (medido) fosse igual a  $M$  de equilíbrio. Também estudamos o mesmo sistema através de resultados numéricos exatos. O nosso intuito é de estudar as propriedades do estado fundamental de cadeias unidimensionais para modelos de Ising com interações entre muitos vizinhos na presença de um campo magnético externo. Obtivemos a energia do estado fundamental ( $E_0$ ) em função do campo aplicado e do número de vizinhos interagentes ( $z$ ). No limite onde o número de vizinhos se torna muito grande, a energia do estado fundamental converge para o valor do modelo de vidros de spin de Sherington-Kirkpatrick, como era de se esperar. Levantamos vários gráficos da energia do estado fundamental em função do número de vizinhos para cada valor de campo aplicado ( $h$ ), obtendo assim os expoentes críticos associados no limite  $h$  tendendo a zero. O comportamento não analítico da magnetização em função do campo, da função de distribuição de probabilidade dos acoplamentos, e do número de vizinhos interagentes é apresentado, assim como a comparação dos resultados através das diferentes técnicas utilizadas.

### PROPAGAÇÃO DE DANOS NA PRESENÇA DE CAMPO MAGNÉTICO: O MODELO DE ISING NA REDE TRIANGULAR

CARLOS ARGOLO PEREIRA ALVES

Escola Técnica Federal de Alagoas

ANANIAS MONTEIRO MARIZ

Universidade Federal do Rio Grande do Norte

A comparação entre duas configurações microscópicas de um modelo cooperativo, pode ser feita através do estudo de duas evoluções temporais simuladas numericamente. Uma grandeza relevante neste contexto é a distância de Hamming (Dano) caracterizada pela diferença entre as configurações medida no espaço de fases do sistema. A presença de um fenômeno crítico dinâmico separando as regiões caótica (onde o dano se propaga) e congelada (que tem dano final nulo) motivou inúmeros estudos nesta área, e entre os aspectos relevantes observados, destaca-se uma correlação (em alguns casos somente) com as transições de fase estáticas do modelo, e uma dependência com algoritmos computacionais utilizados na evolução temporal do sistema. Neste trabalho, utilizamos a técnica de propagação de danos para investigar a existência desta transição dinâmica no modelo de Ising antiferromagnética em presença de um campo magnético uniforme na rede triangular. Tal sistema apresenta uma transição magnética (Onsager 1944, Wannier 1950) somente na presença de campo nulo (Metacalf, D. P. Landau 1982) onde os efeitos de frustração não impedem o aparecimento de ordem de longo alcance. Nossos resultados sugerem forte correlação entre a transição dinâmica (ligada a propagação

de danos) e o aparecimento da ordem magnética usual. Simulações de maior precisão (envolvendo sistemas maiores) estão sendo realizadas atualmente com o objetivo de verificar se esta correlação permanece ou, como no caso ferromagnético em rede hipercúbica (le Caer, 1989), desaparece no limite Termodinâmico.

### COEXISTENCIA DE VIDRO DE SPIN E PARES DE COOPER.

SERGIO GARCIA MAGALHÃES  
*Departamento de Matemática-UFSM*  
 ALBA THEUMANN  
*Instituto de Física-UFRGS*

Modelos de Vidro de Spin Quântico vem sendo intensamente revisitados nos últimos anos, tanto porque podem exibir transições de fase induzidas por flutuações quânticas quanto para descrever como a itinerância de fermions pode afetar o ordenamento magnético se incluído algum mecanismo de transporte fermiônico. Outro aspecto interessante destes modelos, em comparação aos seus equivalentes clássicos, é a robustez da solução com simetria de réplica. Por outro lado, a literatura recente (B. Rosenow and R. Oppermann, *Phys. Rev. Lett.*, 1608(1996)) relata o comportamento tricrítico de Vidro de Spin Quântico que aparece quando a concentração de fermions atinge um certo valor característico. O presente trabalho tem por objeto o estudo do modelo Ising Quântico juntamente com um acoplamento BCS local, que pode ser mostrado como uma realização do comportamento tricrítico, mesmo quando estamos com a concentração eletrônica fixada em um elétron por sítio. O problema é formulado em termos de integrais funcionais onde o termo vidro de spin e o acoplamento BCS são representados por meio de variáveis de Grassman. A média configuracional é tratada no contexto do truque das réplicas. Na aproximação estática, o problema de muitos sítios pode ser desacoplado e reduzido ao problema de um sítio, neste estágio buscamos a solução com simetria de réplica. Um diagrama de fase é obtido a partir da solução de 3 equações acopladas relacionando o parâmetro de ordem Vidro de Spin, o parâmetro que caracteriza um ordenamento com pares de Cooper nos sítios e a suscetibilidade magnética. Por fim, a estabilidade da solução com simetria de réplica para este particular modelo é estudada.

For almost four decades the Ising model on the Cayley tree has been considered one of the rare exactly solved models in statistical mechanics. Roughly every twenty years, however, it turns out that our understanding of this model is still not complete.

The first solution was provided by Domb in 1960, who concluded that the Bethe approximation represents the exact solution for this model, with critical temperature  $k_B T/J = 2/[\ln(B+1) - \ln(B-1)]$ , where  $k_B$  is the Boltzmann constant,  $J$  is the nearest neighbor coupling, and  $B$  is the tree branching number (coordination number minus one). In 1974, Eggarter established exact recursion relations for the partition function, concluding that the Bethe approximation does not represent the exact solution for the bulk, instead, it takes place only in the (arbitrarily small) "interior". Simultaneously Heimburg and Thomas, and independently Matsuda, established the absence of spontaneous magnetization at any nonzero temperature, and the divergence of zero-field susceptibility in the temperature region below  $k_B T/J = 2/[\ln(\sqrt{B+1}) - \ln(\sqrt{B-1})]$ . They were followed by Müller-Hartmann and Zittartz, who in turn concluded that the model undergoes a series of phase transitions of all orders, the infinite order transition corresponding to the Bethe solution. All of these works, however, perform involved approximate analysis to establish the zero-field susceptibility behavior in the thermodynamic limit. Only recently a new exact expression for zero field magnetization was established by Melin, but the corresponding exact expression in closed form for the zero-field susceptibility is still lacking.

In this work, we establish the exact expression, in closed form, for the zero-field susceptibility of the Ising model on the Cayley tree of arbitrary generation. We use the known exact recursion relations for the partition function, established by Eggarter in 1974, to find the corresponding recursion relations for its *field derivatives*. These relations are then iterated for the zero field case, yielding the closed form expression for zero-field susceptibility. In the thermodynamic limit, our formula displays behavior in agreement with previous works. Considering the simplicity of our derivation, it seems curious that this problem has evaded solution for almost four decades of continued interest.

(CNPq)

### ZERO-FIELD SUSCEPTIBILITY OF THE ISING MODEL ON THE CAYLEY TREE: EXACT SOLUTION

TATIJANA STOVSIC  
*Laboratory for Theoretical Physics, Vinča Institute for Nuclear Sciences, Belgrade, Yugoslavia*  
 BORKO D. STOVSIC, IVON P. FITTIPALDI  
*Laboratorio de Física Teórica e Computacional, Departamento de Física, UFPE*

### ESTUDOS NUMÉRIOS DAS EQUAÇÕES TAP PARA VIDROS DE SPINS

R. DA SILVA JR, F. A. DA COSTA  
 UFRN

O método das réplicas tem sido responsável por progressos enormes na teoria de campo de médio para vidros de spins e outros sistemas desordenados. Em particular este método revelou que a fase vidro de spins é caracterizada por uma função parâmetro de ordem,

apresentando uma estrutura ultramétrica. Outra abordagem de campo médio introduzida por Thouless, Anderson e Palmer teve papel decisivo na interpretação física dos resultados obtidos pelo método das réplicas. Nesta abordagem somos levados a estudar as equações que descrevem as magnetizações locais sob influência de um campo efetivo que inclui o termo de reação de Onsager (equações TAP). O estudo destas equações mostrou a existência de muitos mínimos locais da energia, onde a superposição destes mínimos seguem a estrutura ultramétrica observada no método das réplicas. Apesar destes resultados importantes, poucos modelos foram tratados por este método. Uma das razões se deve ao grande número de equações a serem resolvidas numericamente, aliada ao fato da natureza instável dessas soluções do ponto de vista numérico. Neste trabalho iniciamos um estudo numérico das equações TAP para alguns modelos para vidros de spins com  $S = 1$ . Uma vantagem deste método é a possibilidade de se tratar tanto modelos de alcance infinito, quanto modelos em dimensão finita. Desta forma consideramos ainda alguns casos numa rede cúbica simples. Quando possível confrontamos nossos resultados com os dados já obtidos pelo método das réplicas. Nosso objetivo é tentar obter mais informações para modelos desordenados tipo BEG, bastante estudados recentemente.

**EFEITO DO CAMPO MAGNÉTICO NO  
MODELO DE ISING COM INTERAÇÕES  
COMPETITIVAS ATÉ TERCEIROS  
VIZINHOS, NA REDE DE BETHE, NO  
LIMITE DE COORDENAÇÃO INFINITA.**

ADRIANO DOS SANTOS, MARCELO HENRIQUE  
ROMANO TRAGTENBERG  
UFSC

Estudamos o modelo de Ising na rede de Bethe com interações ferromagnéticas entre spins primeiros vizinhos, antiferromagnéticas entre spins segundos vizinhos e com sinal arbitrário entre spins terceiros vizinhos, na presença de campo. Este modelo, na ausência de campo magnético externo, já foi estudado por da Silva e Coutinho (Phys.Rev. B34,7975,1986) e Moreira e Salinas (J.Phys. A20,1621,1987). Ele também foi estudado na ausência de campo, mas na aproximação de campo médio, por Selke, Barreto e Yeomans (J.Phys. C18,L393,1985) e Barreto e Yeomans (Physica 134A,84,1985). Estamos interessados no efeito do campo magnético sobre esses complexos diagramas de fases compostos por pontos multicríticos e fases moduladas. A relação de recorrência para a magnetização entre as camadas da rede de Bethe, seguindo o algoritmo proposto por Yokoi, de Oliveira e Salinas (Phys.Rev.Lett. 54,163,1985) é dada por  $m_n = \tanh((m_{n-1} - \kappa_1 m_{n-2} - \kappa_2 m_{n-3} + H)/T)$ . A partir dela, obtivemos um mapa tridimensional associado ao modelo. Empregamos os métodos propostos por

Tragtenberg e Yokoi (Phys.Rev.E52,2187,1995) para a determinação das fronteiras das fases comensuráveis dos diagramas de fases: um procedimento baseado no método de Newton para determinar regiões de estabilidade de fases com largura apreciável e o método da função  $\Phi$  para fases comensuráveis muito estreitas. O comportamento das fases comensuráveis deste modelo na presença de campo apresenta algumas semelhanças com o modelo estudado por Tragtenberg e Yokoi (1995), mas a ocorrência de mais de um ponto de multifases a temperatura zero introduz algumas alterações nos diagramas de fases na presença de campo. Investigamos também a ocorrência de atratores estranhos associados a regiões de co-estabilidade entre fases moduladas e fases uniformes (para e ferromagnética).

**O VIDRO DE SPINS  $m$ -VETORIAL  
ANISOTRÓPICO**

S. R. VIEIRA, F. D. NOBRE, F. A. DA COSTA  
UFRN

Modelos de vidros de spins com simetria contínua e  $m$  componentes cartesianas ( $m \geq 2$ ) representam sistemas de grande relevância tanto do ponto de vista teórico ( $\forall m$ ), como experimental ( $m = 2, 3$ ). A maior parte dos estudos teóricos nestes sistemas foram desenvolvidos a partir de modelos com interações de alcance infinito, representando assim aproximações do tipo campo médio. Embora acredite-se que tais aproximações sejam grosseiras, diversas propriedades previstas através de soluções destes modelos têm sido comprovadas experimentalmente em sistemas com spins de Heisenberg ( $m = 3$ ). A maioria dos modelos estudados são restritos a um espaço isotrópico nas variáveis de spins e em algumas situações, à presença de um campo magnético externo. Neste último caso, os vidros de spins  $m$ -vetoriais apresentam uma fronteira crítica no plano temperatura versus campo, caracterizada pelo ordenamento do parâmetro de vidro de spins transverso (linha de Gabay-Toulouse (GT)). Entretanto, grande parte dos sistemas reais possuem campos de anisotropia que provocam efeitos não previstos pela teoria dos modelos isotrópicos, assim como pela presença de um campo magnético externo. Neste trabalho, estudamos o vidro de spins  $m$ -vetorial na presença de campos de anisotropia cristalina (que faz o sistema preferir orientações segundo um determinado eixo cartesiano) ou cúbica (preferência de orientações ao longo dos diversos eixos cartesianos). Consideramos o caso de interações de alcance infinito obedecendo uma distribuição de probabilidades Gaussiana e investigamos este modelo através do método das réplicas. Estudamos o diagrama de fases na ausência de campo magnético externo, para diferentes valores dos campos de anisotropia, utilizando a hipótese de simetria entre réplicas, assim como os efeitos causados pelas anisotropias na linha GT. Verificamos uma redução nas regiões caracterizadas pelo ordenamento

de vidro de spins transverso, assim como mudanças no expoente associado à linha GT para pequenos valores do campo magnético externo.

### O VIDRO DE SPINS DE ISING COM $S = 1$ EM REDES HIERÁRQUICAS DO TIPO DIAMANTE

A. A. JÚNIOR, F. D. NOBRE, F. A. DA COSTA  
UFRN

O vidro de spins de Ising com spin total  $S = 1$  tem sido objeto de muitos estudos recentemente. Em particular, a versão com interações de alcance infinito (correspondente à aproximação de campo médio), na presença de um campo de anisotropia, denominada de modelo Ghatak-Sherrington, mostrou-se como altamente não trivial: a existência de um ponto tricrítico e de uma fronteira crítica de primeira ordem a baixas temperaturas, proporcionam diversos comportamentos até então não exibidos pelos vidros de spins convencionais, como por exemplo, no caso Ising com  $S = 1/2$ . Pouco é conhecido entretanto para o modelo correspondente com interações de curto alcance; em particular, este problema tem sido muito pouco explorado em redes de Bravais, devido às dificuldades encontradas para tal tratamento. Como uma primeira abordagem, os vidros de spins de curto alcance podem ser estudados em redes hierárquicas, tornando-se mais tratáveis, com alguns resultados exatos podendo ser obtidos. Neste trabalho, estudamos o vidro de spins de Ising ( $S = 1$ ) com interações entre primeiros vizinhos, obedecendo uma distribuição de probabilidades Gaussiana, em redes hierárquicas do tipo diamante. Em tais redes, a abordagem de grupo de renormalização de Migdal-Kadanoff é exata para sistemas puros e espera-se que forneça bons resultados também no caso de sistemas desordenados. Estudamos o diagrama de fases para o caso sem anisotropia e uma distribuição para as interações não centrada; neste caso, resultados qualitativamente análogos aos do caso do vidro de spins de Ising com  $S = 1/2$  em redes similares, são encontrados: a dimensão crítica inferior se encontra no intervalo  $2 < d_l < 3$ . A introdução do campo de anisotropia induz, através do processo de renormalização, ao surgimento de uma nova distribuição de probabilidades associada à este novo parâmetro; a descrição correta do problema é feita através do acompanhamento numérico de duas distribuições.

### QUEBRA DE SIMETRIA ENTRE RÉPLICAS EM VIDROS DE SPINS COM INTERAÇÃO QUADRUPOLEAR

J. M. DE ARAÚJO, F. A. DA COSTA, F. D. NOBRE  
UFRN

O modelo de Blume-Emery-Griffiths (BEG) tem sido amplamente estudado em diversos contextos. Este mo-

delo foi inicialmente introduzido para estudar o comportamento multicrítico na mistura  $He^3 - He^4$ , sendo posteriormente estendido para descrever outras misturas binárias. Várias técnicas foram utilizadas para determinar diversos diagramas de fases incluindo aproximações de campo médio, grupos de renormalização, expansões em séries e simulações numéricas, entre outras. Recentemente tem crescido o interesse no efeito de desordem em modelos análogos, incluindo desordem nas interações entre sítios e diluição em sítios e em ligações. Todavia, o efeito de desordem temperada não foi bem estudado e pouco se conhece sobre o comportamento multicrítico de modelos para vidros de spins tipo BEG. Alguns estudos foram feitos sobre o vidro de spins com inclusão de uma anisotropia de campo cristalino. O efeito de interação quadrupolar tem sido objeto de estudos recentes. Alguns diagramas de fases foram obtidos usando modelos solúveis através do método das réplicas. Na maioria dos casos tais diagramas foram determinados usando a solução com simetria entre réplicas. Atualmente é bem estabelecido que tais soluções apresentam instabilidades do tipo de Almeida-Thouless. Estas instabilidades, e consequentes comportamentos não físicos nos respectivos sistemas, são usualmente removidas quando se usa o esquema proposto por Parisi para quebra de simetria entre réplicas. Neste trabalho consideramos o efeito do primeiro estágio da quebra de simetria proposta por Parisi nos diagramas de fases de um modelo de vidro de spin de alcance infinito com  $S = 1$  levando em conta a inclusão de interação quadrupolar. Em determinados modelos (Potts, interações de  $p$ -spins) este estágio é suficiente para obter a descrição correta do sistema. Isto só pode ser comprovado após uma análise de estabilidade da solução obtida. Embora sendo possível em princípio, esta análise se torna bastante complicada nos casos de nosso interesse, de modo que não a levamos em consideração. Desta forma, nossos resultados revelam as modificações nos respectivos diagramas de fases como uma tendência ao resultado correto que deverá ser obtido através da solução completa de Parisi. Apresentamos ainda alguns argumentos físicos que servem de guia para a obtenção dos diagramas de fases corretos.

### ESTADOS METAESTÁVEIS NO MODELO GHATAK-SHERRINGTON

J. M. DA ARAÚJO, F. A. DA COSTA  
UFRN

A teoria de campo médio baseada nas equações de Thouless, Anderson e Palmer (TAP) para vidros de spins revelou a existência de um enorme número de mínimos locais da energia livre separados por barreiras infinitas no limite termodinâmico. O estudo destes mínimos, também chamados de estados metaestáveis, permitiu uma interpretação natural para a

função parâmetro de ordem introduzida por Parisi para descrever a fase vidro de spins. Posteriormente outros estudos revelaram a importância destes estados metaestáveis para descrever a dinâmica dessa fase. O modelo de Ghatak-Sherrington é uma generalização do modelo bem mais conhecido de Sherrington-Kirkpatrick, onde os spins podem tomar três valores ( $S = +1, 0, -1$ ) e são sujeitos a um campo de anisotropia cristalina. Devido a este campo o modelo apresenta uma transição de fases de primeira ordem a baixas temperaturas. À medida que aumentamos a temperatura esta transição se torna contínua a partir de um determinado valor da temperatura em que aparece um ponto tricrítico. Este quadro está razoavelmente estabelecido no contexto do método das réplicas. Todavia, existe uma grande lacuna no que diz respeito às equações TAP para este modelo. Para entender melhor o que ocorre com a distribuição dos estados metaestáveis neste modelo, calculamos o número de soluções das equações TAP. Uma análise do comportamento deste número nos indica, em particular, quando devemos esperar uma mudança com respeito à dinâmica do respectivo modelo.

**UM MODELO (DE BRINQUEDO?) PARA CRESCIMENTO DE SUPERFÍCIES EM AMBIENTES DESORDENADOS, DENTRO DA MESMA CLASSE DE UNIVERSALIDADE DO MODELO DE PARISI [Europhis Lett 17, 673 (1992)]**

PAULO ROBERTO SILVA  
UFMG

Parisi mostrou que, nas proximidades de uma transição de desancoramento, existe uma janela na qual os expoentes críticos para o crescimento de superfícies são bastante diferentes dos usuais. Ele especula que este efeito pode ser relevante para se entender os resultados experimentais sobre o escalonamento das flutuações para o fluxo viscoso na interface de duas fases em meios porosos. Numa alternativa ao tratamento de Parisi, propomos um modelo definido pela seguinte ação:

$$A = \int d^d x \left[ \frac{1}{2} \lambda h (\vec{\nabla} h)^2 - \eta h - \frac{1}{2} \Omega \frac{\partial h^2}{\partial t} \right] \quad (1)$$

Na ação acima, consideramos que  $h$  mede o tamanho das flutuações na altura das camadas de um sub-extrato de dimensão  $d$ ,  $t$  é o tempo e  $\eta$  é um campo aleatório que é definido por:

$$\frac{\eta^3}{|\eta|^3} = \pm (\cos \theta + i \sin \theta) \left( \cos \frac{2\pi}{3} + i \sin \frac{2\pi}{3} \right) \left( \cos \frac{4\pi}{3} + i \sin \frac{4\pi}{3} \right) \quad (2)$$

Se impomos uma variação estacionária de  $A$ , ou seja, se  $\delta A = 0$  para  $t = \text{constante}$ , obtemos a seguinte equação do movimento:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \left( \frac{\lambda h}{\Omega} \right) \nabla^2 h + \left( \frac{\lambda}{2\Omega} \right) (\vec{\nabla} h)^2 + \frac{\eta}{\Omega} \quad (3)$$

A equação acima é semelhante à equação KPZ [Phys. Rev. Lett. 56,889(1986)]. Para obtermos os expoentes críticos da ação dada por (1) com o campo aleatório (2), usamos o método das dimensões devido a C.J. Thompson [J. Phys. A 9,L25(1976)]. O método de Thompson pode ser considerado como uma alternativa ao grupo de renormalização, para a obtenção dos expoentes críticos de um sistema. Usando a idéia de Thompson num contexto mais amplo, supomos que cada termo de ação dado por (1) contribui em pé de igualdade para a mesma, ou melhor, o momento relevante de cada termo é de ordem 1; ou seja: o segundo momento do 1º termo é da ordem de 1, os terceiros momentos dos segundo e terceiro termos da ação, também são da ordem de 1. Ao aplicarmos o método de Thompson à ação dada por (1), obtemos os mesmos expoentes críticos do que aqueles obtidos por Parisi, donde concluímos que o modelo aqui proposto e o modelo de Parisi pertencem a mesma classe de universalidade.

**MODELO DE SPINS MISTOS COM ANISOTROPIA DE ION ÚNICO NA APROXIMAÇÃO DO GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO DE CAMPO MÉDIO**

ALBERTO S. DE ARRUDA, LUIZ F. PORTELLA FILHO  
UFMT  
J. A. PLASCAK  
UFMG

As propriedades críticas do modelo de spins mistos  $\sigma = 1/2$  e  $S = 1$  foi estudado detalhadamente, dentro da aproximação do grupo de renormalização de campo médio (GRCM), por H.F. Verona et al. Neste trabalho retomamos estes estudos, porém consideramos uma nova versão do GRCM, onde a temperatura crítica é obtida através de uma equação matricial evitando assim uma série de aproximações de tipo campo médio. O modelo de Spins mistos considerado é definido em uma rede hipercúbica pela Hamiltoniana dada por

$$H = -K \sum_{ij} \sigma_i S_j - K_\sigma \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j - K_s \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - \Delta \sum_i S_i^2$$

onde os spins  $\sigma$  e  $S$  estão situados em duas diferentes sub-redes. A constante  $K = \beta J$  é a interação de troca entre os diferentes spins primeiros vizinhos. As constantes  $K_\sigma = \beta J_\sigma$  e  $K_s = \beta J_s$  são interações entre os segundos vizinhos nas respectivas sub-redes.  $\Delta = \beta D$  é a anisotropia de ion único e  $\beta$  é a inversa da temperatura. Este modelo, na sua forma mais simples, no caso em que  $\Delta = K_s = K_\sigma = 0$ , tem sido estudado através do grupo de renormalização no espaço real e da expansão em série de altas temperaturas mostrando que os expoentes críticos estão de acordo com as idéias de universalidade. Os nossos resultados são qualitativamente semelhantes aos resultados obtidos por Verona

et al., porém apresentando uma melhora quantitativa. Por exemplo, para o caso  $\Delta = K_\sigma = K_s = 0$  e tomando blocos com dois e quatro spins, obtemos  $K_c^{-1} = 1.170$  e  $K_c^{-1} = 2.044$  para duas e três dimensões respectivamente. Verona et al. obteve  $K_c^{-1} = 1.290$  e  $K_c^{-1} = 2.17$ , enquanto os resultados das expansões em série fornecem  $K_c^{-1} = 0.975$  e  $K_c^{-1} = 1.897$ . Mostraremos diagramas explicitando o comportamento da temperatura em função da anisotropia de íon único. No caso  $K_s = S_\sigma = 0$ , a temperatura diminui quando a anisotropia cresce. Para valores muito grande da anisotropia a temperatura tende a um valor constante.

### MAGNETIC PROPERTIES OF A MIXED ISING SPIN SYSTEM

ALBERES LOPES DE LIMA, BORKO D. STOŠIĆ, IVON P. FITTIPALDI

*Laboratório de Física Teórica e Computacional,  
Departamento de Física, UFPE*

Over the last few years there has been an increasing number of works employing approximation schemes superior to the traditional mean-field theory (MFA). In particular, the recently developed (see [1] and references therein) two-spin cluster effective-field approach represents one such scheme that has already been successfully applied to various interesting Ising problems. This theory is based on the use of rigorous Ising spin identities and utilizes a convenient differential operator technique. In contrast with the usual mean-field approach, it takes exactly into account all the relevant self-spin correlations, and consequently correctly distinguishes the geometry of the lattice structure.

The purpose of this work is to present extensions of the referred two-spin cluster effective-field approach to non-random two-sublattice mixed spin- $\frac{1}{2}$  and spin-1 Ising models, considering a single-ion uniaxial crystal field anisotropy or, equivalently, a biquadratic exchange interaction. Here the main aim is to discuss the effect of the single-ion anisotropy on the transition temperature. The method, which can systematically include correlation effects, is applied to several two and three-dimensional lattice structures. The numerical results are compared with a special exact solution, and other approximate schemes such as Bethe-Peierls approximation and Renormalization Group. The presented analysis provides a reasonable degree of qualitative and, to a certain extent, quantitative confidence for application to this class of systems. The present formalism, in spite of its simplicity, yields results which represent a remarkable improvement over the usual mean-field treatment. [1] I.P.Fittipaldi, J. Mag. Mat. **131**, 43 (1994).

(CNPq)

### PONTOS TRICRÍTICOS EM ANTIFERROMAGNETOS CÚBICO DE FACE CENTRADA.

MARCELO PALMA GRILLON, FRANCISCO GEORGE BRADY MOREIRA

*Departamento de Física - UFPE*

Realizamos simulações no ensemble microcanônico de antiferromagnetos cúbico de face centrada (FCC), com interações entre primeiros vizinhos  $J$  e na presença de um campo externo  $H$ . A dependência com a temperatura da magnetização e energia interna é calculada, diretamente das simulações, para vários valores do campo magnético externo. Usamos a construção de Maxwell nas curvas de energia versus temperatura, para calcular o calor latente e a temperatura de transição em função do campo aplicado.

O diagrama de fase no plano  $H/J$  versus  $T/J$  apresenta três fases: antiferromagnética, superantiferromagnética e paramagnética; em concordância com o diagrama de fases que resulta da aplicação do algoritmo de Metropolis. Um importante resultado de nosso trabalho refere-se à natureza das transições de fases. Contrariando a literatura existente, apresentamos fortes indícios de que as transições entre as fases antiferromagnética e paramagnética e as fases superantiferromagnética e paramagnética são de segunda ordem, em temperaturas abaixo de uma temperatura tricrítica e para valores de campo nos intervalos  $2.9 < H/J < 3.0$  and  $4.6 < H/J < 4.7$ , respectivamente. De fato, nossos resultados para a dependência do calor latente com o campo, ao longo dessas transições, apresentam um calor latente nulo nestas duas regiões de campo magnético aplicado.

### FÍSICA ESTATÍSTICA (Transições de Fase e Fenômenos Críticos) - 12/06/97

#### ZEROS DA FUNÇÃO DE PARTIÇÃO E FINITE SIZE SCALING PARA O MODELO DE ISING EM DUAS DIMENSÕES.

N. A. ALVES, J. R. DRUGOWICH DE FELÍCIO  
*Departamento de Física e Matemática Faculdade de  
Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto  
Universidade de São Paulo*

U. H. HANSMANN

*Institute for Molecular Science, Ozaka, Japan*

Desde os trabalhos de Marinari et al., a determinação dos zeros da função de partição, no plano complexo de

temperatura, tem sido utilizada como importante ferramenta na investigação de propriedades críticas de modelos da mecânica estatística. O trabalho de Itzykson et al.[1], em particular, mostrou como obter o expoente  $\nu$ , do comprimento de correlação, a partir do comportamento do primeiro zero de  $Z$  em função da aresta  $L$  de sistemas finitos (geometria  $G_1$  na linguagem de Barber). Para o modelo de Ising, tradicional laboratório da mecânica estatística, a determinação dos chamados zeros de Fisher começou com Katsura, Abe e Suzuki, em 1967 mas ainda hoje está limitada a redes pequenas. Recentemente, no entanto, Beale [2] revisitou a solução de Kauffman e foi capaz de exibir os coeficientes  $g(E)$  do polinômio na variável  $u = \exp(-4\beta)$ , onde  $\beta = \beta_x + i\beta_y$ . Eles podem ser calculados pelo MATHEMATICA. Nessa comunicação, nós usamos os coeficientes de Beale para obter os zeros da função de partição, usando duas abordagens. A primeira consiste em determiná-los diretamente com o MATHEMATICA. Isso pode ser feito apenas para  $L$  menor do que 16 (a razão é que os coeficientes crescem de forma assustadora quando  $L$  aumenta). Para contornar esse problema partimos para a segunda abordagem - o scanning - que consiste em procurar as raízes de  $Z$ , trabalhando separadamente com sua parte real e imaginária (na verdade com o logaritmo delas). Como estamos procurando os valores de  $\beta$  em que  $Z$  muda de sinal precisamos ter cuidado com o argumento do logaritmo. Com tudo isso, conseguimos encontrar o primeiro zero para redes grandes ( $L$  até 64). Os resultados obtidos permitiram um estudo rigoroso das previsões do finite size scaling e das correções efetivas.

[1]C. Itzykson, R. B. Pearson and J. B. Zuber, Nucl. Phys. B220, 415 (83)

[2]P. D. Beale, Phys. Rev. Lett. 76, 78 (96)

## WEAK INSTABILITY OF QUANTUM SPIN GLASS MODELS

ALBA THEUMANN  
*Instituto de Física—UFRGS*

Since the formulation of the Sherrington Kirkpatrick theory for Ising spin glasses it followed a natural development of analogous theories for quantum spins that may exhibit interesting differences in their low temperature properties. Spin operators form a vector in three dimensions and are a representation of the three non-commuting angular momentum operators, hence they are quantum mechanical objects and the natural coupling among spins that respects rotational invariance is given by the Heisenberg model where two spins are coupled through a scalar product. From the point of view of magnetism, the Ising model is a truncated Heisenberg model where the transverse components have been suppressed leaving the interaction only between the components in one preferential direction, say  $\sigma_x$ , that can be considered to be diagonal with eigenvalues  $\pm 1$ ,

hence the Ising spin glass model is a model for "classical" spins. Depending then on which model is going to be "quantized" one obtains different theories of quantum spin glasses.

We study here the Almeida-Thouless stability of two quantum spin glass models solved some time ago with a replica symmetric Ansatz. In the first model<sup>1</sup> we consider only the Ising limit, while in the second model<sup>2</sup> we consider the complete Heisenberg Hamiltonian. In both models the interactions are of the Sherrington-Kirkpatrick type and the spins are represented by bilinear combinations of fermionic fields. While the first model<sup>1</sup> is almost classical, exhibiting a negative entropy at low temperatures, we show in this paper that the eigenvalue  $\lambda_{RS}$  is positive at the critical temperature and becomes negative at a temperature below the transition point. The second model<sup>2</sup> is more interesting because  $\lambda_{RS}$  is positive at the critical temperature  $T_{SG}$ , vanishes at  $T_1 < T_{SG}$  and becomes positive again in a finite region close to  $T = 0$ . The entropy remains positive all the way down to  $T = 0$  but it presents a break of monotonicity when  $\lambda_{RS}$  becomes negative. This seems to indicate that the replica symmetry stability is enhanced in spin glass models for quantum spins.

### References

[1] Theumann A. and Vieira Gusmão M., Phys. Lett. 105A 311(1984).

[2] Theumann Alba, Phys. Rev. B 33 559 (1986)

## Equilibrium Properties of the Ising Frustrated Lattice Gas

JEFERSON J. ARENZON  
*Instituto de Física, UFRGS*  
MARIO NICODEMI, MAURÓ SELLITTO  
*Università di Napoli, ITALIA*

We study the equilibrium properties of an Ising frustrated lattice gas within a mean field replica approach<sup>1</sup>. Essentially, the model considers a lattice gas in a frustrated medium (the lattice bonds assume either positive or negative values) where the particles have an internal degree of freedom (given by its spin) that accounts, for example, for possible orientations of complex molecules in glass forming liquids. These steric effects are greatly responsible for the geometric frustration appearing in glass forming systems at low temperatures or high densities. This model bridges usual *Spin Glasses* and a version of *Frustrated Percolation* model, and has proven relevant to describe the glass transition and the Reynolds transition (in the context of granular media). It shows a rich phase diagram which in a definite limit reduces to the known Sherrington-Kirkpatrick spin glass model. Specifically, the presence of disorder in the bilinear term leads to the appearance of a transition from a paramagnetic to a spin glass phase at low temperature or high density, whose nature (first or second order) depends on the chemical potential. One can also iden-

tify a line where a dynamical instability appears, as in spin glass models with discontinuous transition like the Potts glass.

1. J.Physique I France 6 (1996) 1143

## MODELOS DE ISING COM FLUTUAÇÕES GEOMÉTRICAS

SUANI T. R. PINHO

*Universidade Federal da Bahia*

THOMÁS A. S. HADDAD, SILVIO R. A. SALINAS

*Universidade de São Paulo*

Recentemente foi proposto um critério, semelhante ao critério de Harris para sistemas desordenados, estabelecendo as circunstâncias em que flutuações geométricas, de caráter aperiódico, tornam-se relevantes na determinação do comportamento crítico de sistemas estatísticos de spins. Neste trabalho consideramos dois modelos do tipo Ising com interações aperiódicas geradas por uma sequência binária de Fibonacci, definida pela regra de substituição  $A \rightarrow A^m B^n$ , e  $B \rightarrow A$ , onde  $m$  e  $n$  são inteiros. De acordo com o critério de relevância, em determinados casos as flutuações geométricas mudam o comportamento crítico quando a matriz de substituição, associada à regra de Fibonacci, for do tipo não-Pisot (isto é, quando os seus dois autovalores tiverem módulo maior do que a unidade). Consideramos inicialmente um modelo de Ising ferromagnético unidimensional, com interações aperiódicas de primeiros vizinhos, associadas aos parâmetros de troca  $J_A$  ou  $J_B$ , distribuídos de acordo com a sequência de Fibonacci. A solução exata através da técnica do grupo de renormalização indica a existência de um ponto fixo físico que muda de caráter (ponto de sela ou nó instável) com o tipo da matriz de substituição. A seguir consideramos o caso (mais complexo) de um modelo de Ising ferromagnético, com interações aperiódicas de primeiros vizinhos, sobre a estrutura hierárquica do diamante, com  $q$  conexões. Neste caso também se escrevem relações (exatas) de recorrência, que indicam a existência de um ponto fixo a temperatura finita. O caráter deste ponto fixo, que pode ser um ponto de sela ou um nó instável, depende dos valores dos parâmetros  $m$ ,  $n$  e  $q$ . Estamos investigando o comportamento crítico destes modelos à luz do critério de relevância proposto na literatura.

## Renormalização do autômato celular de Domany-Kinzel

TÂNIA TOMÉ, MÁRIO J. DE OLIVEIRA

*Instituto de Física, Universidade de São Paulo*

O autômato celular probabilístico de Domany-Kinzel é estudado através do grupo de renormalização no espaço real. No estado estacionário, esse autômato possui duas

fases: um fase ativa, caracterizada por uma densidade não nula de partículas e uma fase congelada, ou absorvente, com densidade nula de partículas. Usualmente, como acontece com o modelo de Ising que possui simetria de inversão de spin, um grupo de renormalização no espaço real deve ser implementado pelo uso da regra da maioria. No presente modelo, entretanto, o uso dessa regra levaria a uma destruição do estado absorvente e essa regra deve então ser abandonada. Afim de preservar o estado absorvente, propomos neste trabalho uma outra regra de renormalização em que blocos de sítios com pelo menos um sítio ocupado é renormalizado em um sítio ocupado. Somente blocos com todos os sítios vazios são renormalizados em um sítio vazio. Utilizamos blocos com dois sítios. O presente esquema exige que o estado estacionário seja obtido de forma aproximada. Usamos aproximações sucessivas de ordem  $n$  em que correlações envolvendo  $n$  sítios são tratados exatamente. Através dessa técnica, usando aproximações até ordem  $n = 8$ , conseguimos obter o diagrama de fases do autômato, que está de acordo com simulações numéricas, e também o expoente crítico correspondente ao comprimento de correlação espacial.

## CAMPO MÉDIO ESTOCÁSTICO

TÂNIA TOMÉ, NELI R. S. ORTEGA

*IFUSP*

Temos como objetivo o estudo das transições de fases cinéticas em modelos definidos por dinâmicas estocásticas que não obedecem à condição de balanceamento detalhado. Assim sendo, consideramos sistemas de partículas interagentes residindo em reticulados e evoluindo de acordo com regras locais, markovianas e irreversíveis. Mais particularmente, nesse trabalho, estudamos os estados estacionários macroscópicos de autômatos celulares probabilísticos. A caracterização de tais estados pode ser feita através de aproximações de campo médio dinâmico (1). Aproximações de campo médio a nível de pares, muitas vezes, fornecem bons resultados qualitativos quando comparados com simulações numéricas. Entretanto a introdução de mais correlações nessa aproximação é em geral muito custosa e resulta em poucas melhorias quantitativas. Propomos aqui uma aproximação de campo médio que é realizada através de método estocástico, o qual, permite levar em conta, facilmente, correlações de ordem  $n$  onde  $n$  pode ser grande. Essa abordagem, que denominamos de aproximação de campo médio estocástico, trata de forma exata correlações de ordem  $n$ . Nesse trabalho utilizamos o método na obtenção do diagrama de fases de um autômato celular probabilístico para o sistema imune

(1) e na obtenção de parte do diagrama de fases do autômato celular de Domany-Kinzel. (2) Efetuamos aproximações de ordem  $n = 1$  até 100, o que permitiu a realização de extrapolações numéricas com  $n \rightarrow \infty$ .

(1) T. Torné and J. R. Drugowich de Felício, Phys. Rev. E **53**, 3976 (1996). (2) E. Domany and W. Kinzel, Phys. Rev. Lett. **53**, 311 (1984).

### Modelo de Ashkin-Teller: simulação através de um mapeamento em um modelo de percolação.

MAURICIO BORGES BOUABCI, CARLOS EUGENIO  
IMBASSAHY CARNEIRO  
USP

Mostramos neste trabalho que o modelo de Ashkin-Teller com interação de quatro spins antiferromagnética pode ser mapeado em um modelo de percolação de ligações, o que nos permite estudar este modelo em termos de propriedades dos clusters formados no modelo de percolação. Este mapeamento nos permite também simular numericamente o modelo através de um algoritmo de cluster. Existem duas grandes vantagens em utilizarmos este tipo de abordagem. Uma delas é a de que este tipo de algoritmo pode apresentar expoente crítico dinâmico menor do que algoritmos que efetuam apenas modificações locais na rede, como o algoritmo de Metropolis. Desta forma, o tempo de decorrelação entre as configurações geradas é reduzido, possibilitando a obtenção de dados mais precisos. Outra vantagem é a de que ele pode eliminar a presença de estados meta-estáveis, o que é útil para calcularmos a localização de linhas de transição de primeira-ordem. Utilizando estas vantagens, procuramos mostrar a existência de uma fase de Baxter assimétrica, conforme havia sido previsto por uma abordagem via árvore de Cayley. Mostramos também que, ao contrário do que acontece quando a interação de quatro spins é ferromagnética, a simulação do modelo através de um algoritmo de embedding não é equivalente a simulação através do mapeamento em um modelo de percolação, pois nesta existem certos tipos de operações que não são possíveis no algoritmo de embedding. Isto mostra que a simulação completa através do mapeamento em um modelo de percolação é fundamental para capturarmos todas as características do modelo.

### Crossover from extensive to nonextensive behavior driven by long-range $d=1$ bond percolation

HÊNIO HENRIQUE ARAGÃO REGO, LIACIR DOS SANTOS LUCENA, LUCIANO RODRIGUES DA SILVA  
Departamento de Física Teórica e Experimental,  
Universidade Federal do Rio Grande do Norte  
CONSTANTINO TSALLIS  
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

A linear chain (an one dimensional system with first neighbors interactions) cannot present a phase transition at any finite temperature. For instance, the Ising ferromagnet has the critical point at zero temperature.

In a similar way, in the domain of disordered geometrical systems of percolative type, the critical point is given by the critical probability equal to one. Nevertheless the situation can be drastically changed if we include. The  $\alpha \rightarrow \infty$  corresponds to the usual first neighbors case. On the other hand  $\alpha = 0$  corresponds to the usual first neighbors case. On the other hand  $\alpha = 0$  corresponds to what is known as "molecular field" situation. We have studied the behavior of  $p_c$  as a function of  $\alpha$  for bond percolation specially in the case  $d=1$ . Our purpose was to verify a conjecture formulated in the context of the generalized Tsallis Statistics (an extension of Boltzmann - Gibbs statistics) that says that the scaling laws that vary with the size  $N$  of the system, depend on the quantity

$$N^* = (N^{1-\alpha/d} - 1)/(1 - \alpha/d)$$

This has as a consequence that  $p_c = 0 \forall \alpha \leq 1$  and  $p_c \propto \alpha - 1$  no limite  $\alpha \rightarrow 1 + 0$ . We also have studied the bi-dimensional problem. In this case, we know, the transition occurs even for short range bonds ( $\alpha \rightarrow \infty$ ). In addition we discuss the effect of dilution.

#### References:

- (1) Jund P., Kim S. G. and Tsallis C., Phys. Rev. B **52** (1995) 50.
- (2) Cannas S. A. and Tamarit F. A., Phys. Rev. B **54** (1996) R126661.
- (3) Grigera J. R., Phys. Lett. A **217** (1996) 47
- (4) Sampaio L.C., de Albuquerque M.P. and de Menezes F. S., Phys. Rev. B, march 1997, in press

## FÍSICA ESTATÍSTICA (Transições de Fase e Fenômenos Críticos) – 13/06/97

### Liquid State Theory of Charge Colloids

MARCIA C. BARBOSA, YAN LEVIN  
Instituto de Física, UFRGS

A simple theory of the fluid state of charged colloidal suspensions is proposed. Our system consists of  $N_p$  polyelectrolytes inside a volume  $V$ . The colloids are idealized as hard spheres of radius  $a$  carrying  $Z$  ionized groups of charge  $-q$  uniformly spaced along the surface. A total of  $ZN_p$  counterions are present to preserve the overall neutrality of the system. For simplicity, we take the counterions to be point-like and to carry charge  $+q$ . The solvent is represented as a uniform medium with dielectric constant  $D$ . The full free energy of this solution obtained in the context of the *Restrictive Primitive Model* is given by the expression  $F = F_{ID} + F_{CP} + F_{PP} + F_{OCP}$ . The first term,  $F_{ID}$  is the ideal gas entropic contribution associated with the counterions. The second term,

the electrostatic energy, is taken into account by solving a linearized version of the *Poisson Boltzman* in the same spirit of the Debye-Hückel approximation. Then, the non-linearities omitted in the process of linearization of the Poisson-Boltzman equation are reintroduced through the allowance of ion association. Consequently,  $n_b < Z$  counterions condense into each polyion. The third term,  $F_{PP}$ , accounts for the interaction between the polyions. Finally, the last term,  $F_{OCP}$ , is the electrostatic free energy due to the interaction between free ions that is estimated as that of the *One Component Plasma (OCP)*. The effective charge of the system is obtained by requiring that it minimizes the above free energy. At high volume fraction the value derived from our results is compared with that obtained on the basis of the full nonlinear Poisson-Boltzmann equation inside a Wigner-Seitz cell. The pressure inside the polyelectrolyte solution is computed. In agreement with the current Experimental and Monte Carlo results, no phase transition is encountered.

### Thermodynamic Theory of Counterion Association in Rigid Polyelectrolytes

YAN LEVIN, MARCIA C. BARBOSA  
*Instituto de Física, UFRGS*

Many complex organic molecules such as DNA and other polyphosphates, upon delusion in aqueous solutions, become ionized. The importance of a polyelectrolyte nature of these polymers has been realized for a long time and is expected to strongly affect how these molecules interact with their environment. In this respect the polyelectrolyte chemists have been at a great disadvantage compared to their colleagues involved in research on simple electrolytes. For over seventy years electrolyte chemists have possessed an important tool at their disposal, Debye-Hückel limiting, low density laws, for pressure and other thermodynamic functions. The goal of this paper is to construct a similar set of limiting laws valid for rigid polyelectrolytes. A new theory of rodlike polyelectrolyte solutions is presented. It is found that at low densities, and below temperature  $T_{cl}$ , the counterions associate with the polyions forming clusters consisting of one polyion and  $n$  counterions. The distribution of cluster sizes is gaussian, leading to strong logarithmic corrections to the limiting laws obtained by Manning. In the *mathematical limit of infinite dilution* the distribution of the cluster sizes approaches a delta function centered on the value postulated by Manning. Above  $T_{cl}$  the solution consists of free (unassociated) counterions and polyions, and the limiting laws remain unaffected. Finally, unlike some recent suggestions, we demonstrate that the counterion condensation is distinct from the Kosterlitz-Thouless transition. In fact, the association phenomena inside the a polyelectrolyte solution can be compared to a formation of micelles in amphiphilic systems. There is, however, an important

difference. While the amphiphilic micelles can be diluted away (broken apart) by increasing the amount of solvent, the strong electrostatic interactions keep the polyion-counterions clusters from dissociating, even as the concentration of polyelectrolyte is decreased all the way down to zero.

### Efeitos Cinéticos e de Anisotropia Durante a Solidificação Colunar

MAURÍCIO FABBRI  
*Universidade São Francisco*  
ÁLVARO LUIZ FAZENDA  
*Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais*

A morfologia da interface líquido-sólido durante a solidificação direcionada em um meio superresfriado tende a ser colunar-dendrítica, e depende fortemente da anisotropia da tensão superficial. Por outro lado, medidas experimentais são comumente feitas relacionando, macroscopicamente, a temperatura média do sistema com a fração solidificada (as chamadas "curvas de resfriamento"). Quando os efeitos cinéticos e de curvatura interfacial são desprezíveis, e o calor é retirado lentamente do sistema, e ainda, o superresfriamento na fase líquida é pequeno, a curva de resfriamento de substâncias puras apresenta um patamar bem definido na temperatura característica de fusão (equilíbrio líquido-sólido). Neste trabalho, relacionamos os modelos microscópicos com as curvas de resfriamento, em condições generalizadas, utilizando um modelo de campo de fase (CF). O método CF descreve o estado de fase local (líquido ou sólido) através de um parâmetro de ordem, cuja distribuição espacial e evolução temporal podem ser obtidas por um tratamento variacional, a partir de um potencial termodinâmico adequado. Desta maneira, o problema multidimensional de solidificação pode ser resolvido numericamente sem necessidade de uma formulação de fronteiras livres, e engloba implicitamente os efeitos cinéticos e de curvatura local na interface. As equações CF são aqui resolvidas para um domínio bidimensional, através de uma discretização simples sobre grades fixas. Considerando um crescimento em líquido superresfriado em uma ampola longa, com transporte térmico direcional, registramos a forma da interface e sua dimensão fractal, à medida em que monitoramos a curva macroscópica média de resfriamento. A retirada de calor apenas no sentido longitudinal inibe a ramificação dendrítica, que é, por outro lado, favorecida pelo aumento do calor latente e a presença de anisotropia. As curvas de resfriamento, na ausência de convecção, mostram características típicas que as correlacionam, de maneira aproximada, com a morfologia local da interface.

### **Autômato celular probabilístico como formulação para jogos dinâmicos**

JOSÉ R. N. CHIAPPIN, MÁRIO J. DE OLIVEIRA  
*Instituto de Física, Universidade de São Paulo*

No contexto de jogos dinâmicos, que servem para simular situações de comportamento e conflito humano, pode-se destacar várias abordagens, entre elas, uma combinação de processos estocásticos markovianos com sistemas dinâmicos. E, através desta abordagem de sistemas dinâmicos, pode-se naturalmente associar uma interpretação de aprendizagem para tais jogos. No entanto, nosso interesse, agora, é propor ainda um outro e novo enfoque para tratar deste tema e, por aqui beneficiar-se das possibilidades que as novas técnicas associadas com este enfoque proporcionam. Nesta linha, propomos o problema de encontrar soluções de equilíbrio e avaliar as condições de estabilidade para jogos dinâmicos, em particular, para o jogo do "dilema do prisioneiro", jogo "standard" em ciências humanas. O problema é formulado, então, neste novo enfoque, que é aquele da representação do modelo do autômato celular probabilístico onde a lei de evolução dinâmica é construída a partir de regras locais do comportamento e cada jogador é associado a uma variável dinâmica com dois estados, coopera e não coopera. Modelos são construídos tanto para o caso de poucos jogadores quanto para o caso de um grande número deles, com regras que podem ser diferentes ou as mesmas para cada jogador. Além disso, considera-se estes casos em diferentes geometrias, em especial, aquele da cadeia unidimensional. O problema é abordado por meio de dois recursos, o método de simulação numérica computacional de Monte Carlo e por meio de uma combinação do método de processos estocásticos markovianos e sistemas dinâmicos.

### **In-plane incommensurate phases in hcp structure**

IGOR LUK'YANCHUK, ADO JORIO, MARCOS  
ASSUNÇÃO PIMENTA  
*Universidade Federal de Minas Gerais*

An hexagonal-closed-packed Ising model with competing interaction is used to study the appearance of the modulated phases in hcp structures with modulation perpendicular to the hexagonal axis. In the frame of the standard mean-field approach we show that the basal-plane  $1q$  incommensurate phase appears as a result of the interplay between the antiferromagnetic *in-plane* nearest neighbor interaction and the ferro- or antiferromagnetic *out-plane* nearest and next nearest neighbor interactions. Depending on the interaction parameters the calculated mean-field phase diagram reveals various incommensurate and lock-in phases. The results

are consistent with the previous cluster-approximation calculations for the binary alloys that predict the high-degenerate multi-sublattices states at low temperature. We apply our results to study the appearance of the modulated phases at the order-disorder transition in several  $A'A''BX_4$  compounds related with partial freezing of the vertical rotational degree of freedom of  $BX_4$  tetraedra, when the centres of gravity of those are forming the hexagonal-closed-packed structure. The Ising variable is related with the vertical orientation of the apexes of  $BX_4$  tetraedra. The basal-plane  $1q$  incommensurate state can appear as an intermediate state between the high-symmetry high-temperature  $P6_3/mmc$  phase and the low-symmetry  $P6_3mc$ ,  $Pm\bar{c}n$ ,  $Pm\bar{c}n$ ,  $R3m$  lock-in phases existing at low temperature. We explain therefore the basal-plane  $1q$  incommensurate phases in  $K_2MoO_4$ ,  $K_2WO_4$ ,  $Rb_2WO_4$  compounds that were observed experimentally. We use the model to study the phase sequence in  $LiKSO_4$ . We predict also that the incommensurate state can appear in other related  $A'A''BX_4$  compounds under the uniaxial pressure along the hexagonal axis that changes the interaction parameters.

### **PROPAGAÇÃO DE DANOS NO ISING COM CAMPO ALEATÓRIO EM UM FILME FINO**

HEBER R. DA CRUZ, URIEL M. S. COSTA

*Departamento de Física, Universidade Federal de Alagoas*

O estudo da transição de fase em sistemas magnéticos finitos tem, recentemente, despertado considerável interesse. Uma das razões para este interesse é o efeito da espessura do filme nos resultados. Neste trabalho estudamos um filme, isto é, um sistema "infinito" em duas dimensões (ou seja, usamos condições cíclicas de contorno) e finito na terceira, tipo Ising com campo aleatório (superfície e volume). Usamos o método da propagação de danos, com a dinâmica de Metropolis. Este método permite distinguir uma fase congelada, onde o dano não se propaga, de uma fase caótica, onde o dano se propaga. Obtivemos a distância de Hamming para diversas espessuras do filme, diversos valores do campo e temperaturas. A dependência com a temperatura obtida é aquela esperada para a dinâmica de Glauber: fase congelada nas baixas temperaturas e fase caóticas nas altas temperaturas. Para uma dada espessura do filme, a temperatura de transição diminui com o aumento do campo magnético. Ao mesmo tempo, quanto mais alto o campo magnético, menor é o valor máximo da distância de Hamming, ou seja, a distância de Hamming em altas temperaturas. Para valores suficiente altos do campo a fase caótica parece desaparecer completamente. Estas diferenças, diminuem com o espessamento do filme. Para um dado valor do campo

magnético, a temperatura de transição cresce com a espessura do filme. A diferença entre as temperaturas de transição para os vários valores do campo diminuem, no entanto. Vemos então que este modelo apresenta um comportamento interessante e que reproduz, para valores limites, resultados conhecidos. (CNPq, FINEP)

## FÍSICA ESTATÍSTICA (Transições de Fase e Fenômenos Críticos) – 13/06/97

### ESTUDO DE POLÍMEROS COM CRUZAMENTOS NA REDE QUADRADA.

KLEBER D. MACHADO  
USP

JÜRGEN F. STILCK  
UFSC

Usando técnicas de matriz de transferência, hipótese de escala de tamanho finito, grupo de renormalização fenomenológico e idéias de invariância conforme, estudamos o modelo de polímeros com cruzamentos em sítios da rede quadrada. Definimos uma atividade  $x = e^{-\beta\mu}$  para as ligações e  $y = e^{-\beta\epsilon}e^{-2\beta\mu}$  para o cruzamento de duas ligações, onde  $\epsilon$  é a energia de interação entre as ligações que se cruzam. Calculamos o comprimento de correlação para duas tiras de larguras  $L$  e  $L'$  e comprimento infinito, encontrando os pontos fixos das equações do grupo de renormalização fenomenológico. Com este formalismo, obtivemos os diagramas de fases do modelo que apresenta três fases, sendo duas delas polimerizadas. Uma das fases polimerizadas tem densidade abaixo do valor de saturação, enquanto obtivemos indicações de que a densidade da outra fase é máxima, de maneira que todos os sítios da rede são visitados pelo polímero nesta fase. Os valores estimados dos expoentes  $\nu$  e  $\eta$  na transição entre as fases não-polimerizada e polimerizada regular são consistentes com  $\nu = 3/4$  e  $\eta = 5/24$ , que se acredita serem exatos para  $y = 0$ . O expoente  $\nu$  pode ser estimado a partir da linearização da relação de recorrência em torno do ponto fixo e estimativas para o expoente  $\eta$  foram obtidas usando argumentos de invariância conforme a partir das amplitudes dos comprimentos de correlação nas tiras na condição crítica do modelo bidimensional. O diagrama de fases obtido concorda qualitativamente com aquele encontrado resolvendo exatamente o modelo numa rede de Husimi de coordenação igual a quatro [1].

1 - J. F. Stilck e J. C. Wheeler, *Physica A* **190**, 24 (1992).

### POLÍMERO COM INTERAÇÕES ATRATIVAS ENTRE LIGAÇÕES E MONÔMEROS NA REDE DE HUSIMI.

WELCHY L. CAVALCANTE, JÜRGEN F. STILCK  
UFSC

Modelos de caminhadas auto-excludentes com interações atrativas entre monômeros ou entre ligações têm sido usados para estudar a transição de colapso de polímeros. Recentemente [1], foi verificado que numa rede de Husimi de coordenação igual a quatro, formada por quadrados, a natureza da transição de colapso em caminhadas auto-excludentes é diferente quando se considera interações atrativas entre ligações ou monômeros. Para monômeros atrativos, a transição de colapso constitui um ponto tricrítico e para ligações atrativas ela se dá num ponto crítico terminal. Neste trabalho, resolvemos um modelo com ambas as interações atrativas, com os parâmetros  $x$  (atividade de uma ligação),  $\omega_m$  (fator de Boltzmann de um par de monômeros em sítios primeiros vizinhos e não consecutivos) e  $\omega_b$  (fator de Boltzmann de um par de ligações não consecutivas num quadrado elementar). Para um número de coordenação  $q$  superior a quatro encontramos apenas uma fase polimerizada e outra não-polimerizada, separadas por uma transição de primeira ou segunda ordem, com um ponto tricrítico no local em que a ordem da transição muda. Já para  $q = 4$ , surge uma segunda fase polimerizada, caracterizada pela saturação na densidade da caminhada. Em geral, observamos que a transição entre as fases não polimerizada e saturada é de primeira ordem e o ponto em que se encontram as três linhas de transição é um ponto crítico terminal. Efetuando uma mudança de variáveis para  $\omega = \sqrt{\omega_m^2 + \omega_b^2}$  e  $\Theta = \arctg(\omega_m/\omega_b)$  observamos que para  $\Theta$  inferior a um valor dado  $\Theta_c$  um ponto tricrítico fica localizado na fronteira entre as duas fases polimerizadas, enquanto para  $\Theta > \Theta_c$  o ponto tricrítico se localiza entre as fases não-polimerizada e polimerizada regular. Para  $\Theta = \Theta_c$  as transições entre as fases não-polimerizada e polimerizada e entre as fases polimerizada e saturada são sempre de segunda ordem e o ponto de encontro entre ambas se torna um ponto multicrítico.

1 - J. F. Stilck, K. D. Machado e P. Serra, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 2734 (1996).

### Modelo Estatístico Para Tratar Fratura

J. RICARDO DE SOUSA

UA

F. A. OLIVEIRA

CIFMC-UnB

Um sólido sob tensão é interpretado como um sistema num estado de equilíbrio meta-estável, em analogia ao caso mais familiar de vapor supersaturado. Simulação numérica numa cadeia polimérica mostra que este fenômeno de meta-estabilidade se reflete na grande

extensão de uma ligação, antes que uma ruptura ocorra. Resultados analíticos tem mostrado que a simulação está dentro dos limites mínimos e máximos de uma teoria de estabilidade a temperatura nula ( $T = 0$ ). Modelos de transição de fase em sistemas aleatórios apresenta um comportamento ao redor da quebra caracterizado por um conjunto de expoentes críticos. Numa escala de tempo característico, suficientemente longo para que o sistema possa atingir o equilíbrio meta-estável e, suficientemente curto para que o sólido não sofra uma transição de fase, o uso da mecânica estatística de equilíbrio é válida. Neste trabalho um modelo estatístico é proposto para tratar fratura numa rede unidimensional de um cristal ideal livres de defeitos. Desprezaremos as propriedades de fadiga e plasticidade, tornando assim o processo reversível para a curva *stress-strain* conseqüentemente, a mecânica estatística de equilíbrio será apropriada. O modelo consiste de uma rede cristalina 1d, com os íons interagindo do tipo Ising com os seus primeiros vizinhos. Existem  $N - 1$  ligações intactas com energia harmônica  $J_1 = k\epsilon^2/2$  ( $k$  é a constante elástica) e apenas uma ligação será quebrada com energia  $J_2 = D - J_1$  ( $D$  é a energia de dissociação). Através deste modelo obtemos pela primeira vez um relação exata para o comportamento entre o *strain* ( $\sigma$ ) e *stress* ( $\epsilon$ ) como função da temperatura ( $T$ ) e do número de íons da rede ( $N$ ). O valor crítico  $\epsilon_c$  onde ocorre a quebra ( $\sigma = 0$ ) e também ocorre o máximo *strain* ( $\sigma_m$ ) é proporcional  $N^{-1/2}$ . Esta relação está de acordo com o obtido por simulação a  $T = 0$  numa rede triangular, ou seja,  $\sigma_m \approx N^{-\varphi}$  (onde  $\varphi$  é um expoente que depende da estrutura da rede em estudo, por exemplo  $\varphi(1d) = 1/2$ ,  $\varphi(2d, \text{triangular}) = 0.73$ ).

### FINITE-SIZE SCALING EM ESTRUTURAS MAGNÉTICAS COM RUGOSIDADE

FÁBIO D. A. AARÃO REIS  
*Universidade Federal Fluminense*

Algumas questões importantes no estudo de sistemas magnéticos com um número pequeno de partículas são a dependência de grandezas físicas com o tamanho finito da estrutura e sua dependência com a rugosidade de sua superfície. Tais questões são consideradas neste estudo do modelo de Ising ferromagnético em tiras muito longas com larguras aleatórias. A distribuição de larguras usada é gaussiana com média  $L$  e dispersão  $\Delta L$ , que pode ser constante para qualquer  $L$  (tipo I) ou proporcional a  $L$  (tipo II). Usando técnicas de matrizes de transferência, calculamos a susceptibilidade a campo nulo de tiras com  $4 \leq L \leq 12$ , obtendo estimativas da razão de expoentes  $(\gamma/\nu)_L$  e da temperatura pseudocrítica  $T^*(L, L - 1)$ . Em tiras do tipo I, estas estimativas obedecem relações de finite-size scaling, com correções que aumentam com  $\Delta L$ , e em tiras do tipo II estas relações são satisfeitas apenas em larguras  $L$  muito grandes. Concluimos que relações de finite-size

scaling em sistemas de baixa dimensionalidade com rugosidade são obedecidas em comprimentos tipicamente superiores aos dos sistemas uniformes correspondentes, e somente se o padrão da rugosidade for rigorosamente controlado para todas as larguras médias. Filmes bidimensionais com espessura variável e os mesmos padrões de rugosidade estão sendo estudados usando simulações de Monte Carlo. Os resultados vão permitir uma comparação direta com resultados experimentais para filmes finos magnéticos com espessura não uniforme.

### COMPORTAMENTO CRÍTICO DO NÚMERO DE SAWs EM REDES FRACTAIS FINITAMENTE RAMIFICADAS

FABIO AUGUSTO CHALUB, ROSANE RIERA FREIRE  
*Departamento de Física - PUC-Rio*

Estudam-se caminhos aleatórios sem auto-interseção (SAWs) em uma família de fractais chamados de Sierpinski Gaskets generalizados. Cada rede dessa família é parametrizada por inteiro  $b$ , tal que a dimensão fractal  $D_F$  tende ao valor Euclideano 2 quando  $b \rightarrow \infty$ . Monta-se uma equação recursiva relacionando o número de inserções de SAWs de  $n$  passos em uma escala  $s$  de construção do fractal com a escala anterior, até uma escala mínima, onde a contagem é feita explicitamente. A análise do comportamento de  $c_n(b)$  com  $n$  permite fazer estimativas numéricas da fugacidade crítica  $\mu_b$  e do expoente crítico  $\gamma_b$  associado ao número total de SAWs distintos que se pode inserir em cada rede. Os valores de  $\mu_b$  convergem para seu valor na rede triangular quando  $b \rightarrow \infty$  e fornecem uma expressão assintótica em  $b$ . As estimativas de  $\gamma_b$  englobam os valores exatos existentes na literatura para  $b < 9$  mas não concordam com as estimativas provenientes de simulações de Monte Carlo para parâmetros  $b$  maiores. Os valores de  $\gamma_b$  encontrados para  $b > 20$  são sempre menores que o valor Euclideano  $\gamma = \frac{43}{32}$ , mas ainda não permitem uma previsão numérica do comportamento assintótico com  $b$  pois não apresentam comportamento monotônico. São dados argumentos analíticos para o comportamento assintótico de  $\gamma_b$  que mostram que  $\gamma_b \rightarrow \gamma$  quando  $b \rightarrow \infty$ .

### VECTOR LATTICE MODEL OF AMPHIPHILIC MIXTURES: PARTIAL INTEGRATION AND LOCAL MEAN FIELD APPROACH

C. BUZANO, A. PELIZZOLA  
*Politecnico di Torino, Torino, Italia*  
L. R. EVANGELISTA  
*UEM*

The liquid mixtures of water, oil and amphiphiles (surfactants) are complex fluids exhibiting several phases like water/oil-rich phases, liquid-crystalline phases, and a disordered phase in which a microemulsion region can

be identified. Their practical interest lies on the characteristic feature of the amphiphiles, that is the presence in the same molecule of a polar head attracting water and a non-polar tail attracting oil. When amphiphilic molecules are added to a mixture of oil and water, they tend to form layers at the interface to oil and water, thereby reducing the interfacial tension. From the theoretical point of view, it is the richness of their phase diagram which makes them very interesting. In this work we consider a vector model on the simple cubic lattice, proposed to describe this mixture [A. Ciach, J. Hoye, and G. Stell, *J. Phys. A* **21**, L777 (1988)]. The model can be conveniently described as a spin-1 model with an additional vector degree of freedom per site. Since in this model the surfactant orientational degrees of freedom do not interact with each other, an exact partial integration can be carried out. This leads to an effective hamiltonian for the system. The resulting model is a three-state (spin-1) system and contains two-, three-, five- and seven body interactions with temperature dependent interaction strengths [C. Buzano, L. R. Evangelista, and A. Pelizzola, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **290**, 41 (1996)]. The ground state of the system is analyzed in the case of a balanced (equal water and oil concentration) and non-balanced system. This analysis reveals the presence of a bicontinuous phase and of an inverse micellar phase in addition to pure water/oil and pure surfactant states. The temperature phase diagram of the system is analyzed in a local mean field approach.

### NÃO UNIVERSALIDADE E DINÂMICA CRÍTICA

CLÁUDIA S. SIMÕES, J. R. DRUGOWICH DE FELÍCIO  
*Departamento de Física e Matemática Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto Universidade de São Paulo*

Trabalhos recentes [1] têm procurado medir o expoente dinâmico  $z$  a partir dos primeiros passos de simulações tipo Monte Carlo (muito longe do equilíbrio) realizadas na temperatura crítica. Nesse caso, a média é feita sobre um grande conjunto de amostras e não sobre os estados de Gibbs como é o usual. Em seguida, o valor de  $z$  é ajustado para que o scaling do tempo ( $t' = t/b^z$ ) conduza a curvas universais para o cumulante de Binder ou de alguma outra quantidade que exiba dimensão de escala igual a zero - como é o caso da quantidade térmica de P. M. C. de Oliveira [2]-. Essa investigação numérica foi precedida por uma abordagem analítica [3] que apontou para a existência de um novo expoente crítico ( $\theta$ ) que caracteriza o crescimento anômalo da magnetização inicial, logo depois do sistema ter sido resfriado bruscamente (quenched) até sua temperatura crítica. Esse novo expoente também pode ser medido através da função de auto-correlação mas o erro nas estimativas do expoente dinâmico costumam inviabili-

zar essa alternativa. Há porém, outras aplicações do método que não padecem dessas dificuldades. Nesse trabalho, nós apresentamos um "spin-off" dessa técnica que consiste em detectar o fenômeno da não universalidade (dependência dos expoentes críticos com as constantes de acoplamento) já nos primeiros passos da simulação. Para isso, medimos a evolução do quadrado da magnetização, que está diretamente ligada à razão  $(\beta/\nu)$ , onde  $\beta$  é o expoente da magnetização e  $\nu$  o expoente do comprimento de correlação da transição no equilíbrio. Como apenas um desses expoentes exibe não universalidade (ou o  $\beta$  ou o  $\nu$ ) nós estamos livres de um eventual super-scaling que possa mascarar a dependência procurada. A técnica foi empregada no modelo de Ising com uma linha de defeitos (que tem o  $\nu$  constante e  $\beta$  variando com a razão  $J'/J$ ) bem como ao modelo de 8-vértices (que tem  $\beta$  sempre igual a  $1/8$  e  $\nu$  variando com a constante de acoplamento de quatro spins).

- [1]Z. B. Li, L. Schulke and B. Zheng, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3396 (1995)
- [2]P. M. C. de Oliveira, *Europhys. Lett.* **20**, 621 (1992)
- [3]K. H. Janssen, B. Schaub and B. Schmittmann, *Z. Phys.* **B73**, 539 (1989)

### ESTRUTURA DO ESQUELETO E ESQUELETO ELÁSTICO DE AGLOMERADOS DA PERCOLAÇÃO POR INVASÃO MÚLTIPLA

ROBERTO N. ONODY, REGINALDO A. ZARA  
*Instituto de Física de São Carlos - USP - Departamento de Física e Informática*

Recentemente propusemos dois modelos de percolação por invasão múltipla baseados no fluxo de fluido através da superfície do aglomerado (modelo perimétrico) e na lei de escala entre a massa e raio de giração do aglomerado (modelo otimizado). Para estes modelos fizemos um estudo detalhado no número de coordenação, tipos de vértices, perfis de aceitação e dimensões fractais. Agora, utilizando o método das queimadas, estudamos as estruturas do esqueleto ("backbone") e esqueleto elástico ("elastic backbone") para o modelo perimétrico. Determinamos os expoentes de escala para a massa, número de pontos de estrangulamento ("red points") e número de ciclos ("loops") para cada uma destas estruturas. Investigamos também o comportamento do expoente do caminho mínimo (ou distância química) entre dois pontos sobre a estrutura fractal. A interpolação contínua da dimensão fractal no intervalo  $[\frac{91}{48}, 2]$  nos forneceu argumentos simples para rejeitar a relação de escala entre estes expoentes proposta por Herrmann e Stanley. No momento estamos utilizando o método das queimadas para investigar o esqueleto e o esqueleto elástico do modelo otimizado no qual, por construção, a massa do aglomerado escala exatamente e não apenas assintoticamente) com o raio de giração.

## STOCHASTIC RESONANCE OF INTERACTING PARTICLES ON A SQUARE LATTICE

MUNIR MACHADO DE SOUSA SABAG, MÁRIO JOSÉ DE OLIVEIRA  
USP

In this work, we present an analysis of *stochastic resonance* in a system of interacting particles by means of numerical simulations. Stochastic resonance is a phenomenon of amplification of a weak periodic signal as an effect of noise in a non-linear system. Firstly, we simulate the movement of a brownian particle under the action of a double-well potential and subject to a time-oscillating field. In the simulations, the noise is a zero-mean and delta-correlated random variable, which represents the shocks that brownian particles go through. Later on, we simulate a two-dimensional model of interacting particles in which each particle is subject both to a double-well potential and to a field that oscillates in time. In the absence of the field, this system can be described by the  $\phi^4$  model, a continuous model that has an analogy with spin models with up-down symmetry. All the simulations of the evolution of the system are done using the stochastic method of Langevin equations. In the absence of the time-oscillating field, one observes a phase transition and the critical temperature of can be estimated. The critical exponents are evaluated through finite-size scaling, showing that the model is in the same class of universality as the Ising model. Besides the simulations, we also analyze the model within a mean-field approximation, obtaining a phase diagram. For low field amplitudes and increasing the noise, one observes a phase transition between a regime in which the particles are bound into one well and another in which the particles oscillate between the wells with the frequency of the oscillating field (stochastic resonance).

### Algoritmo de Wolff para o modelo SBC

PAULO ROBERTO DE ARAÚJO CAMPOS, ROBERTO NICOLAU ONODY  
Instituto de Física de São Carlos-USP

Nossa principal motivação para este trabalho foi o interessante e inesperado comportamento apresentado pelos algoritmos de aglomerados quando aplicados ao modelo de Ising com diluição em 3D. Hennecke et al verificaram uma diminuição no tempo de autocorrelação  $\tau$  quando se reduz a concentração de sítios magnéticos no sistema. Este comportamento é oposto àquele verificado nos algoritmos locais (de apenas um único spin-flip), onde se espera um aumento em  $\tau$ . Esses algoritmos de aglomerados têm como grande vantagem a redução no tempo de autocorrelação. Há aparentemente, uma quebra da universalidade dinâmica. Neste trabalho generalizamos o mapeamento de Fortuin-Kasteleyn e a dinâmica de aglomerados para o modelo de Ising com correlação de sítios e ligações ( mo-

delo SBC ). Neste modelo, a constante de interação entre dois átomos magnéticos vizinhos é também dependente da ocupação magnética dos vizinhos mais próximos ao par de átomos, ao longo da linha que os conecta. Os pontos críticos para vários valores da concentração e da correlação são calculados por meio da dinâmica de Wolff, a qual se mostrou bastante eficiente, proporcionando inclusive uma redução considerável no tempo de CPU. Verificamos uma redução da temperatura crítica com o aumento tanto da diluição quanto da correlação. A determinação dessas temperaturas críticas é necessária para análise do comportamento dinâmico do sistema na região de criticalidade, onde o tempo de autocorrelação obedece uma relação de escala do tipo  $\tau \sim L^z$ .

### Condições para a existência de estatísticas generalizadas

EVALDO MENDONÇA FLEURY CURADO  
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas ( CBPF )

Nas estatísticas de Shannon e Tsallis (1) é possível se obter, explicitamente, as distribuições de probabilidade de equilíbrio do sistema. Além disso, todo o formalismo das transformações de Legendre entre os potenciais termodinâmicos permanece válido. São estas propriedades específicas destas estatísticas ou de uma grande classe de formas funcionais de entropia passíveis de serem propostas? Plastino e Plastino (2) mostraram que as transformações de Legendre têm uma generalidade muito maior do que se pensava, sendo na verdade, com algumas restrições, uma consequência do princípio da maximização da entropia. Mas, para a grande maioria das entropias generalizadas propostas, não é possível se obter, explicitamente, as distribuições de probabilidade dos estados do sistema. Neste trabalho fazemos uma classificação das propriedades das possíveis formas funcionais que forneceriam estas distribuições explicitamente. Identificamos as situações (funções) que forneceriam estas distribuições e mostramos que as estatísticas de Shannon e Tsallis estão contidas neste quadro geral não sendo portanto as únicas possíveis, existindo na verdade uma grande quantidade de entropias generalizadas que fornecem distribuições de probabilidade explícitas e satisfazem as transformações de Legendre. Uma forma funcional diferente das anteriores é proposta como exemplo. Nesta forma funcional de uma entropia alternativa a distribuição de probabilidades é logarítmica, apresentando um comportamento diferente das leis exponencial, para a distribuição de Boltzmann-Gibbs, e lei de potência, para a estatística de Tsallis.

- (1) C. Tsallis, J. Stat. Phys. 52, (1988) 479; E.M.F. Curado e C. Tsallis, J. Phys. A 24 (1991) L69;  
(2) A. Plastino e A. R. Plastino, Phys. Lett. A 226 (1997) 257.

## PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DO SÓDIO SÓLIDO EM BASE DO POTENCIAL INTERIÔNICO DE SCHIFF

ÁLVARO DE ALMEIDA CAPARICA, VIATCHESLAV  
IVANOVITCH ZUBOV

*Instituto de Física, Universidade Federal de Goiás,  
Goiânia, GO, Brasil*

Em um trabalho anterior<sup>1</sup> aplicamos o método correlativo do campo auto-consistente não simetrizado ao sódio sólido a pressão normal. Para tanto, utilizamos o potencial interiônico de Schiff para a par, que foi inicialmente proposto para a fase líquida e depois, em base do método da dinâmica molecular, foi estendido também a cristais. Voltamos agora nossa atenção para a variação das propriedades termodinâmicas com a pressão. Levamos em consideração a forte anarmonicidade das oscilações dos íons nos cristais. Resolvemos a equação de estado do sódio sólido para diferentes valores da pressão em função da temperatura. Cada isóbara possui dois ramos  $A_1(T) < A_2(T)$  até determinada temperatura  $T_i(P)$ , na qual eles se encontram:  $A_1(T) = A_2(T)$ . Para temperaturas superiores não há soluções reais para a equação de estado. O ramo superior corresponde a estados termodinâmicos instáveis, uma vez que  $B_T(T, A_2) < 0$ . Ao longo do ramo inferior calculamos todo um conjunto de propriedades termodinâmicas: módulos de elasticidade isotérmicos e adiabáticos, coeficientes de expansão térmica, capacidades térmicas isocórica e isobárica e o parâmetro de Grüneisen. Analisamos detalhadamente a sua dependência da temperatura e da pressão, comparando nossos resultados com os dados experimentais disponíveis. Encontramos uma boa concordância. Estudamos a estabilidade termodinâmica da rede cúbica de corpo centrado do sódio em base do comportamento dos coeficientes de estabilidade:  $B_T, C_{11}^T, C_{44}, C_{11} - C_{12}, T/C_V$ . Discutimos a relação entre a temperatura de perda da estabilidade  $T_S$  e a temperatura limite de existência de soluções reais da equação de estado.

1. V.I.Zubov, J.F.Sanchez, N.P.Tretiakov and Caparica, Phys.stat.sol. (b)200, N1 (1997).

## O MODELO DE BERNAL-COLLINS PARA A ÁGUA

NARA CRISTINA GUISONI, VERA BOHOMOLETZ  
HENRIQUES  
IFUSP

A água apresenta propriedades bastante especiais, tais como o aumento da densidade na transição líquido-gelo e uma alta temperatura de fusão em relação a moléculas semelhantes (NH<sub>3</sub> e HF). Podemos compreendê-las ao saber que a água líquida possui alta porcentagem de estrutura (pontes de hidrogênio) e aumento do número de coordenação em relação à fase sólida, o que tem sido mostrado por estudos experimentais, como difração de neutrons e raios-x. Há na literatura vários modelos

com detalhe atômico para a água na fase líquida, com os quais se pode efetuar cálculos analíticos das funções de estrutura e termodinâmicas, em vários esquemas aproximativos. Alternativamente, simulações têm sido muito utilizadas. Neste trabalho adotamos outra abordagem possível, que é a de procurar modelos simplificados que possam apresentar as características principais do sistema de interesse. Nosso estudo parte de um modelo geométrico para líquidos proposto por Bernal em 1959: considerar as moléculas nos vértices de polígonos, cujo número de lados está relacionado com o número de vizinhos mais próximos. Uma escolha apropriada dos poliedros e sua distribuição irregular permitem que o modelo não apresente ordem de longo alcance, característica essencial dos líquidos. Uma aproximação quantitativa foi feita por Collins em 1964, ao utilizar o modelo de Bernal para descrever líquidos bidimensionais. Os poliedros utilizados são apenas quadrados e triângulos, sendo possíveis números de coordenação iguais a 4, 5 e 6. Fazendo uso da aproximação de campo médio, são construídas funções termodinâmicas, e para determinadas escolhas da energia de ligação entre os átomos são observadas transições de fase. Nosso modelo é uma adaptação para a água do modelo de Bernal utilizado por Collins. A principal diferença está na escolha da energia de ligação entre as moléculas, que é feita tendo em vista propriedades da água conhecidas experimentalmente, como número de coordenação na fase líquida e sólida, a possibilidade da realização das pontes de hidrogênio e sua importância na interação entre as moléculas. Analisamos as condições necessárias para o modelo apresentar transição de fase.

## MATEMÁTICA DO DETERMINISMO-INDETERMINISMO NO MOVIMENTO BROWNIANO

NARA CRISTINA GUISONI, AMÉLIA IMPÉRIO  
HAMBURGER  
IFUSP

A equação de Langevin foi originalmente escrita, em 1908, para descrever o movimento de partículas brownianas. Na direção  $x$ , temos:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -6\pi\eta a \frac{dx}{dt} + X(t)$$

sendo  $m$  a massa da partícula,  $\eta$  a viscosidade do meio e  $a$  o raio das partículas. A força de Stokes e  $X(t)$  refletem os choques das moléculas do meio com as partículas num dado instante de tempo. A variação da quantidade de movimento resulta do equilíbrio dinâmico entre a força viscosa, que o dissipa, e uma força complementar que o restaura. A força de atenuação tem sua expressão deduzida da experiência, mas a força que reconduz o movimento foi inventada por Langevin, na melhor tradição newtoniana: partindo das características

fenomenológicas do movimento conceituam-se as forças que são responsáveis pela sua realização. Essa é uma equação diferencial, que pela sua própria natureza matemática é determinística. Entretanto há uma indeterminação intrínseca nas correlações entre os instantes de tempo considerados, devido ao acaso do choque das moléculas do meio. A força  $X(t)$  introduzida por Langevin contém o sentido da aleatoriedade, já que atua a cada instante e depende desse instante, sendo indiferentemente positiva e negativa. Assim, a variação da posição das partículas brownianas num certo intervalo de tempo é definida estatisticamente. Langevin deduz a relação entre o deslocamento quadrático médio das partículas  $\langle \Delta x^2 \rangle$  e o número de Avogadro  $N$ , que é o número de moléculas por unidade de volume, constante em consequência do movimento incessante:

$$\langle \Delta x^2 \rangle = \frac{RT}{N} \frac{1}{3\pi\eta a} \tau$$

sendo  $R$  a constante universal dos gases e  $\tau$  o intervalo de tempo entre as medidas sucessivas de posição. O tema deste ensaio nos remete, ao mesmo tempo, ao atomismo de Epicuro e Lucrecio e às atuais questões de sistemas auto-organizados quando tratam das relações entre determinismo e indeterminismo.

### CADEIA DE SPINS $S > 1/2$ NA PRESENÇA DE CAMPO CRISTALINO $D$ E DE CAMPO MAGNÉTICO $H$

FRANCISCO FERREIRA BARBOSA FILHO  
*Departamento de Física - UFPI*

Estudamos o modelo ANNNI (Axial Next-Nearest Neighbour Ising) numa cadeia de spins  $S > 1/2$  na presença de campos cristalino  $D$  e magnético  $H$ . Este

modelo consiste de interações ferromagnéticas entre primeiros vizinhos ( $J_1 > 0$ ) e antiferromagnéticas entre segundos vizinhos ( $J_2 < 0$ ), com hamiltoniano da forma  $H = \sum_i (-J_1 S_i S_{i+1} - J_2 S_i S_{i+2} + DS_i^2 - HS_i)$ . O grau de competição entre as interações de primeiros e de segundos vizinhos é medido pelo parâmetro  $p = -J_2/J_1$ . Esta competição resulta na formação de ordenamentos modulados dos spins. Neste trabalho examinamos o comportamento das estruturas e contornos das fases moduladas para os diagramas  $p - D$  a  $H$  constante.

Usando a técnica de potenciais efetivos (R. B. Griffiths e W. Chou, 1986, Phys. Rev. Lett. **56**, 1929) construímos diagramas de fases no espaço de parâmetros  $p - D$  para  $S = 1, 3/2, 2, 5/2, 3$  e  $7/2$ . Para cada valor de  $S$  levantamos diagramas  $p - D$  para valores constantes de  $H$ . Comparando os diagramas de fases na presença de campo com aqueles a campo nulo (F. F. Barbosa Filho e C. S. O. Yokoi, 1994, XVII ENFMC e F. F. Barbosa Filho, 1996, Tese de doutorado, Instituto de Física - USP) verificamos o aparecimento de novas estruturas de fases, bem como modificações nos perfis de magnetização de algumas das fases presentes nos diagramas a campo nulo. A topologia das fases nos diagramas para valores baixos do campo não difere muito daquela para os diagramas a campo nulo, mas difere muito nos diagramas para campos altos. O aparecimento das fases nos diagramas, conforme variamos  $S$ , como no caso dos diagramas a campo nulo, parece obedecer ao processo de ramificação por combinação de estruturas (W. Selke e P. M. Duxbury, 1984, Z. Phys **B 57**, 49). O grau de complexidade nos diagramas aumenta com o crescimento do campo  $H$ .

## FÍSICA ESTATÍSTICA (Simulações e Sistemas Quânticos)

### FÍSICA ESTATÍSTICA (Simulações e Sistemas Quânticos / Redes Neurais) – 12/06/97

#### THE PROPERTIES OF POLARON ON THE LIQUID HELIUM SURFACE IN THE PRESENCE OF A NON-SYMMETRIC POTENTIAL CONFINEMENT

SVIATOSLAV S. SOKOLOV, NELSON STUDART  
*Universidade Federal de São Carlos*

The interaction between electrons and surface modes of the liquid helium leads to the formation of a polaron state in which the electron is trapped by a potential dimple on the surface. In this work, the properties of the polaron states are investigated theoretically for the case of non-symmetric potential confinement. This situation can be found for electrons localized on quasi-one-dimensional channel over the helium surface. General expressions are obtained for the calculation of both the energies and the characteristic localization lengths of the electron states in the dimple on the helium surface. The total energies of the ground and excited polaron are calculated using a hydrodynamical approach in which the Schrödinger equation for the electron and the equation for the mechanical equilibrium of surface are solved in the harmonic approximation for the dimple potential and also by a variational approach. We also discuss the conversion of the results obtained to those in the case of a symmetric potential confinement. Our results for the energy gap between the ground and excited polaron states and the parameters of the dimple on liquid helium surface are in a reasonable agreement with the values obtained recently by Farias and Peeters, who considered a potential due to charged impurities inside the liquid helium, and used another variational approach for the circularly-symmetric system.

#### CASIMIR EFFECT IN CONDENSED MATTER PHYSICS

VLADIMIR MOSTEPANENKO\*  
*UFPB*

Casimir effect in condensed matter physics appears as some force acting between closely located macroscopic material boundaries. It is well known that attractive molecular forces between macroscopic bodies can be computed in terms of properties of the fluctuating electromagnetic field in a volume that includes the region between the bodies and the bodies themselves. If the size of the region between the bodies is sufficiently large so that the delays in the electromagnetic interaction be-

come significant, then the Casimir force plays the role of the van der Waals force acting between them and caused by zero-point oscillations of the vacuum electromagnetic field.

In the talk which is overview of the problem and based on the monograph [1] the modern calculational methods of the Casimir forces are presented with the applications to different complicated configurations, such as the boundaries made of real materials (metals with finite conductivity, dielectrics, superconductors), boundaries covered by distortions of different types and non-symmetric configurations giving rise to vacuum torques. The temperature corrections to the Casimir forces are discussed. The concept of effective temperature in the presence of material boundaries is analysed with application to different situations. In the end of the talk the recent Casimir force measurement [2] is reviewed and some problems for the future investigation are touched.

#### References

1. V.M. Mostepanenko and N.N. Trunov. *The Casimir Effect and its*

*Applications*. Clarendon Press, Oxford, 1997.

2. S.K. Lamoreaux. *Phys. Rev. Lett.* **78**, 5, 1997.

\*On leave from A. Friedmann Laboratory for Theoretical Physics, St.Petersburg, Russia

#### Ordem de Longo Alcance em Sistemas Unidimensionais de Bosons no Estado Fundamental

DORA IZZO, GILSON CARNEIRO  
*Instituto de Física-UFRJ*

Em um sistema clássico de partículas em duas dimensões espaciais (2D), com interações que decaem suficientemente rápido com a distância, existe, a temperaturas baixas, apenas quase-ordem de longo alcance, caracterizada pelo decaimento algébrico da função de correlação do parâmetro de ordem cristalino,  $C_{\vec{k}}(\vec{r})$ , com um expoente que depende da temperatura. Esse comportamento leva a uma função de estrutura,  $S(\vec{k})$ , com singularidades algébricas em alguns vetores da rede recíproca. Essa fase é destruída em uma transição de fase resultante do desligamento de excitações topológicas. Quase-ordem de longo alcance pode ser corretamente prevista por uma teoria que leva em conta apenas flutuações de fonons na aproximação harmônica. No estado fundamental de sistemas unidimensionais (1D) de bosons, com interações que decaem suficientemente rápido com a distância, flutuações de ponto-zero de fonons, na aproximação harmônica, prevêem quase-ordem de longo alcance, semelhante à que ocorre em 2D. Resta saber a região de validade dessa aproximação e o comportamento do sistema fora dela.

Investigamos essas questões para bosons 1D interagindo através de um potencial  $\gamma/r^2$  ( $r$  = distância entre bosons). A função de onda exata do estado fundamental desse sistema é conhecida (B. Sutherland, Phys Rev A 4, 2019, (1971)) e depende apenas do parâmetro  $g$ , igual a razão entre as energias potencial e cinética. Partindo desse resultado, calculamos numericamente  $C_k(r)$  em função de  $g$ , utilizando técnicas de simulação Monte Carlo. Desenvolvemos detalhadamente a aproximação harmônica para esse sistema. Mostramos que essa é exata na região semi-clássica ( $g \gg 1$ ) e que para todo  $g$  essa função de correlação decai algebricamente com um expoente,  $\eta(g)$ , que cresce quando  $g$  diminui. Portanto, não há transição de fase. Concluímos que para  $g$  suficientemente grande  $S(k)$  tem singularidades algébricas para alguns vetores da rede recíproca. No entanto, enquanto que no sistema 2D essas singularidades desaparecem abruptamente na transição de fase, nos bosons 1D elas desaparecem continuamente com o aumento de  $g$ , porque  $\eta(g)$  fica suficientemente grande.

### Adaptação Ótima em Redes Neurais Multi-Estados

RUBEM ERICHSEN JUNIOR, WALTER KARL THEUMANN  
IF - UFRGS

Bacias de atração de estados de recuperação de memória em redes neurais maximamente estáveis são acentuadamente reduzidas quando o sistema opera próximo da sua capacidade crítica de armazenamento. O desempenho em termos de recuperação também decai em função da temperatura, que neste contexto mede o nível de ruído sináptico.

Uma rede neural aprende através da modificação de suas conexões sinápticas. Ao longo da etapa de *aprendizado*, os padrões de memória são apresentados à rede de uma forma sequencial. A rede evolui dinamicamente no espaço das sinapses, de acordo com um determinado *algoritmo de aprendizado*, até atingir o equilíbrio. Diferentemente, durante um processo de *treinamento com ruído*, o equilíbrio é atingido não pelo aprendizado dos padrões, mas de versões ruidosas destes. O resultado deste processo é um aumento na dimensão das bacias de atração, com o conseqüente implemento das propriedades de recuperação. O sucesso do treinamento depende, entretanto, do nível de ruído adicionado aos padrões. Este ruído, que é definido por determinados *parâmetros de treinamento*, deve ser função da temperatura.

Neste trabalho estudamos a adaptação ótima ao ruído em sistemas de neurônios que assumem estados descritos por variáveis Q-Ising. Utilizando métodos de mecânica estatística no espaço das interações sinápticas, deduzimos equações de recorrência que permitem determinar, em função da temperatura, os parâmetros de treinamento que conferem proprieda-

des de recuperação ótimas ao sistema. Os resultados revelam que redes neurais multi-estados otimamente adaptadas apresentam maior capacidade crítica de armazenamento e melhor qualidade de recuperação em relação à redes maximamente estáveis, principalmente no regime de altas temperaturas.

### GENERALIZAÇÃO E CAOS NUMA REDE NEURAL EM CAMADAS

DAVID R. C. DOMINGUEZ  
Univ. Católica de Leuven, Bélgica  
WALTER KARL THEUMANN  
UFRGS

Estuda-se a habilidade de generalização de uma rede neural atratora em camadas com neurônios de multiestados ou analógicos que utilizam relações de entrada/saída monótonas ou não-monótonas [1]. A rede é treinada com exemplos de multiestados (mais de dois) de baixa atividade, mediante uma regra generalizada de Hebb, e procura-se determinar a capacidade de reconhecimento de conceitos binários que não foram apresentados à rede na fase de treinamento. O problema pode ser resolvido exatamente, em forma não trivial, na rede em camadas com sinapsis unidirecionais sem realimentação, associando as camadas a intervalos discretos de tempo. A fase de generalização é caracterizada pela presença de overlaps simétricos entre os estados da rede e os exemplos apresentados. Os resultados são obtidos em termos do overlap  $M$ , entre os estados da rede e os conceitos, e a atividade dinâmica  $Q$ . Além de uma fase paramagnética, em que  $M = 0$  e  $Q = 0$ , acha-se uma fase de generalização em que  $M > 0$  e  $Q > 0$  e outra fase autosustentada com  $M = 0$  e  $Q > 0$ . Encontra-se um comportamento complexo que inclui pontos fixos atratores, uma cascata de bifurcações e caos, dependendo de um limiar ou de um cut-off, segundo a função de transferência utilizada. O comportamento caótico, irregular, aparece com  $M > 0$  e  $Q > 0$ . Apresentam-se curvas de generalização onde essa fase existe, assim como as regiões onde aparecem as bifurcações e o caos. Apresentam-se, também, diagramas de fase para a capacidade de geração de conceitos, onde aparecem as diversas fases de interesse para neurônios não-monótonos. A interpretação do primeiro dobramento de período é que a rede está num modo de espera em que os estados coletivos não reconhecem os conceitos.

[1] David D. R. C. Dominguez and W. K. Theumann, J. Phys. A. 30 (in press).

### APRENDIZADO SUPERVISIONADO COM INTERMEDIÁRIOS

MARCO A. P. IDIART  
Instituto de Física - UFRGS

Nós estudamos o caso em que o aprendizado de uma regra, representada pelo vetor sináptico  $B$ , por um per-

ceptron booleano é intermediado por um perceptron professor. O perceptron professor constrói seu vetor sináptico ( $T$ ) a partir de  $\alpha_p N$  exemplos, constituídos de questões  $\xi^\mu$  e respostas a estas questões  $\sigma_B(\xi^\mu)$ , vindos do perceptron regra, enquanto que o estudante usa  $\alpha_s N$  exemplos vindos do professor, onde  $N$  é o número de unidades de entrada de ambos os perceptrons. Tanto o professor como o aluno usam a regra de Hebb para ajustar seus vetores sinápticos. Demonstramos que a taxa de aprendizado do perceptron aluno, calculada a partir de seu erro de generalização com respeito à regra (B), é sempre diminuída pela presença do intermediário, se este é sua única fonte de exemplos. Dentro das limitações impostas pelo intermediário, mostramos que o aprendizado pode ser otimizado pela escolha apropriada de exemplos, sendo esta escolha dependente do grau de conhecimento  $\alpha_p$  do professor. Para  $\alpha_p \sim 3.4$  existe um crossover entre dois regimes de aprendizado. Para  $\alpha_p < 3.5$  é mais conveniente usar as mesmas questões empregadas no aprendizado do professor para ensinar o aluno, já para  $\alpha > 3.5$  novas questões resultam em melhor aprendizado. O professor que serve de intermediário é chamado professor educado. Demonstramos também que, no que se refere ao aprendizado dos pesos sinápticos do professor ( $T$ ), o aluno tem melhor performance se o professor é educado por uma regra realizável.

## FÍSICA ESTATÍSTICA (Simulações e Sistemas Quânticos)

– 12/06/97

### Estimativa Monte-Carlo de Integrais Multicentro de Coulomb e Exchange

MAURÍCIO FABBRI

*Universidade São Francisco*

O cálculo dos termos devido a interações elétron-elétron, se feito em uma base de orbitais atômicos, exige uma estimativa confiável de integrais de dois elétrons. Estas integrais envolvem divergências em um sub-domínio não-contável no  $\mathbb{R}^N$ , e não podem ser tratadas pelos métodos numéricos convencionais. O caso de sistemas bidimensionais, para o tratamento de poços quânticos e heteroestruturas, é particularmente desafiador, uma vez que não se tem disponível expansões e resultados semi-analíticos, já tabelados para muitos orbitais tridimensionais. Uma alternativa atraente, com a crescente disponibilidade de computadores e estações de trabalho de alto desempenho numérico, é a integração por Monte Carlo (MC). Mostramos aqui que a integração MC, por simples aceitação-rejeição, seguida da análise estatística padrão para medidas não-

correlacionadas, permite resultados numéricos 5% precisos com apenas alguns minutos de CPU, em um micro Pentium 100. Tratamos o caso de integrais de coulomb e exchange, a dois centros, sobre orbitais s, p e d. A solução tradicional por séries recorrentes (Kotami), é de implementação bastante laboriosa, e, na verdade, introduz erros numéricos, devido a regiões próximas aos planos de simetria, difíceis de serem contornados. A integração através da expansão por Gaussianas ou orbitais de Slater também deve ser implementada com critério, e envolve, frequentemente, tempos de CPU iguais ou superiores à técnica MC. A integração MC fica ainda mais atraente se combinada com o algoritmo de Metrópolis, porém não há ainda uma metodologia confiável para se tratar os dados correlacionados. Mostramos neste trabalho resultados para integrais em duas e três dimensões sobre orbitais excitados, e os comprimentos de correlação observados na cadeia de Metrópolis-Markov. A simples eliminação de dados fortemente correlacionados representa uma economia de pelo menos 10% de CPU sobre os já bastante aceitáveis minutos necessários para a técnica simples de aceitação-rejeição. Sugestões para critérios mais eficientes de estimativa dos desvios padrões da cadeia de Markov são também examinadas.

### CAPILLARY WAVES IN $^3\text{He}$ - $^4\text{He}$ SOLUTIONS AND RIPPLON-LIMITED MOBILITY OF SURFACE ELECTRONS OVER LIQUID HELIUM ISOTOPES MIXTURES

SVIATOSLAV S. SOKOLOV, GUO-QIANG HAI, JOSÉ

PEDRO RINO, NELSON STUDART

*Universidade Federal de São Carlos*

The dispersion equation is found and dispersion relation is calculated for the surface waves of a microstratified near pure  $^3\text{He}$  phase above a  $^3\text{He}$  -  $^4\text{He}$  solution substrate. Both the real and imaginary parts of the ripplon frequencies are evaluated by taking into account the essential process of viscous damping, for various values of the upper liquid phase thickness. The influence of the surface modes on the well-known system formed by surface electrons trapped at the surface of liquid helium is investigated. It is shown that low-damped capillary-like surface modes, found in the microstratified solution interacting with the surface electrons, define their dynamical properties at low temperatures. The Hamiltonian of electron-ripplon interaction is established for the microstratified solution of helium isotopes. The ripplon-limited mobility is calculated theoretically for electrons localized over the solution of liquid helium isotopes which surface contains thin though macroscopic layer enriched in light isotope  $^3\text{He}$ . The temperature dependence of a mobility at various thicknesses of a layer is calculated in the limit of small holding electric fields normal to helium surface. The mobility of surface electrons over bulk pure  $^3\text{He}$  is also considered and the

results of calculations agree excellently with experimental data, in spite of estimates available of strong ripplon attenuation in  $^3\text{He}$ , which makes evidence of the necessity of further theoretical and experimental studies of surface phenomena in liquid  $^3\text{He}$ .

### COMPUTER SIMULATION OF HYSTERESIS LOOPS BY DYNAMIC EVOLUTION OF THE DOMAIN WALL

P. M. C. DE OLIVEIRA

*Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense, av.  
Litorânea s/n, Niterói RJ, Brazil*

A. P. GUIMARÃES

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, R. Xavier Sigaud  
150, Rio de Janeiro - 22290-180, Brazil*

Under an applied external magnetic field  $H$ , a domain wall shows both a motion of translation and deformation, or bowing. The higher the domain wall energy per unit area, the more rigid or more resistant to bowing it will be. An interaction energy term describes the effect of the pinning centers. The dominance of either of these two energy terms leads, among other effects, to different dependences of the coercivity  $H_C$  on the defect density [1]. We have used a lattice drop Ising model [2] in order to simulate this effect on computers. The finite lattice starts with two domains (up and down spins) separated by a flat wall: this configuration represents a virgin grain with  $H = 0$ . Spins at the neighborhood of this wall are updated sequentially following the Metropolis algorithm with a fixed temperature and a small field  $H$ , considering 1st and 2nd neighbor magnetic interactions. If the spin currently under updating belongs to the grain boundary, its missing neighbors are considered to point parallel to it, in order to simulate the pinning effects at the real grain boundary. For small  $H$ , the domain wall behaves like a drum skin, bowing without translation. Beyond a certain value of  $H$ , the grain boundary pinning cannot avoid translation of the wall, and then  $M$  starts to increase much faster than before, reaching soon its saturation value. By varying  $H$  we can obtain the full hysteresis loop. This simple model allows us to study the dependence of the hysteresis loop with temperature and other parameters we can easily vary (e.g. pinning energy, field increment speed). 1. *Physica* 86-88B 1365 (1977) 2. *J. Stat. Phys.* 73, 789 (1993); *Int. J. Mod. Phys. C5*, 997 (1994); *Phys. Rev. E52(RC)*, 2168 (1995).

### EVOLUÇÃO TEMPORAL DE PROCESSOS MARKOVIANOS PELO MÉTODO MONTE CARLO DINÂMICO.

O. E. AIÉLLO

*Univ. de Franca*

M. A. A. DA SILVA, A. CALIRI

*F.C.F.R.P. - USP*

O Método Monte Carlo desenvolvido por Metropolis et al [J. Chem. Phys. 21, 1087 (1953)] é impróprio para simular processos fora do equilíbrio devido a dois fatores: 1) as probabilidades de transição utilizadas não produzem uma hierarquia dinâmica para os eventos; 2) não estabelece uma relação entre a sequência dos eventos gerados com o tempo real. Durante os últimos anos várias tentativas de simular processos dinâmicos tem sido feitas, algumas com relativo sucesso. Como por exemplo, as simulações feitas por Hood et al [Phys. Rev. Lett. 55, 2437 (1985)] para processos de des-sorção térmica, porém sem estabelecer uma relação formal entre passo Monte Carlo e tempo real. Somente em 1991 Fichthorn e Weinberg [J.Chem.Phys. 95, 1090 (1991)], conseguiram estabelecer uma relação formal entre passo Monte Carlo e tempo real para processos Poissonianos. Para abranger uma classe mais expressiva de fenômenos desenvolvemos o seguinte algoritmo baseado na equação Mestra: a) dividimos o sistema em uma rede de  $N$  sítios e escolhemos aleatoriamente um deles; b) o estado do sítio é modificado com probabilidade de transição  $P$  a qual depende da hierarquia dinâmica. c) a grandeza física é calculada de acordo com o modelo e o tempo obtido diretamente da equação Mestra para valores médios de quantidades extensivas. O procedimento foi testado para alguns modelos, fornecendo sempre excelentes resultados tanto fora como no equilíbrio. Primeiramente analisamos o processo de adsorção-des-sorção de Langmuir cuja solução exata é conhecida, depois examinamos o modelo de uma camada com Hamiltoniana do tipo SOS, usando a hierarquia de Kawasaki. Outro modelo estudado foi o SIR (Suscetíveis-Infetados-Removidos) generalizado para a simulação de epidemias. Para os casos onde não tínhamos resultados exatos (ou obtidos por outros métodos numéricos) da evolução temporal, desenvolvemos testes de autoconsistência a fim de checar as nossas simulações.

### SIMILARITIES BETWEEN LEAKY FAUCETS AND HEARTS.

ADRIANO ROBERTO DE LIMA, THADEU JOSINO P.

PENNA, PAULO MURILO C. DE OLIVEIRA

*Instituto de Física - Universidade Federal Fluminense*

JOSÉ C. SARTORELLI, WHILK M. GONÇALVES,

REINALDO D. PINTO

*Instituto de Física - Universidade de São Paulo*

It is known that Leaky Faucets presents very interesting and complex behaviour. Chaos, Intermittence, Hysteresis and Hopf Bifurcations are few examples of this complexity. Besides the experimental works it is possible to simulate leaky faucets using a Ising-like model (de Oliveira P. M. C. and Penna T. J. P., *J. Stat. Phys.* 73, 789, 1993). This model recently was modified and shows that is able to reproduce also the morphological aspect of the drops (de Lima A. R., Penna T. J. P.

and de Oliveira P. M. C., submitted to *Phys. Rev. E*, (1997)). In another paper *Phys. Rev. E*, **52**, R2168, (1995) was suggested the existence of long-range correlations in temporal series, of the intervals between successive drops, obtained by analysis of experimental series and series simulated by the two-dimensional model. This fact shows that correlations decay with power laws, suggesting which the leaky faucets work in a critical regime. These results pointed out similarities between leaky faucets and healthy hearts.

In this work we present more detailed results of this comparison using methods such 2D and 3D return maps, entropy, pattern entropy, autocorrelation functions and fluctuation functions. Some of these methods were recently applied to the analysis of data on the time intervals between heartbeats, from 24-h electrocardiograms, showing that these non-linear methods are very important to characterize some heartbeats regimes and identify possible diseases (Zebrowski J. J., Poplawska W. and Baranowski R., *Phys. Rev. E*, **50**, 4187 (1994)). We confirm the similarities between leaky faucets and hearts suggesting that both are critical systems.

#### BROAD HISTOGRAM METHOD APPLICATION TO THE ISING MODEL WITH NEXT-NEAREST-NEIGHBOUR INTERACTIONS.

ADRIANO ROBERTO DE LIMA, THADEU JOSINO P.  
PENNA, PAULO MURILO C. DE OLIVEIRA  
*Instituto de Física - Universidade Federal Fluminense*

In the conventional Monte Carlo simulations of thermodynamic models we need to perform a new computer run to obtain the accessible states to each temperature  $T$ , expending many time to have good curves of the thermodynamic properties as function of the temperature. Salzburg *et al* (*J. Chem. Phys.* **30**, 65 (1959)) invented and Ferrenberg and Swendsen (*Phys. Rev. Lett.* **61**, 2635 (1988)) improved the **Histogram Method** where, with a manipulation of the Partition Function, we can obtain more information without need to perform a new simulation. However we can do this only in a narrow region (which decrease as  $\sim L^{-\nu}$ , where  $L$  is the system size) of energy, where the histogram is obtained. Recently (de Oliveira P. M. C., Penna T. J. P. and Herrmann H. J., *Braz. J. Phys.* **26**, 677 (1996)) it was presented a new method where is possible to obtain information about the whole range of temperatures with only one run.

In this work we extend the method to the Ferromagnetic Ising Model with next-nearest-neighbour interactions. This is the first attempt to a multiparametric application of this method. We obtained general histograms, with only one simulation, and with them we can have the thermodynamic functions for any values of the coupling constants. In order to do it we mo-

dified the dynamics of the method to perform a non-biased random walk in the plane defined by the next and next-nearest-neighbour energies,  $E_1$  and  $E_2$ , respectively. Let us stress that to the definition of the dynamic we need to know only the number of satisfied bonds in each configuration and not the exact values of the local variation in the energy.

#### EFFECT OF A NONUNIFORM MAGNETIC FIELD ON A QUASI-ONE DIMENSIONAL ELECTRON GAS OVER LIQUID HELIUM

JOSÉ MARIA VILLAS BÔAS, SVIATOSLAV S.  
SOKOLOV, NELSON STUDART  
*Departamento de Física - UFSCar*

We have determined the single-particle structure of a quasi-one-dimensional electron gas confined in channels over the surface of liquid helium in the presence of a nonuniform magnetic field applied in the direction perpendicular to the surface ( $z$  axis). Energy spectrum and wave functions are evaluated for a magnetic field, whose strength varies both linearly,  $B = B_1 y$ , and parabolically,  $B = B_0 + B_2 y^2$ , where  $y$  is the transverse direction. We have employed the variational method, in which the minimization of the energy leads to polynomial equations, which are solved exactly. In the limit of vanishing  $B_1$  and  $B_2$ , we recover the electronic states of quasi-one dimensional electrons in the absence of the magnetic field and in the presence of a uniform field, respectively.<sup>1,2</sup> The Schrödinger equation was also solved by expanding the wave functions in terms of oscillator functions, evaluating the corresponding matrix elements of the effective potential and diagonalizing the resulting secular problem for each electron wave number  $k_x$ . Second-order perturbation theory was also used to estimate corrections to the  $n$ th energy level for small magnetic fields  $B_2$ . We presented our results for realistic values of the holding electric field in the  $z$  direction. (This work was supported by FAPESP.)

#### PROPRIEDADES ESTÁTICAS E DINÂMICAS DOS DIPLONS

PAULO SÉRGIO BRANÍCIO, JOSÉ PEDRO RINO  
*Univ. Federal de São Carlos, SP*

Os sistemas eletrônicos em filme de hélio líquido foram intensamente estudados nas últimas três décadas, tanto teórica como experimentalmente. Eles são formados basicamente a partir de duas forças. Uma delas atrativa surge das cargas imagens que se formam, tanto no filme de hélio quanto no substrato sólido, devido a presença dos elétrons superficiais. A outra repulsiva é devido a barreira de potencial na superfície do filme, graças ao princípio de exclusão de Pauli. Um outro sistema bidimensional bastante interessante surge do acoplamento de elétrons superficiais com íons positivos localizados no

filme de hélio os quais estão ligados ao substrato sólido por forças imagens. Os elétrons nesse sistema particular tem seu movimento acoplado aos íons formando uma quase-partícula chamada diplon. Utilizamos simulações numéricas, usando o método de Dinâmica Molecular aplicado ao ensemble microcanônico, para descrever a transição de fase que ocorre para esse sistema. Usamos densidades de  $10^8$  e  $10^{10} \text{cm}^{-2}$ , variando tanto a espessura do filme quanto a constante dielétrica do substrato. Obtivemos a dependência da energia total com a temperatura além de propriedades estáticas como o fator de estrutura, correlação de pares e distribuição de ângulos e propriedades dinâmicas como auto-correlação de velocidades, deslocamento quadrático médio e coeficiente de difusão. Com os resultados preliminares podemos afirmar que a estrutura hexagonal é a mais estável para o sistema e que a transição de fase é de primeira ordem. Para substrato metálico e filmes finos a transição ocorre para  $\Gamma \simeq 60$ , concordando com resultados conhecidos para sistemas dipolares. Este trabalho teve o suporte financeiro do CNPq e computacional da FAPESP

### PROPRIEDADES DO MODELO DE HUBBARD ESTENDIDO COM HOPPING CORRELACIONADO

DAISY MARIA LUZ, RAIMUNDO R. DOS SANTOS  
UFF

Nós estudamos o efeito do *hopping* correlacionado sobre as propriedades do modelo de Hubbard estendido. O sistema é descrito pelo Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = \sum_{i,\sigma} [-t + X(n_{i,-\sigma} + n_{i+1,-\sigma})](c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + H.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V \sum_i n_i n_{i+1}$$

onde  $c_{i\sigma}^\dagger$  ( $c_{i\sigma}$ ) cria (destrói) um elétron de *spin*  $\sigma$  no sítio  $i$ ,  $n_{i,\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$  e  $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$ .

Consideramos as correlações eletrônicas entre elétrons no mesmo sítio ( $U$ ) e entre sítios vizinhos ( $V$ ) como sendo atrativas ou repulsivas.

Os primeiros níveis de energia são calculados através do método de Lanczos em cadeias finitas. Obtemos o diagrama de fases deste sistema e as funções de correlação de carga, spin, o singleto e o tripleto supercondutores. As fronteiras de cada fase são obtidas através do gap,  $\Delta_N = |E_1 - E_0|$ , definido como a diferença entre a energia do estado fundamental e a do primeiro estado excitado<sup>1</sup>.

No caso de banda com ocupação 1/4, reproduzimos parcialmente o diagrama de fases obtido por Mila, Penc e Zotos<sup>(2,3)</sup>, usando o gap de carga e o de spin. Quando a intensidade do hopping correlacionado ( $X$ ) é igual ao do não correlacionado ( $t$ ), aparecem simetrias extras neste sistema e em consequência mudanças nas fronteiras de cada fase e também no comportamento das

funções de correlação. Neste caso, encontramos três diferentes regiões no diagrama de fases, cada uma delas caracterizadas por diferentes números de ocupação. Em duas destas fases, o singleto supercondutor domina sobre as outras funções de correlação.

1-Daisy M. Luz e R. R. dos Santos, *Phys. Rev. B* **54**, 1302 (1996).

2-F. Mila, e X. Zotos, *Europhys. Lett.* **24**, 133 (1993).

3-K. Penc, F. Mila, *Phys. Rev. B* **49**, 9670 (1994).

### DIAGRAMA DE FASES DE UM MODELO PARA FRATURAS EM MATERIAIS FIBROSOS.

ISMAEL LIMA, JOSÉ GUILHERME MOREIRA  
Departamento de Física-Icer-Universidade Federal de Minas Gerais

AMÉRICO TRISTÃO BERNARDES  
Departamento de Física-ICEB-Universidade Federal de Ouro Preto

Existem dois tipos de fratura em materiais: frágil e dúctil. Estes dois tipos de comportamento dependem de vários fatores externos, mas os mais importantes são a temperatura e a velocidade de tração à qual o material é submetido. Neste trabalho nós simularemos a fratura de um material composto utilizando um feixe de fibras paralelas contendo  $N_o = L \times L$  fibras distribuídas em uma rede triangular. Todas as fibras possuem a mesma constante elástica  $k$  e o feixe é puxado com uma velocidade  $v$  até a ruptura. A cada intervalo de tempo  $\tau$  o feixe sofre um deslocamento  $v \cdot \tau$  aumentando, assim, a probabilidade de ruptura. Essa probabilidade para a  $i$ -ésima fibra é dada por

$$p_i = \frac{\delta}{(n_i + 1)} \exp\left[\frac{1}{t}(\delta - 1)\right],$$

onde  $n_i$  é o número de vizinhos inteiros dessa fibra,  $\delta = z/z_c$  é a deformação do feixe com  $z_c$  sendo uma deformação crítica,  $t = k_b T/E_c$  é a temperatura normalizada e  $E_c = k z_c^2/2$  é a energia cinética crítica. A cada passo são sorteadas  $N_q = q N_o$  fibras que poderão se romper, sendo  $q$  um número positivo menor que um. O rompimento de uma fibra pode originar um processo de cascata, que descreve a propagação da trinca. Neste trabalho nós levantaremos o diagrama tensão-deformação do sistema, o diagrama de fases da temperatura *versus* a velocidade, que nos permite determinar três regiões: onde a fratura é frágil, onde a fratura é dúctil e a região de transição frágil-dúctil. A região de transição frágil-dúctil é detectada através de um comportamento do tipo lei de potência entre o número de trincas *versus* o tamanho da trinca.

### TUNELAMENTO ASSISTIDO EM METAIS

LUIS ROBERTO RAMOS, VALTER LUIZ LIBERO  
IFSC-USP

Este trabalho investiga o modelo proposto por Kondo em 1976 onde uma partícula carregada tunela entre dois mínimos de potencial (duas impurezas) em uma rede metálica [J. Kondo, *Physica B*, 40 (1976)]. Nesse modelo, o íon por estar acoplado eletrostaticamente à banda de condução, "arrasta" os elétrons da mesma. Isso faz com que a taxa de tunelamento efetiva diminua, como mostrou Kondo usando teoria de perturbação, sendo que Yamada e colaboradores obtiveram, depois, a expressão exata dessa taxa efetiva [K. Yamada, A. Sakurai e M. Takeshige, *Progress of Theoretical Physics*, 70, (1983)] No modelo proposto por Kondo, o tunelamento é intrínscio ao íon, ou seja, surge da superposição das funções de onda, sendo que não foi considerado por Kondo a possibilidade do tunelamento ocorrer através de um espalhamento dos elétrons da banda de condução, ou seja, pelo tunelamento assistido. Neste trabalho, estamos comparando a competição entre este processo com o tunelamento direto, por meio de cálculos de propriedades termodinâmicas (como calor específico) do sistema em baixas temperaturas. O Hamiltoniano para esse modelo é complexo, pois possui muitos graus de liberdade devido aos elétrons da banda de condução, e além disso, os termos de espalhamento e tunelamento assistido são de natureza quártica, o que faz com que seja tratado por técnicas de muitos corpos. Para sua solução, temos aplicado a técnica do Grupo de Renormalização Numérico, originalmente desenvolvida por Wilson para tratar o problema Kondo de uma impureza magnética em metal não magnético [K. G. Wilson, *Reviews of Modern Physics*, 47 (1975)]. Em nosso caso, essa técnica é adaptada ao problema de duas impurezas.

### Tunelamento Macroscópico em Fios Quânticos.

JOSÉ ARRUDA FREIRE, DANIEL AROVAS, HERBERT LEVINE

*University of California, San Diego*

Nós estudamos a criação quântica de "phase slips" em uma supercorrente unidimensional. Modelamos um sistema de bosons interagindo por meio de um potencial de caroço duro usando a Lagrangiana de Gross-Pitaevskii. Em um sistema de referência no qual o superfluido move com velocidade  $v$ ,

$$\mathcal{L} = i\bar{\psi}\partial_t\psi + \frac{1}{2}\partial_x\bar{\psi}\partial_x\psi + \frac{1}{2}[\bar{\psi}\psi - \zeta(x)]^2 - iv\bar{\psi}\partial_x\psi,$$

onde  $\psi$  é um campo complexo que representa o condensado e  $\zeta(x)$  é um potencial químico não uniforme que visa modelar uma região do fio quântico onde a densidade do superfluido é reduzida. Observamos que a equação de Schrödinger não-linear, que determina a dinâmica do condensado, possui uma velocidade crítica  $v_c$  tal que para valores de  $v$  abaixo do valor crítico uma

solução independente do tempo representando uma supercorrente laminar pode ser encontrada, para valores de  $v$  acima do valor crítico essa solução se torna instável e "phase slips", seguidos pela emissão de solitons, são espontaneamente gerados no sistema. Para investigar o decaimento quântico do estado metaestável nós resolvemos numericamente as equações de movimento em tempo imaginário ( $t = -i\tau$ ) para  $v < v_c$ ,

$$\partial_\tau\psi = \frac{1}{2}\partial_x^2\psi - [\bar{\psi}\psi - \zeta(x)]\psi + iv\partial_x\psi, \quad \psi(-T/2) = \psi_0,$$

$$-\partial_\tau\bar{\psi} = \frac{1}{2}\partial_x^2\bar{\psi} - [\bar{\psi}\psi - \zeta(x)]\bar{\psi} - iv\partial_x\bar{\psi}, \quad \bar{\psi}(T/2) = \psi_0^*,$$

onde  $\psi_0$  representa o estado metaestável do sistema. Essas equações foram resolvidas como um sistema de equações algébricas não-lineares para os valores de  $\psi(x, t)$  e  $\bar{\psi}(x, t)$  em uma rede no plano  $x-t$ . O método de Newton complementado pelo método híbrido de Powell para tornar o algoritmo globalmente convergente foi usado para encontrar soluções do tipo "bounce" que descrevem o decaimento quântico do estado metaestável através da criação de "phase slips". Outras possíveis aplicações do método serão discutidas.

### Estrutura da água entre placas paralelas utilizando Método de Monte Carlo no ensemble isotérmico-isobárico

GUILHERME ALFIÉRI SOBRINHO, LÉO DEGRÈVE  
*Grupo de Simulação Molecular Depto. de Química, F.F.C.L.R.P., USP*

O estudo de líquidos próximos à interfaces tem larga aplicação em diversas áreas da Física e da Química, particularmente no estudo de catálise heterogênea, adsorção em minerais e rochas e em eletroquímica. Nesse trabalho, estuda-se a estrutura da água confinada entre duas placas paralelas que funcionam como paredes rígidas. As informações estruturais e energéticas são obtidas pelo método de Monte Carlo no ensemble isotérmico-isobárico ( $NpT$ ). Modelamos a água em TIP4P. A temperatura e a pressão são mantidos em 298K e 103,25KPa respectivamente. Os resultados de funções de distribuição parede oxigênio e parede hidrogênio mostram que a densidade do hidrogênio próximo à parede é maior que a do oxigênio. Isto indica uma orientação preferencial onde um dos hidrogênios está voltado para a parede. Uma análise preliminar indica que o vetor que une os átomos de hidrogênio faz um ângulo de cinquenta e oito graus com a parede. O vetor que une o átomo de oxigênio com o hidrogênio que está mais próximo da parede faz um ângulo de oitenta e dois graus com a parede e o ângulo que o vetor que une o oxigênio com o outro hidrogênio faz um ângulo de vinte e oito graus com a parede. Esses dados são

compatíveis com os obtidos em estudos de hidratação em soluções diluídas de metano. Para distância parede-parede inferior a três diâmetros moleculares a molécula de água encontra-se preferencialmente adsorvida na parede. O aumento da distância entre as paredes implica numa diminuição na adsorção e na perda da estrutura do hidrogênio próximo à parede. O projeto está ainda em uma fase inicial. (CAPES, CNPq, FAPESP)

#### Efeitos do confinamento na energia e estrutura de soluções eletrolíticas utilizando o método de Monte Carlo no ensemble NVT.

SÉRGIO MODESTO VECHI, LÉO DEGRÈVE  
Grupo de Simulação Molecular Depto. de Química,  
F.F.C.L.R.P., USP

O estudo de líquidos confinados é de grande importância no entendimento do transporte iônico através de membranas celulares. Nestes sistemas estão presentes os canais iônicos que são constituídos por proteínas e formam poros de dimensões moleculares. Neste trabalho estuda-se a estrutura e energia de soluções eletrolíticas confinadas em canais cilíndricos de paredes rígidas utilizando o método de Monte Carlo no ensemble NVT. A solução eletrolítica é constituída por moléculas de água que apresentam um coração rígido e interações multipolares ( dipolo, quadrupolo e octupolo ) e por íons também rígidos. As análises estruturais incompletas são feitas utilizando-se funções de distribuição multivariáveis de dois corpos. A descrição completa da estrutura tridimensional é dada por funções de distribuição de muitos corpos. Observou-se um aumento na adsorção das moléculas de água com a diminuição do raio do cilindro, sendo que o oxigênio encontra-se preferencialmente adsorvido na parede enquanto que o hidrogênio está mais afastado desta. Com o aumento do raio observa-se a formação de uma segunda camada de moléculas de água adsorvidas. Quando apenas um íon está presente este encontra-se no centro do canal. Quando dois íons estão presentes eles encontram-se em lados opostos do canal e à distância máxima possível entre eles. A energia média configuracional torna-se menos atrativa com o aumento do número de íons e com a diminuição do raio do canal, sendo ainda menos atrativa que a apresentada pelo modelo na fase homogênea. As orientações relativas entre as moléculas de água e íons são semelhantes às encontradas na fase homogênea sugerindo que a estrutura tetraédrica da água não é perdida no interior do canal. ( FAPESP, CAPES, CNPq )

#### A RECONSTRUÇÃO DAS DISTRIBUIÇÕES DE QUASE-PROBABILIDADES: MOMENTOS EXPERIMENTAIS E DETECÇÃO HOMÓDINA PRÉ-AMPLIFICADA

MARCELO A. MARCHIOLLI, SALOMON S. MIZRAHI,  
VICTOR V. DODONOV  
UFSCAR

As distribuições de quase-probabilidades (DQP) tais como a função-P de Glauber-Sudarshan, as funções de Wigner e Husimi, foram originalmente introduzidas em Ótica Quântica como ferramentas matemáticas para o estudo de estados não-clássicos do campo eletromagnético. Recentemente, a reconstrução do campo é objeto de investigação nos domínios teórico e experimental devido a possibilidade de se medir indiretamente tais distribuições. Dentre os inúmeros trabalhos sobre este tema, merecido destaque deve-se a Vogel e Risken [*Phys. Rev. A* **40**, 2847 (1989)] por introduzir na literatura um esquema tomográfico de reconstrução que permite, a partir de distribuições de probabilidades mensuráveis associadas ao operador de quadratura de fase rodado  $X_\theta$ , obter as distribuições teóricas. Posteriormente, Smithey *et al.* [*Phys. Rev. Lett.* **70**, 1244 (1993)] construiu um dispositivo experimental baseado no princípio de detecção homódina balanceada para medir as distribuições associadas a  $X_\theta$ , e consequentemente, determinar a função de Wigner para os estados comprimidos e vácuo de um modo do campo eletromagnético. Neste trabalho, utilizamos a teoria operacional de detecção homódina para obter uma função genérica de distribuição de probabilidades no espaço de fase [K. E. Cahill e R. J. Glauber, *Phys. Rev.* **177**, 1857 (1969)] do campo em termos dos momentos experimentais. Em seguida, consideramos o método de amplificação paramétrica degenerada para reduzir o problema de eficiência não-ideal do fotodetector por intermédio da compressão em uma das quadraturas. As simulações dos resultados mostram que para determinados valores do parâmetro de compressão e um número limitado de momentos, a DQP aproxima-se da original mesmo para eficiências menores que 0.5.

#### UNA TRANSFORMAÇÃO DISCRETA DE HUBBARD-STRATONOVICH PARA SIMULAÇÃO DO HAMILTONIANO DE HUBBARD ESTENDIDO.

GUSTAVO ADOLFO LARA CHAPARRO  
Universidad de Antofagasta

O modelo de Hubbard é o prototipo de um sistema eletrônico fortemente correlacionado. Originalmente empregado em metais de transição, resurgiu o interesse nele para modelo da supercondutividade de alta  $T_c$ , mas as simulações de este modelo tem dado resultados nega-

tivos o qual tem dado passo a construção de outros modelos, um dos quais seria, a consideração da extensão da formulação de Hubbard. Propõe-se um estudo do modelo de Hubbard estendido até incluir os principais termos da interação de Coulomb entre dois sítios vizinhos, a repulsão intrasítio, a repulsão intersítio, o hopping correlacionado e o termo de troca. Uma importante aproximação a este problema é o estudo de sistemas de tamanho finito, mas os cálculos exatos somente são possíveis em sistemas muito pequenos, devido ao elevado custo computacional. Um método com menor custo computacional para sistemas não muito pequenos, é a simulação de Monte Carlo. Para realizá-la, é necessária uma transformação de Hubbard - Stratonovich, a qual permite representar ao sistema de férmions interagentes por um sistema de férmions não interagentes, acoplados a campos externos. Esta transformação não é única, porém ela deve ter as propriedades de envolver poucos campos externos por sítio e que o problema do sinal seja de pequena magnitude e a convergência seja quadrática o superior no parâmetro  $\Delta\tau = \beta/L$ . Neste trabalho se apresenta uma destas transformações, numa simulação feita para uma rede bidimensional de 4 por 4 sítios, a qual utiliza somente três campos discretos por cada par de sítios, e serve para a interação de Coulomb intrasítio e intersítio repulsivas, com hopping correlacionado e termo de troca tanto positivos como negativos.

### SINAIS DE QUEBRA DINÂMICA DE SIMETRIA EM UMA CADEIA QUÂNTICA DE SPIN 1

JOSÉ RICARDO G. DE MENDONÇA, FRANCISCO C. ALCARAZ

*Departamento de Física - Universidade Federal de São Carlos*

Neste trabalho apresentamos dados numéricos obtidos na investigação de um processo estocástico de reação e difusão na rede envolvendo três espécies de partículas. O processo foi introduzido recentemente (U. Alon *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 2746 (1996)) como um modelo para o crescimento de superfícies unidimensionais, e foi divisado na tentativa de se tentar compreender um pouco mais o fenômeno de quebra dinâmica de simetria, que se vem observando em alguns sistemas unidimensionais em presença de termos de superfície ou outra forma de ruído incessante ("unbounded noise"); no caso do processo em questão esta quebra de simetria se revela como uma transição de fase lisa-rugosa para a superfície. Nosso estudo se baseia no mapeamento do processo estocástico acima em uma equação de Schrödinger em tempo imaginário cujo hamiltoniano (o gerador do semigrupo de Markov), não-hermitiano em geral, é o de uma cadeia quântica de spin um. Os "gaps" de massa destas cadeias podem ser utilizados para caracterizar a fase de simetria quebrada do modelo e também no cálculo de seu expoente crítico dinâmico.

Obtivemos dados para o modelo em sua versão restrita (RSOS), onde as alturas associadas aos sítios de uma cadeia fechada obedecem  $|h_{\ell+1} - h_{\ell}| \leq 1$ , e eles indicam que o modelo pertence, assim como em sua versão não restrita, à mesma classe de universalidade do processo de percolação orientada.

### Análise da técnica de RMC/SSA para aplicações em líquidos moleculares: Moléculas diméricas

FERNANDO LUÍS B. DA SILVA <sup>1</sup>

*Physical Chemistry II, Lund University*

AGUINALDO R. DE SOUZA <sup>2</sup>

*Depto. de Química, Unesp-Bauru*

LÉO DEGRÈVE <sup>3</sup>

*F.F.C.L.R.P., Universidade de São Paulo*

A técnica de Monte Carlo Reverso (RMC) permite a modelagem de sistemas moleculares através do posicionamento de conjuntos de pontos no espaço representando configurações físicas destes sistemas. Não é necessário o conhecimento dos potenciais intermoleculares mas apenas o das funções de distribuição radial (fdr) experimentais. Trata-se de uma variação do convencional Método Monte Carlo Metropolis (MMC), onde a diferença da energia potencial ( $\Delta U$ ) é substituída pela diferença entre a fdr experimental e a calculada na simulação RMC. Empregando o algoritmo SSA [1], aplicamos a técnica à moléculas diméricas homonucleares rígidas ("hard-dumbbells"). As fdr experimentais foram obtidas por simulações Monte Carlo. Como teste das configurações geradas por RMC/SSA, as fdr e o potencial químico de excesso ( $\mu_{ex}$ ) foram calculados e comparados com resultados anteriores. O método de "inserção de partículas" (Widom) foi utilizado para obtermos o potencial químico de excesso. Nossos resultados revelam excelente equivalência entre as funções RMC e experimentais, confirmando a potencialidade do novo algoritmo para aplicações em líquidos moleculares de baixa simetria esférica. Assim, superam-se os problemas da versão RMC/McG anteriormente reportados por nós [2].

#### Referências

- [1] F.L.B. Da Silva *et al.*, submetido.
  - [2] L. Degreève, F.L.B. da Silva, C. Quintale Jr., A.R. de Souza, *J. Molec. Struct. (Theochem)*, **89**, 335, 1995. *CNPq, Fapesp*
- <sup>1</sup> fk2fds@dix.fkem2.lth.se  
<sup>2</sup> arobinso@azul.bauru.unesp.br  
<sup>3</sup> ldegreve@spider.usp.br

### ENTROPIA E PRESSÃO POR MONTE CARLO PARA O SISTEMA DE ESFERAS RÍGIDAS ATRATIVAS

MARCELO CALDEIRA BARBOSA, RICARDO ANDREAS SAUERWEIN

*Universidade Federal de Santa Maria*

A simulação de Monte Carlo de sistemas nas vizinhanças de uma transição de primeira ordem frequentemente exhibe estados metaestáveis que dificultam sua análise. Nestes sistemas, duas simulações diferentes podem levar a dois estados diferentes. Sabemos que o estado que possui menor energia livre é o mais estável, porém a energia livre não é usualmente uma medida calculada diretamente na simulação. Em cálculos de Monte Carlo é possível estimar apenas grandezas que possam ser escritas na forma de uma média de alguma função de estado. Este não é o caso da energia livre, da entropia e da pressão. Duas técnicas são utilizadas para contornar este problema. A primeira, conhecida como método da integração termodinâmica, efetua uma integração numérica ao longo de um caminho sobre o diagrama de fases do sistema de grandezas estimadas durante várias simulações de Monte Carlo, é portanto, uma técnica indireta. A segunda técnica relaciona a entropia com quantidades que podem ser escritas na forma de médias de funções de estado usuais. Desta forma, é possível estimar a entropia diretamente, ou seja, através de uma única simulação de Monte Carlo. Neste trabalho, utilizamos um método direto recentemente apresentado para investigar o modelo de gás de rede de esferas rígidas atrativas. Neste modelo, os átomos podem estar localizados somente nos sítios de uma rede cúbica simples. A interação entre dois átomos pode ser de apenas dois tipos: (a) infinitamente repulsiva se os átomos forem primeiros vizinhos ou (b) atrativa se os átomos forem segundos vizinhos. Através de simulações de Monte Carlo no "ensemble" grande canônico, determinamos a linha de transição sólido-fluido deste sistema.

### RANDOM ISOTROPIC ONE-DIMENSIONAL XY-MODEL

LINDBERG LIMA GONÇALVES, ANDRÉ DE PINHO  
VIEIRA

*Departamento de Física da UFCe, Campus do Pici, Caixa  
Postal 6030, 60451-970 Fortaleza, Ceará, Brazil*

The one-dimensional isotropic  $s = 1/2$  XY-model [1,2], closed chain ( $N$  sites), with random exchange constant in a transverse random field [3] is considered. The exchange constant and the transverse field satisfy bimodal quenched distributions. In such a system a uniform transverse field induces a quantum transition [2]. The method of solution consists in using the Jordan-Wigner fermionization and a canonical transformation, thus reducing the problem to computing the eigenvalues and eigenvectors of a  $N \times N$  matrix, corresponding to a system of  $N$  non-interacting fermions. Such calculations are performed numerically (for chains of  $N = 1000$  sites) and repeated for various samples, which are obtained by selecting the random variables from the given distributions using a pseudo-random number generator.

The field-induced magnetization at  $T = 0$  is calculated by averaging the results obtained for the different samples. For the dilute case, in the uniform field limit, the magnetization exhibits various discontinuities, which are consequence of the existence of disconnected finite clusters distributed along the chain [4]. In the same limit and for finite exchange constants  $J_A$  and  $J_B$ , as the probability of  $J_A$  varies from one to zero, the saturation field is seen to vary continuously from  $\Gamma_A$  to  $\Gamma_B$ , where  $\Gamma_A(\Gamma_B)$  is the value of the saturation field for the pure case with exchange constant equal to  $J_A$  ( $J_B$ ). For the non-uniform random field limit, special attention is given for the case where the average transverse field is zero.

[1] E. Lieb, T. Schultz, D. Mattis, *Ann. Phys.* 16, 407 (1961).

[2] Th. Niemeijer, *Physica* 36, 377 (1962).

[3] O. Derzhko and T. Krokhnalskii, *Ferroelectrics* 153, 55 (1994).

[4] M. F. Thorpe and S. Miyazima, *Phys. Rev.* B24, 6686 (1981).

### A Growth Model in Two Universality Classes

TALES JOSÉ DA SILVA

*UFMG*

It is known that the growth models of compact structures generate, over a  $d$ -dimensional substrate with  $L^d$  sites, self-affine interfaces in the steady state. Differential equation is associated to each model. The terms of these equations represent the interactions which occur in the growth process. The roughness, or width interface,  $\omega$  of the profile obeys a scaling relation with two exponents which predicted the short and long time behaviors of roughness. For short times we have  $\omega(L, t) \sim t^\beta$ , and  $\omega(L, t) \sim L^\alpha$  for long times. In this work, we propose a one-dimensional model which contains some characteristics of two universality classes. The first one obeys the linear growth equation (SOS with Surface Relaxation) and the second obeys a KPZ equation (SOS with Restriction). In the two models, we select a site  $i$  at random and its height  $h_i$  grows, that is,  $h_i \rightarrow h_i + 1$  with the height restriction  $h_i - h_{i\pm 1} < m$ , where  $m$  is a parameter. In the model with Relaxation, if the restriction is not obeyed, the surface relaxation occurs, that is, the particle goes to the next local minimum. In the model with Restriction, a particle which does not obey the restriction is refused. In this case, the  $h \rightarrow -h$  symmetry is broken and the KPZ equation is obeyed. In our model, a particle can walk a maximum distance  $\Delta x$  in order to find the local minimum. Otherwise, this particle must be evaporated. We have done numerical simulations which confirms the simultaneous presence of the two universality classes in the same dynamics, the class of the linear equation is present in short times, and the class of the KPZ equation in intermediate times.

### DENSIDADE ESPECTRAL NO MODELO DE KONDO DE TUNELAMENTO.

SILVIA MARTINS DOS SANTOS, VALTER LUIZ LIBERO  
IFSC-USP

O objetivo deste trabalho é calcular a densidade espectral no Modelo de Kondo de Tunelamento [J. Kondo, *Physica*, 84B p. 207, 1976], que consiste em duas impurezas, interagentes, localizadas em posições fixas num metal e separados por uma distância  $R$ . Os níveis de energia destas impurezas são degenerados e, um buraco criado em uma delas, tunela entre os dois níveis de energia de impurezas com uma taxa de tunelamento  $\Delta$ , quando não há interação com a banda de condução. A simetria de inversão, presente no problema, possibilita a separação da densidade espectral em duas partes, uma correspondendo à evolução do buraco criado no orbital ligante, chamada densidade espectral par e outra correspondendo à evolução do buraco criado no orbital anti-ligante, chamada densidade espectral ímpar. O comportamento das curvas, em certos limites, obedece à lei de potência proposta por Doniach e Šunjić, cujos expoentes podem ser encontrados em termos das defasagem da banda de condução. O estudo deste problema já foi feito anteriormente, mas sem explorar uma lei de conservação existente no problema, a conservação da paridade. Esse número quântico adicional (paridade) permite uma diagonalização numérica mais eficiente e portanto possibilita que se explore melhor o espaço de parâmetros do modelo. Em particular mostramos que, diferentemente do calor específico, a densidade espectral é bem diferente para o mesmo valor do parâmetro  $\sqrt{1 - S^2} \sin \Delta$  são bem diferentes. Aqui  $S = \frac{\sin K_F R}{K_F R}$ , com  $R$  a separação e  $\delta$  a defasagem dos elétrons da banda de condução no nível de Fermi. O problema, mostrado acima, foi abordado usando a técnica de Grupo de Renormalização numérico [K. G. Wilson, *Reviews of Modern Physics* 47, n. 04, p.773, 1975], adaptado ao modelo de duas impurezas. Utiliza-se também a discretização logarítmica com dois parâmetros.

### LOCALIZAÇÃO ELTRÔNICA EM SISTEMAS COM DESORDEM CORRELACIONADA

DENISE FERNANDES DE MELLO

Depto. de Física - Fac. de Ciências - UNESP - Campus de Bauru

GUILLERMO G. CABRERA

Instituto de Física "Gleb Wataghin" - UNICAMP  
Campinas

O papel da desordem correlacionada na localização eletrônica é investigado para o caso de ligas binárias, através de cálculos da densidade de estados (DOS), para geometrias bi e tri dimensionais. O modelo usado para descrever o sistema desordenado é do tipo Tight

Binding com interação apenas entre sítios primeiros vizinhos e desordem diagonal. As energias de sítio  $E_i$  podem assumir dois valores  $E_A$  ou  $E_B$  dependendo do sítio  $i$  ser ocupado por um átomo tipo  $A$  ou  $B$  respectivamente. O termo de hopping é suposto como uma constante  $V$ . Investigamos vários limites do grau de correlação da ordem de curto alcance, indo desde o limite de segregação das espécies, passando pela desordem aleatória até atingir o limite ordenado. Nossos cálculos evidenciam uma transição de estados exponencialmente localizados para estados não exponencialmente localizados em função do grau de desordem. Esse efeito de localização-deslocalização é também comprovado quando usamos diferentes condições de contorno. Enquanto no caso de estados exponencialmente localizados o espectro de energia permanece inalterado frente a mudanças nas condições de contorno, no caso de estados estendidos há alterações sensíveis. Dois casos são investigados, o primeiro correspondendo ao limite de percolação quântica onde as energias das espécies  $E_A$  e  $E_B$  estão muito distantes, e o segundo caso correspondendo ao limite em que as bandas se aproximam. Observamos que dependendo da separação de energia  $E_B - E_A$ , a transição do regime de localização forte (estados exponencialmente localizados) para o regime de localização fraca (estados não exponencialmente localizados) ocorre para diferentes graus de desordem.

### Reconstruction Dynamics of a model Hamiltonian for W(100)

M. R. BALDAN

INPE,USF

E. GRANATO

INPE

C. S. YING

Brown University

Molecular dynamics simulation are used to investigate the reconstruction dynamics of the W(100) surface during a short temperature increase on a picosecond time scale. In the experiments, this correspond to an ultrashort laser pulse which heats the surface. The time response of the system is used to extract an estimate of the relaxation time.

Standard methods of Brownian Molecular Dynamics, are used to simulate finite temperature effects and follow the time evolution of the system. A  $N \times N$  square lattice with  $N = 10$  and periodic boundary conditions is used in the simulations. The equations of motion are integrated with a time step of  $\delta t = 0.01t$ , in reduced units of time  $t_s$ . The W(100) surface is described by the model Hamiltonian

$$H = \sum_i \left[ \frac{A}{2} u_i^2 + \frac{B}{4} u_i^4 + 8H_4 u_{ix}^2 u_{iy}^2 \right. \\ \left. + C_1 (u_i \cdot u_j + u_i \cdot u_k) + C_2 (u_{ix} (u_{j'y} - u_{k'y}) \right. \\ \left. + u_{iy} (u_{j'x} - u_{k'x})) \right]$$

where  $u_i$  is the displacement of a W atom on the  $i$ th site,  $\tilde{R}_i = a_o(l, m)$ , with  $l$  and  $m$  integers, and  $j = (l+1, m)$ ,  $k = (l, m+1)$ ,  $j' = (l+1, m+1)$  and  $k' = (l-1, m+1)$ . The dimensionless parameters used in the simulation are  $A = -10$ ,  $B = 40$ ,  $C_1 = 3.75$ ,  $C_2 = C_1/2$  and  $H_4 = -1.85$ .

### INFLUÊNCIA DA SUPERPOSIÇÃO CAÓTICA SOBRE PARÂMETROS PROBABILÍSTICOS EM MODELOS EPIDÊMICOS.

CLAUDIA B. DOS SANTOS, ANTONIO CALIRI  
USP

Ao se considerar a ocorrência de uma determinada moléstia em uma população, a probabilidade de infecção dos suscetíveis depende de muitos fatores, entre eles a quantidade de agentes infectantes presentes no sistema. Tal quantidade pode diferir, em muitas ordens de grandeza, da população de suscetíveis. Neste trabalho, a densidade de agentes infectantes existentes - em cada um dos indivíduos infectados - em períodos sucessivos de tempo, foi assumido variar caoticamente, conforme a expressão:  $\sigma_{t+1} = r\sigma_t[1 - \sigma_t]$ , onde:  $\sigma_t$  é a densidade de agentes infectantes no período  $t$ , e  $r$  variando aleatoriamente ao redor de  $r_0$  para cada um dos indivíduos infectados.

A probabilidade  $p$  de um suscetível, escolhido aleatoriamente, se infectar em um determinado tempo  $t$ , dependerá de sua vizinhança. Neste trabalho,  
$$p = 1 - \left\{ \prod_{i=1}^4 (1 - h_1 p_1^{(i)}) \prod_{i=1}^4 (1 - h_2 p_2^{(i)}) \prod_{i=1}^4 (1 - h_3 p_3^{(i)}) \prod_{i=1}^8 (1 - h_4 p_4^{(i)}) \prod_{i=1}^4 (1 - h_5 p_5^{(i)}) \right\}$$
, onde:  $p_j^{(i)}$  é a probabilidade de um indivíduo suscetível se infectar através do  $i$ -ésimo vizinho da  $j$ -ésima categoria (categoria  $j = 1$  corresponde à primeiros vizinhos, etc.,  $j = 1, \dots, 5$ )

$$p_j^{(i)} = \begin{cases} 0, & \text{se } \sigma_t \leq a \\ (\sigma_t - a)/(b - a), & \text{se } a < \sigma_t < b \\ 1, & \text{se } \sigma_t \geq b \end{cases}$$

e,  $h_i$  define a máxima probabilidade de infecção para  $1^{os}$ ,  $2^{os}$ ,  $3^{os}$ ,  $4^{os}$  e  $5^{os}$  vizinhos.

Um dos resultados dessa abordagem (superposição de

um fator caótico sobre os parâmetros probabilísticos do modelo), mostra que a constante flutuação da prevalência de uma população sobre a outra, evita a extinção dos agentes infectantes pelo extermínio dos suscetíveis assim como permite a recuperação do número de suscetíveis. A dinâmica do processo epidêmico é determinada por simulação tipo Monte Carlo.

### QUASI-ONE DIMENSIONAL POLARON STATES ON THE SURFACE OF LIQUID HELIUM

ANTÔNIO CARLOS A. RAMOS, SVIATOSLAV S. SOKOLOV, NELSON STUDART  
Departamento de Física - UFSCar

The polaron states over liquid helium are described in terms of the coupling of the surface electron with the deformation of the surface due to a holding electric field in the perpendicular direction. Even though the polaron formation has been proposed theoretically a long time ago, only recently was found its experimental evidence. It was also suggested that electrons can also be trapped on the helium surface along quasi-one-dimensional channels. In this work our aim is to investigate the possibility of the formation of the polaron state in these channels. For this, we have evaluated the ground- and excited states of the polaron in quasi-one-dimensional electronic channels over the surface of liquid helium. We have employed the hydrodynamical approach developed by Sokolov and Studart in which the coupled Schrödinger equation and the equation for surface mechanical equilibrium are solved in the case of a non-symmetrical potential due to the lateral confinement in the transverse direction. Numerical results are obtained for the energy spectrum in the harmonic approximation, in which the dimple formed by the electron pressing the surface has a parabolic profile as well by using the variational method, in which the polaron energy is minimized in terms of two parameters related to the electron localization along the plane.

(This work was supported by FAPESP.)

## FÍSICA ESTATÍSTICA (Sistemas Complexos)

### FÍSICA ESTATÍSTICA (Sistemas Complexos) – 11/06/97

#### ENVELHECIMENTO BIOLÓGICO EM POPULAÇÕES SEXUADAS

RITA M. C. DE ALMEIDA

UFRGS

CRISTIAN MOUKARZEL

UFF

Consideramos uma generalização do modelo de Penna para populações diplóides com reprodução sexuada, onde o 'bit-string', de comprimento  $B$ , associado ao fenótipo de cada indivíduo é construído a partir de dois 'bit-strings' representando o genótipo, herdado dos pais, utilizando-se uma matriz de dominâncias. A reprodução sexuada é simulada escolhendo-se aleatoriamente dois indivíduos. A seguir, constrói-se o bit-string genotípico herdado de um dos genitores da seguinte maneira: para cada um dos loci, escolhe-se aleatoriamente um dos gens do genitor para ser herdado pelo filho, construindo um único bit-string. A seguir repete-se a operação considerando o outro genitor. O filho herda então um bit-string do pai e o outro da mãe, a partir dos quais seu fenótipo é construído, havendo a interação das cargas genéticas. Resultados das simulações mostram que a população assintótica é tal que a faixa etária reprodutiva prevista geneticamente é igual para todos indivíduos. Assim, no caso de idade de morte prevista ocorrer antes do final da idade reprodutiva, os gens para loci que determinam doenças em idades menores ou iguais à última idade de reprodução  $R_f$  são fixados, de tal maneira que todos os genótipos da população para loci  $i < R_f$  são iguais. Em outras palavras, existem soluções assintóticas com senescência catastrófica. Para idades maiores que  $R_f$ , a fixação, se ocorre, é devido à deriva genética. No entanto, também existem soluções para as quais todos indivíduos apresentam idade de morte prevista geneticamente maior que  $R_f$  e, neste caso, a fixação dos gens se dá somente por deriva genética. Resultados exatos de campo médio, onde calculamos a frequência  $f_i$  de bits 1 no locus  $i$ , para  $i = 1, \dots, B$ , para a solução estacionária, concordam inteiramente com as simulações.

#### Evolution from the HIV primary infection and the onset of AIDS: a cellular automata approach

RITA MARIA ZORZENON DOS SANTOS

Universidade Federal Fluminense

SÉRGIO GALVÃO COUTINHO

Universidade Federal de Pernambuco

One of the hypothesis to explain the onset of the acquired immune deficiency syndrome (AIDS) after a long interplay between the immune system (T-cells) and human immunodeficiency virus (HIV) population is based on the very fast mutation of the HIV. After the primary infection the dynamical process lasts for a long latency period of time ranging from 2 to 10 years and so, during which the low concentrations of HIV stimulates a continuous reduction in the efficiency of the immune defenses ending up on the break down of the immune system (see, for example, ref.[1]). The immune system needs the order of 3-4 weeks to develop an specific immune response to any antigen. In the case of the HIV, during the period the system is developing its response to the original virus, the HIV population reproduces very fast suffering many mutations before the immune system starts the attack the original viruses. Those viral variants populations will trigger new immune responses specific to them, and during the period this response is being developed other different variants will be produced and so on. During the latency period the HIV population grows gradually exhausting the immune system that breaks down developing the AIDS. In this work, using a simple cellular automata model containing dynamical rules that mimic the HIV mutation and reproduce the fight between T-cells against the HIV, we succeed to describe quite well the evolution of the HIV and T cells concentrations in the organism of an infected patient after the first contact with the virus. We analyze the width and the height of the HIV population after the infection (first peak), the latency period and final concentrations of infected, dead and living T-cells. Our results are very robust with respect of the model parameters and are in good agreement with experimental data [2].

[1] Nowak, M. A. and Michael, A. J. Scientific American, **273**, (2), 42 August 1995.

[2] Abba, A. K. Lichtman, A. H. and Pober, J. S., *Cellular and Molecular Immunology*, W.B. Saunders Co., Philadelphia (1994).

#### SEARCHING FOR EVE THROUGH MONTE CARLO SIMULATIONS OF BIOLOGICAL AGEING

SUZANA MOSS DE OLIVEIRA, PAULO MURILO

CASTRO DE OLIVEIRA, GUSTAVO ADOLFO DE

MEDEIROS

Universidade Federal Fluminense

DIETRICH STAUFFER

University of Koeln - Germany

The bit-string Penna Model of biological ageing [J.Stat.Phys. 78, (1995) 1629] is now the most widely used Monte Carlo method to study ageing within the mutation accumulation theory. It has been successful in reproducing many aspects of evolutionary behaviour, including the fundamental Gompertz law from the 19-th century which states that human mortality increase exponentially with increasing age [Z.Physik B 101, (1996) 469]. In this work we studied different versions of the Penna Model with negative mutations and found that, after many generations, the number of lineages always decays to one. We got a power-law behaviour with an exponent roughly equal to one, except for one particular asexual case where this proportionality was found only if also positive mutations could happen. Measuring the mean correlation between the ancestor genome and those of the actual population we obtained that it goes to zero much before the number of families goes to one, the population keeping thus its biological diversity in spite of all individuals being descendents of the same common ancestor. This conclusion is also confirmed by the differences between families with different numbers of mutations.

### IMMUNIZATION TIME EFFECTS IN AN EPIDEMIC MODEL

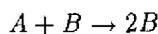
J. E. FREITAS, L. S. LUCENA

*Universidade Federal do Rio Grande do Norte,  
Departamento de Física*

H. J. HILHORST

*Université de Paris XI, Centre d'Orsay*

We have modified a diffusion-reaction model proposed by Hilhorst to describe the time evolution of the epidemic, by introducing a immunization time that corresponds to the period in which the individuals cannot be infected by the same disease, after the recovery from the last infection. In the form of a reaction-diffusion process, the modified problem can be presented as



(at a rate  $k$  upon encounter)



(with decay time  $\tau_B$ )



(with decay time  $\tau_C$ )

where  $A, B, C$  are the healthy infectable, the infected, and the healthy immune species, respectively. By using computer simulations we have been able to draw the phase diagram, determining the critical surface for one

and two dimensional systems. We have used a new technique, inspired by the phenomena of self-organized criticality, in which the system is driven spontaneously to critical point. This allows a great economy of computer time. We have obtained critical lines and phase diagrams and we compare these results with the ones from the case in which  $\tau_C = 0$ . We have studied many particular situations and specially steady state situations. We have found also evidence of an interesting new result in which the system oscillates between a phase that is dominantly infected and other phase that is mainly immune. It's possibly to apply some of these results to plan measures of public health strategy.

### SENSIBILIDADE ÀS CONDIÇÕES INICIAIS NO MODELO DE EVOLUÇÃO BIOLÓGICA

FRANCISCO A. TAMARIT, SERGIO ALEJANDRO

CANNAS

*Universidad Nacional de Córdoba, Argentina*

CONSTANTINO TSALLIS

CBPF

Existe na natureza uma grande variedade de fenômenos invariantes em relação a mudanças de escala, tanto no mundo inanimado (geologia, meteorologia, etc.) como na biologia (evolução biológica, crescimento celular, entre outros). Na maioria dos casos, este processo não requer nenhuma sintonização externa, já que é a própria dinâmica do sistema que leva a este estado crítico. Este fenômeno é atualmente conhecido como criticidade auto-organizada. Um dos modelos mais interessantes que apresentam este comportamento foi recentemente introduzido por Bak and Sneppen para estudar a evolução biológica de espécies interagentes. Ele consiste em uma cadeia linear com condições periódicas de contorno. Cada sítio tem associada uma variável real que toma valores aleatórios entre 0 e 1 e que corresponde à barreira de "fitness" separando duas espécies interagentes. Muitas das propriedades deste modelo têm sido estudadas nos últimos anos. Entretanto, existe uma que é crucial e que não tem sido considerada: a sensibilidade às condições iniciais, que tem mostrado ser relevante no estudo de sistemas dinâmicos não lineares. Utilizamos o método de propagação de danos para estudar as propriedades dinâmicas do modelo. Este método consiste em analisar a evolução temporal da distância de Hamming entre duas réplicas do sistema, inicialmente muito próximas. Mostramos que no estado auto crítico este modelo possui sensibilidade fraca às condições iniciais caracterizada por um comportamento do tipo lei de potência  $D(t) \sim t^{-\delta}$  (com  $\delta = 0.32 \pm 0.01$ ), como o observado no onset do caos na equação logística. Calculamos um expoente crítico que substitue o expoente

de Liapunov usual  $q = -1.2$  (associado com uma divergência exponencial) e o relacionamos com a termoestatística generalizada. Calculamos também o expoente dinâmico  $z = 1.56$ .

## A GEOMETRICAL MODEL FOR FRICTION

GIOVANI L. VASCONCELOS

*Universidade Federal de Pernambuco*

A simple geometrical model for solid friction is presented, within which both the static and the kinetic coefficients of friction are calculated exactly. In this one-dimensional model, the rough surfaces are imagined to have a simple sawtooth structure, i.e., the surfaces have a periodic triangular shape with an inclination angle  $\theta$  and a width  $a$ . It is also assumed for simplicity that both the upper and lower surfaces have the same "roughness", so that both surfaces are described by the same  $\theta$  and  $a$ . It is shown that in order to displace one surface over the other it is necessary to pull the upper surface with a force greater than a minimum value (static friction). From this result one can immediately obtain the static coefficient friction  $\mu_k$ . Once motion starts, it is assumed that the upper surface is then pulled at a constant speed  $v$ . The average force necessary to ensure this motion is calculated, thus allowing us to obtain an analytic expression for the kinetic coefficient of friction  $\mu_c$  as a function of the pulling speed  $v$ . This is, to the best of our knowledge, the first instance where an exact expression for the velocity dependence of  $\mu_c$  has been derived from general principles.

## NONEXTENSIVITY AND TSALLIS STATISTICS IN MAGNETIC SYSTEMS

FORTUNATO S. DE MENEZES, LUIZ C. SAMPAIO, MÁRCIO P. DE ALBUQUERQUE

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas/CNPq, Rua Dr. Xavier Sigaud, 150 URCA, Rio de Janeiro, RJ*

We have studied the role of long-range interactions on the thermodynamics of magnetic systems. We have simulated, through the Monte Carlo method, magnetization curves of a two-dimensional classical Ising model including a long-range dipole-dipole-like interaction, where the range of interaction is tuned by a parameter  $\alpha$  - the range of interaction. Based on the conjectures of Tsallis Statistics, we show that, for  $\alpha/d \leq 1$  ( $d = 2$ ), the appropriate form of the equation of state is given by  $\frac{M}{N} = m(T^*, H^*)$  with  $T^* \equiv \frac{T}{N^\alpha}$  and  $H^* \equiv \frac{H}{N^\alpha}$ . The normalization factor  $N^*$  ( $N^* \equiv \frac{(N^{(1-\alpha/d)} - 1)}{(1-\alpha/d)}$ ) emerges from the nonextensivity of thermodynamic variables of energy-type. The magnetization curves for  $\alpha = 3$  (hence  $\alpha/d > 1$ ) are size independent showing the agreement with the standard Boltzmann Gibbs statistics for systems of short range interactions. All simulations were performed for system sizes large enough to

prevent any finite size effects which may arise from simulation. Now change the range of interaction for  $\alpha = 2$  and  $\alpha = 1$  (hence  $\alpha/d \leq 1$ ) the magnetization at a field lower than the saturation one decreases for larger system sizes, disappearing the superposition of  $m = m(H, T)$  as in the previous case ( $\alpha = 3$ ). We discuss this effect arises from the long-range interactions in the range  $\alpha/d \leq 1$ , and  $H$  and  $T$  are no longer intensive quantities. We present the  $m(H^*, T^*)$  curves for  $\alpha = 2$  and  $\alpha = 1$ , now as a function of  $H^*$  and  $T^*$ , observing the size independent scaling as before. The crossover from nonextensive to extensive behavior at  $\alpha/d = 1$ , obtained through the susceptibility  $[\chi = \partial m(H^*, T^*) / \partial H^* |_{H^*=0}]$ , occurs smoothly and similarly to other quite different systems, thus suggesting to be a general result.

## Sobre a derivacao microscopica do indice entropico q da termoestatística generalizada.

CONSTANTINO TSALLIS

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas*

A termoestatística generalizada por nos proposta em 1988 [J. Stat. Phys. **52**, 479] fica inteiramente determinada pelo indice entropico  $q$  ( $q = 1$  corresponde a uma entropia extensiva, e reproduz a termoestatística de Boltzmann-Gibbs;  $q < 1$  e  $q > 1$  correspondem a entropias super e subextensiva respectivamente). Este formalismo tem apresentado varias aplicacoes, tanto em contextos teoricos quanto experimentais, tais como sistemas autogravitantes [Plastino and Plastino, Phys. Lett. A **174**, 384 (1993) e **193**, 251 (1994)], difusoes anômalas do tipo Levy [Zanette and Alemany, Phys. Rev. E **49**, R956 (1994), Phys. Rev. Lett. **75**, 366 (1995) e Phys. Rev. Lett. **77**, 2590 (1996); Tsallis et al, Phys. Rev. Lett. **75**, 3589 (1995); Caceres and Budde, Phys. Rev. Lett. **77**, 2589 (1996)] e do tipo correlacionado [Plastino and Plastino, Physica A **222**, 347 (1995); Tsallis and Bukman, Phys. Rev. E **54**, R2197 (1996); Compte and Jou, J. Phys. A **29**, 4321 (1996); Stariolo, Phys. Rev. E (Feb. 1997), em impressao], turbulencia em plasma eletronico puro [Boghosian, Phys. Rev. E **53**, 4754 (1996)], neutrinos solares [Kaniadakis et al, Phys. Lett. B **369**, 308 (1996)], cosmologia [Hamity and Barraco, Phys. Rev. Lett. **76**, 4664 (1996)], teoria da resposta linear [Rajagopal, Phys. Rev. Lett. **76**, 3469 (1996)], velocidades peculiares de aglomerados de galaxias [Lavagno et al, preprint (1997)], sistemas hamiltonianos com interacoes de longo alcance do tipo fluido [Jund et al, Phys. Rev. B **52**, 50 (1995); Grigera, Phys. Lett. A **217**, 47 (1996)] e do tipo magnetico [Cannas and Tamarit, Phys. Rev. B **54**, R12661 (1996); Sampaio et al, Phys. Rev. B (March 1997), em impressao], tecnicas de otimizacao [Stariolo and Tsallis, Ann. Rev. Comp. Phys., vol. II, ed. Stauffer (World Scientific, Singapore, 1995), p. 343 e Physica A **233**, 395 (1996); Penna Phys. Rev. E **51**,

RI (1995) e Comp. in Phys. 9, 341 (1995); Andricioaei and Straub, Phys. Rev. E 53, R3055 (1996); Schulte, Phys. Rev. E 53, 1348 (1996); Mundim and Tsallis, Int. J. Quantum Chem. 58, 373 (1996); Serra et al, Phys. Rev. E 55, 1162 (1997) e J. Chem. Phys. (1997), em impressao], e outros. Entretanto, uma etapa epistemologicamente importante, qual seja a determinacao de  $q$  a partir do conhecimento da dinamica microscopica do sistema, restava para ser estabelecida de modo generico. Trabalhos recentes sugerem uma ligacao profunda entre uma entropia de Kolmogorov-Sinai convenientemente generalizada e a consistente generalizacao do expoente de Liapunov, e mostram como o indice  $q$  pode ser deduzido do estudo da sensibilidade as condicoes iniciais. Ilustracoes serao apresentadas para: (i) diversos sistemas caoticos do tipo da equacao logistica [Tsallis et al, Chaos, Solitons and Fractals (1997) em impressao; Costa et al, preprint (1997); Vitor and Tsallis, em andamento]; (ii) sistemas apresentando criticidade auto-organizada, tais como o modelo de evolucao biologica de Bak e Sneppen [Tamarit et al, preprint (1996)], modelo de jogos de imitacao de Suzuki e Kaneko 1994 [Papa and Tsallis, preprint (1997)], pilha de arroz [Christensen, em andamento]. A presente discussao se encaixa naturalmente no contexto de conhecidas conexoes dinamico-estatisticas, tais como a hipotese ergodica (que liga medias temporais de um sistema com medias estatisticas de um ensemble de tais sistemas), a igualdade de Y.B. Pesin [Russ. Math. Surv. 32 (1977) 4; 75] (que liga a entropia de Kolmogorov-Sinai e o expoente de Liapunov) e, mais recentemente, [H.H. Rugh, preprint (1997)], a aproximacao dinamica da temperatura (que liga a temperatura com uma propriedade geometrica, do tipo curvatura de Gauss, do Hamiltoniano).

## FÍSICA ESTATÍSTICA (Sistemas Complexos) – 12/06/97

### RECURRENT APPEARANCE OF ULCERS IN HERPES INFECTION

ALBERTO GUSTAVO ARAUJO RIVAS, RITA MARIA ZORZENON DOS SANTOS  
*Universidade Federal Fluminense*

In a recent work Landini et al [1] measured the fractal dimension of different types of herpes ulcers that appear in cornea of patients infected by the HSV virus: most of the ulcers have a dendritic form, but some of them have an amoeboid or geographic form. They also proposed a simple cellular automata model that reproduces the formation of this kind of ulcers using a simple deterministic cellular automata. From their results they got a phase transition, depending on the values of the para-

eters, from the dendritic form phase to the amoeboid one.

More recently, Camelo-Neto and Coutinho [2] studied the steady state properties of a modified stochastic version of the Landini's model that exhibits SOC.

The aim of this work is to study the conditions that lead to the recurrent appearance of ulcers along the time evolution of the system. For this proposal we study a modified version of the Landini's model including the regeneration of the cells and also the Camelo-Neto and Coutinho model.

- [1] Landini, G., Misson, G.P. and Murray, P.I., in /it Fractals in Natural and Applied Sciences, ed. by M.M. Novak, Elsevier Science B.V., North Holland (1994);  
[2] Camelo-Neto, G. and Coutinho, S., Fractals 4, 113 (1996);

### CINÉTICA ASSINTÓTICA DE REAÇÕES AUTOCATALÍTICAS.

CÉLIA ANTENEODO, FERNANDO DE MAGALHÃES  
COUTINHO VIEIRA  
*Instituto de Biofísica - UFRJ*

Estudamos o comportamento assintótico da reação  $A + B \rightarrow 2A$ . A evolução temporal do decaimento da espécie B apresenta, nos espaços de baixa dimensão, comportamento anômalo, no sentido de ser diferente daquele esperado através da solução da equação diferencial padrão para o caso. Resolvendo a equação de reação-difusão para  $A + B \rightarrow 2A$  encontramos que, quando  $t \rightarrow \infty$  temos  $B(t) \sim \exp -kt$ , o que não está de acordo com resultados que obtivemos através de outros métodos. Observações similares já haviam sido feitas para inúmeras reações químicas, mas não para reações autocatalíticas. Métodos de simulação computacional foram empregados para uma abordagem inicial do sistema, e obtenção de estimativas do comportamento assintótico. Modelamos o sistema em redes de várias dimensões. A difusão se dá pelo movimento aleatório das partículas na rede, enquanto a reação ocorre quando partículas de tipo diferente se encontram. Através da construção de uma série hierárquica de equações, obtivemos uma outra estimativa de tal comportamento assintótico, coerente com o encontrado via simulação numérica. Esta série de potências nos fornece o expoente associado ao comportamento assintótico, isto é, para  $t \rightarrow \infty$  temos  $B(t) \sim \exp -kt^\gamma$ , onde  $\gamma$  é este expoente. Obtemos valores de  $\gamma$  para dimensões 1 e 2 através do cálculo conhecido para expoentes críticos. Mostramos também os resultados referentes às correlações e estruturas espaciais decorrentes do processo. Estes dados nos permitem compreender melhor a origem do expoente anômalo e ilustram a natureza geométrica do fenômeno. De fato, o expoente  $\gamma$  leva a um decaimento da espécie B mais lento do que no caso "clássico". Isto se deve à formação de domínios das duas espécies e uma concentração de reação "efe-

tiva" menor do que a verdadeira. Discutimos também possíveis formas de obter equações diferenciais parciais adequadas para o problema.

### ALGORITMO GENÉTICO E MECÂNICA ESTATÍSTICA GENERALIZADA.

MARCELO MORET

*Instituto de Biofísica - UFRJ Departamento de Ciências Exatas - UEFS*

FERNANDO DE MAGALHÃES COUTINHO VIEIRA,

PAULO MASCARELLO BISCH

*Instituto de Biofísica - UFRJ*

O ponto central de uma enorme variedade de problemas, seja em engenharia, química, física, psicologia, economia etc. consiste na otimização de uma apropriada função custo, definida em espaços contínuos ou discretos  $N$ -dimensionais. Nos processos cuja função custo possui um único mínimo a solução pode ser obtida por qualquer método gradiente. Entretanto, para as funções com vários mínimos métodos mais elaborados são necessários. Nos últimos anos, alguns algoritmos para otimização de processos vêm provando sua eficiência nos mais diversos problemas, entre esses o algoritmo genético e a termalização baseada na estatística generalizada (GSA). Neste trabalho apresentamos os resultados do algoritmo genético baseado na estatística generalizada (GGA). Para testar a qualidade do programa, estudamos funções custo simples e comparamos com resultados semelhantes de outros algoritmos. Acoplamos, também, o algoritmo a um código computacional para otimização de moléculas, que nesse caso foi o THOR. Nesse acoplamento obtivemos o mapa de energia de uma molécula simples e comparamos esses resultados com outro obtido usando o acoplamento entre o THOR e termalização generalizada (GSA). Além da velocidade de cálculo, a consistência de busca e o papel dos parâmetros empregados são investigados. Os principais parâmetros desse algoritmo genético generalizado (GGA) são equivalentes àqueles da Termalização Generalizada (GSA), ou seja, a temperatura inicial ( $T_0$ ), o parâmetro de visitação (aceitabilidade)  $q_V$  ( $q_A$ ) além do número de cópias de cada geração, característico dos algoritmos genéticos. Esse novo código tem a vantagem de ser mais rápido que os algoritmos genéticos convencionais devido à possibilidade de variarmos os parâmetros da estatística generalizada. A relevância do método para sistemas complexos, tais como os da biofísica, também será discutida.

### INFLUÊNCIA DAS ESTRUTURAS CRISTALINAS SUPERFICIAIS NA FORMAÇÃO DE ESTRUTURAS DISSIPATIVAS EM SUPERFÍCIES DE CATALISADORES

ROBERTO FERNANDES SILVA ANDRADE, FELIPE

BORGES CUNHA

*Instituto de Física - Universidade Federal da Bahia*

Fizemos uma investigação numérica bastante acurada em um modelo para a oxidação de CO sobre Pt(100), sistema caracterizado pela presença de fenômenos oscilatórios e formação de estruturas dissipativas. Estruturas dissipativas são observadas na região de pontos fixos instáveis do modelo homogêneo, mas sua ocorrência depende das condições iniciais e de condições de estabilidade para cada tipo de padrão. Para uma superfície homogênea e valores realistas dos parâmetros do modelo o diagrama  $P_c \times P_o$  apresenta uma grande região com turbulência de fase. Estruturas ordenadas, ondas alvo, planas e sobretudo ondas espirais são também encontradas, mas têm regiões de estabilidade bem menores. Este último padrão, que nunca foi identificado em experimentos com Pt(100), é observado experimentalmente no caso da superfície Pt(110) e reproduzidos por um modelo similar ao nosso. A maior diferença entre os dois sistemas se refere à transição de fase de 1. ordem entre os arranjos cristalinos  $1 \times 1$  e hex na superfície Pt(100), que dá lugar a uma transição de 2. ordem entre as fases  $1 \times 1$  e  $1 \times 2$  em Pt(110). A equação que descreve a dinâmica da estrutura da superfície do nosso modelo é derivada de um potencial de Ginzburg-Landau com a presença de um termo cúbico. Diminuindo o valor do coeficiente deste termo nos aproximamos de situações correspondentes a transições de 2. ordem. Observamos neste caso uma diminuição da região de fenômenos oscilatórios onde não existem pontos fixos estáveis. No entanto, a fração desta região onde ondas espirais são estáveis foi aumentada. Este resultado numérico parece corroborar influência da ordem da transição de fase superficial na formação de estruturas ordenadas.

### Algumas relações gerais em uma termoestatística arbitrária

RENIO DOS SANTOS MENDES

*CBPF, UEM<sup>†</sup>*

A termodinâmica usual e a estatística de Boltzmann-Gibbs são largamente empregadas em situações físicas ordinárias. Por outro lado, este aparato teórico não é útil quando algumas de suas características importantes são violadas como a extensividade da entropia e da energia interna. Neste caso, tem-se uma termoestatística não extensiva. Ademais, efeitos não extensivos tem despertado um grande interesse recentemente. Neste contexto, há exemplos interessantes tais como difusão anômala, astrofísica com interações de longo alcance (gravitacional), alguns sistemas magnéticos e algumas questões sobre tensão superficial. Por outro lado, há alguns anos Tsallis propôs uma possível generalização da estatística de Boltzmann-Gibbs. Por sua

vez, esta generalização tem sido aplicada em muitas situações, por exemplo, difusão anômala, questões cosmológicas, alguns sistemas magnéticos etc. Estes exemplos mostram que conceitos baseados em uma entropia não extensiva são muito úteis na descrição de vários fenômenos. Ademais, é natural conjecturar que outras entropias possam ser muito convenientes ou mesmo necessárias para descrever mais profundamente muitas situações físicas. Assim, é muito importante obter as propriedades termostáticas que surgem de uma entropia genérica. Tratar desta questão é similar a investigar as propriedades gerais para um sistema Hamiltoniano independentemente da Hamiltoniana empregada. A proposta principal deste trabalho é a de mostrar e discutir algumas relações gerais para uma termostática genérica. Mais especificamente, a relação termodinâmica fundamental e a conexão entre o princípio de máxima entropia e o princípio de mínima energia são analisados em uma termostática genérica, usando o *ensemble* canônico. Neste contexto, é verificado que a relação e a conexão podem ocorrer em circunstâncias muito gerais. Ademais, a relação é aplicada em um caso não extensivo e a estabilidade da termostática de Tsallis é analisada.

† Endereço permanente

#### A desigualdade de Bogoliubov para a estatística de Tsallis

ERVIN KAMINSKI LENZI, ERNIO DOS SANTOS

MENDES†

CBPF

LUÍS CARLOS MALACARNE

UEM

No final da década passada, Tsallis (J. Stat. Phys. 52 (1988) 479) propôs, baseado em multifractais, uma entropia que generaliza a usual. Esta entropia apresenta várias características importantes. Em particular, ela tem um caráter não extensivo, que depende de um parâmetro, comumente denotado por  $q$ , sendo que a entropia usual é recuperada no limite  $q \rightarrow 1$ . Por sua vez, este caráter não extensivo desta entropia faz com que ela seja uma candidata a ser empregada em situações nas quais os estudos baseados na entropia usual não fornecem resultados satisfatórios. Neste sentido, tem sido surgido várias aplicações da entropia de Tsallis. Por exemplo, ela tem sido empregada no estudo da difusão anômala, de certas questões cosmológicas e de sistema magnéticos com interações de longo alcance. Paralelamente as aplicações citadas, tem havido um crescente interesse em analisar as questões formais relacionadas a entropia de Tsallis. Mais especificamente, é interessante saber como as principais conclusões oriundas da entropia usual podem ser generalizadas, quando esta

nova entropia vem a ser usada. Neste contexto, as generalizações que preservam sua estrutura, apesar de entropias distintas estarem sendo empregadas, ocupam uma posição de destaque. É justamente neste contexto que se encontra o presente trabalho. Mais precisamente, neste trabalho, é apresentada uma maneira de generalizar a desigualdade de Bogoliubov que mantém a sua forma usual, quando a entropia proposta por Tsallis é utilizada. Além disso, a utilização desta desigualdade é exemplificada através de uma aplicação simples. O exemplo apresentado, apesar de sua simplicidade, é suficiente para esclarecer como a desigualdade de Bogoliubov generalizada pode ser empregada em uma análise aproximada, quando a entropia de Tsallis é utilizada.

†Endereço permanente: UEM

#### Um Modelo de Crescimento de Câncer

SILVIO DA COSTA FERREIRA JUNIOR, MARCELO

LOBATO MARTINS

Departamento de Física da Universidade Federal de Viçosa

Um dos fenômenos mais agressivos em biologia é o crescimento de células cancerosas. Os tumores ou neoplasias são proliferações locais de clones celulares atípicos cuja reprodução foge do controle normal e que tendem para um tipo de crescimento autônomo e para a perda de diferenciação. Do ponto de vista funcional as células cancerosas apresentam diversas alterações (mutações) que derivam de um processo de evolução celular. Assim uma célula anormal ou transformada, inicialmente não maligna, deverá sofrer uma série de mutações até se tornar uma célula cancerosa. Cada etapa dessa evolução representa uma barreira fisiológica a ser superada pela célula e corresponde a um fenótipo ou tipo celular cada vez mais próximo da malignidade final. Neste Trabalho investigamos, através de simulações computacionais, um modelo de crescimento de câncer no qual serão considerados apenas dois tipos celulares: normal e canceroso. O tecido será representado por uma rede quadrada de lado  $L$  e condições de contorno periódicas. A condição inicial será sempre uma semente colocada no centro da rede. A regra de evolução é a seguinte: em cada passo de tempo todas as células do tumor escolhem, ao acaso, ou (i) se dividir, com uma probabilidade  $p_{div}$ , ou (ii) se mover na rede, com uma probabilidade  $p_{mov}$ , ou, finalmente, (iii) morrer, com uma probabilidade  $p_{del}$ . Em nossas simulações foram utilizadas redes de, tipicamente,  $L = 400$  e cerca de 100 amostras contendo  $N \simeq 10^4$  células cancerosas, nas médias estatísticas. As quantidades de interesse são o perímetro, o raio de giração, o tempo de indução e a rugosidade da superfície do tumor. Nossos resultados mostram que tais grandezas obedecem leis de potência em função do número de células cancerosas, e são comparados aos

obtidos para os modelos de Eden e de Williams e Bjerkness, limites particulares do nosso modelo.

### Leis de Escala Fractais no Crescimento de Células em Cultura

MARCELO LOBATO MARTINS, JOSÉ ARNALDO REDINZ

*Departamento de Física - Universidade Federal de Viçosa*  
MARCELO JOSÉ VILELA

*Departamento de Biologia Animal - Universidade Federal de Viçosa*

Para descrever os eventos aberrantes que permitem às células fugir do controle normal e gerar tumores, precisamos comparar as características do crescimento de células normais e transformadas. Neste contexto, os experimentos com culturas de células animais podem representar uma via importante para se obter respostas sobre os mecanismos que controlam a proliferação celular e, conseqüentemente, o próprio fenômeno neoplásico. Neste trabalho caracterizamos os padrões de crescimento de células MDCK (normais) e HN5 (carcinoma da língua humana) em experimentos de cultura. Neles, células são plaqueadas em placas de cultura cujos poços contêm inicialmente cerca de  $10^3$  células, sob condições ótimas de crescimento. Cada um destes poços é fotografado a intervalos regulares de 24 horas e as frequências dos diversos aglomerados de células presentes são medidas. Nossos resultados experimentais mostram que a função de distribuição de tamanhos de aglomerados para as células MDCK exibe dois regimes distintos em função do tempo de crescimento: um decrescimento exponencial e um decaimento em lei de potência. Já no caso das células HN5, essa função de distribuição exibe apenas um comportamento em lei de potência. Esses resultados sugerem a existência de mecanismos distintos de regulação para células normais e tumorais. Além disso apresentamos os resultados preliminares acerca da função de distribuição de aglomerados para um modelo simples de crescimento de células em cultura no qual são incluídos os seguintes aspectos: (i) Difusão dos fatores de crescimento celular (parácrinos e autócrinos), (ii) Movimento das células e (iii) Divisão celular. Neste modelo, a placa de cultura é representada por uma rede quadrada de lado  $L$  com condições de contorno fixas. Nessa rede são distribuídas inicialmente  $N_0 \ll L^2$  células que se dividem com uma probabilidade  $p$  e se movem na rede formando aglomerados rígidos ao se tocarem com outras células ou aglomerados presentes na rede. Em nossas simulações, foram utilizadas redes de, tipicamente,  $L = 1000$ ,  $N_0 = 1000$ , e cerca de 1000 amostras nas médias estatísticas para o cálculo da função de distribuição de tamanhos de aglomerados.

### INFLUÊNCIA DE ANARMONICIDADE NA EVOLUÇÃO IRREVERSÍVEL DE UM SISTEMA TERMODINÂMICO.

MARCELO DE SOUZA LIMA FATTORE, MÁRIO A. TENAN  
IFGW - UNICAMP

Um método muito utilizado no estudo de sistemas termodinâmicos dissipativos é o Método do Operador Estatístico de Não-equilíbrio (MOENE) [A. R. Vasconcellos, and R. Luzzi, Fortsch. Phys. **38**, 887 (1990)]. Neste trabalho investiga-se o comportamento de um sistema de osciladores anarmônicos independentes, em interação com um banho ideal (constituído por osciladores harmônicos). O potencial de interação sistema-banho é tomado como sendo bilinear nas variáveis do sistema e do banho [R. Zwanzig, in "Systems far From Equilibrium", Lecture Notes in Physics **132** (Springer-Verlag, Berlin, 1980), pp. 198-203]. Para a descrição do comportamento do sistema utilizada neste trabalho emprega-se a versão clássica do MOENE [M. A. Tenan, A. R. Vasconcellos, and R. Luzzi, Fortsch. Phys. **45**, 1 (1997)], obtendo-se as equações de evolução das energias dos osciladores, numa aproximação linear no potencial anarmônico. Com a solução dessas equações, é possível obter: (i) a relaxação do sistema em direção ao equilíbrio termodinâmico (quando inicialmente afastado dele), e (ii) a sua evolução para um estado estacionário, quando submetido a uma excitação harmônica externa. Em ambos os casos, calculam-se, também, a variação da entropia e a sua taxa de produção.

### Fractal characterization of the morphology of porous silicon by atomic force microscope

MAURÍCIO URBAN KLEINKE  
*Instituto de Física "Gleb Wataghin" UNICAMP*

Porous silicon (PS) has been actively studied after the first reports of strong room-temperature photoluminescence in the visible and near infrared regions. Porous silicon structures show different scaling laws when investigated by Raman spectroscopy, small angle x ray scattering and AC conductivity. The slope of the scaling laws can be related to its fractal dimension. A theoretical work modeling a three dimensional percolation lattice structure predicts a fractal dimension closed to 2.5. The complex pattern of the nanowires of PS can be related to their characteristic properties, such as conductivity, scattering, etc.. The best characterization of a complex self-similar surface as the one shown by PS is the fractal dimension. The topography of PS can be characterized by Atomic Force Microscope (AFM) images. In this work, the fractal dimension (obtained from AFM images) was analysed as a function of anodization current density.  $\mu$ 111 $\mu$  polished single-crystal wafers of p-type doped silicon, were etched in

a HF/ethanol bath using a EG&G PAR-273A potentiostat/galvanostat. The images were obtained by a Topometrix TS2000 SPM, in the AFM mode with tips of high ratio aspect from Park Instruments. The fractal dimension was estimated by measuring the perimeter ( $P$ ) and the area of voids ( $A$ ), and they are related by  $P \propto A^{FD/2}$ . For low current densities the calculated value of fractal dimension was between 2.5 and 2.6. When the current is increased to a few hundred mA/cm<sup>2</sup>, the fractal dimension decrease to a value close to 2.4, more characteristic of an electropolishing regime. The reported value of fractal dimension are close to both the theoretical and the values measured by Raman scattering.

### Expoentes Críticos e Criticalidade Auto-organizada do modelo de propagação do vírus *Herpes Simplex* (HSV)

GUSTAVO CAMELO NETO, SÉRGIO COUTINHO  
*Laboratório de Física Teórica e Computacional -  
Universidade Federal de Pernambuco*

Os expoentes críticos relacionados ao comportamento tipo lei de potência das distribuições do tamanho e do tempo de crescimento de úlceras formadas pelo vírus *Herpes Simplex* (HSV) foram calculados através de simulações de um modelo, tipo automato celular. Neste modelo dois tipos de células com distintos graus de resistência à infecção são considerados. Células ditas permissivas podem se contagiar se pelo menos um dos seus oito primeiros vizinhos, em uma rede quadrada, estiver contaminado enquanto que as células ditas resistentes carecem de pelo menos  $R$  ( $2 \leq R \leq 8$ ) vizinhos para se tornarem infectadas no próximo passo de tempo [1,2]. Várias simulações (da ordem de 100 eventos) foram realizadas em redes de tamanho  $L = 1000$  para os casos  $R = 2, 3, 4$ , no regime onde a razão entre a probabilidade de uma célula se infectar por processos de latência e a probabilidade de uma célula se regenerar for muito pequena (da ordem de  $1/L$ ). Neste regime, foi observado um comportamento do tipo lei de potência tanto para a distribuição espacial como para a distribuição temporal das úlceras, com fortes evidências [3] de um estado crítico auto-organizado. Foi observado, ainda, que os correspondentes expoentes variam com o grau de resistência  $R$  apresentando duas possíveis classes de universalidade para  $R = 1, 2$  e  $R = 3$  a  $8$ . O caso  $R = 1$  corresponde ao modelo para incêndios florestais reportado na literatura.

[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] G. Camelo Neto and Sérgio Coutinho, *Fractals* **4**, 113 (1996)

[3] B. Drossel, S. Clar and F. Schwabl, *Scaling laws and simulation results for the self-organized critical forest-fire model*, *Phys. Rev.* **E 50**, (1994), 1009; B. Drossel,

F. Schwabl, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 1629, (1992).

### Multifractal-like features of the paths probability distribution in the two-dimensional directed random walk

ROMUEL FIGUEIREDO MACHADO  
*UFMG*

Many physical processes of interest to the study of nonequilibrium phenomena and nonlinear physics lead to heterogeneous distributions such as the distribution of voltage across the different elements in a random resistor network in percolation, or the landing probability in a aggregate generated by the DLA process. These examples show how complicated and tangled such distributions can be. However, one can obtain some information about these distributions by means of the concept of multifractality, which breaks down the heterogeneous distribution in several new ones, each one characterized by its own "strength singularity"  $\alpha$  and fractal dimension  $f(\alpha)$ . This kind of analysis, which gave results in excellent agreement with the experimental ones, was successfully applied to the study of turbulent flow of kinetic energy in the inertial range. In this work, we intend to apply the tool of multifractals to the problem of a directed random walk in a two-dimensional square lattice. More precisely, we are interested in characterizing the probability distribution for the possible paths the walker may follow when it performs a  $t$ -step walk. We consider the two-dimensional directed random walk with probabilities  $p_x$  and  $p_y$  assigned to steps in  $x$  and  $y$ -directions respectively and analyse the probability distribution for the possible  $2^t$  paths the walker may follow when it performs a  $t$ -step walk. This distribution is multifractal, since its  $q$ th moment has the typical power law behaviour of multifractal distributions unless  $p_x = p_y = 1/2$ . If the values of  $p_x$  and  $p_y$  are allowed to fluctuate around their average values  $\langle p_x \rangle$  and  $\langle p_y \rangle$  throughout the lattice, the  $q$ th moment averaged over the possible realizations of the lattice exhibits the multifractal power law behaviour even when  $\langle p_x \rangle = \langle p_y \rangle = 1/2$ . The existence of negative fractal dimensions is also analysed.

### TEMPO DE COBERTURA E COMPETIÇÃO ENTRE CAMINHANTES DE LEVY

ALLAN DE MEDEIROS MARTINS, SAMUEL  
RODRIGUES GOMES JÚNIOR, LIACIR DOS SANTOS  
LUCENA  
*UFRN*

O estudo sobre difusão de partículas é, ainda hoje, uma análise de casos particulares devido a limitações

na teoria envolvida. No estudo desse tipo de fenômeno uma das maneiras de obter resultados práticos é através de simulações em computador. Nesse tipo de procedimento faz-se uso de um modelo de caminhantes aleatórios, para o qual a transformada de Fourier da distribuição de probabilidades do tamanho do passo é  $P(k) = N_k \exp(-ak|k|^\alpha)$ . Para  $\alpha = 2$  a distribuição é uma gaussiana, equivalente ao modelo da caminhada aleatória simples, onde o caminhante dá passos de igual tamanho em qualquer das direções possíveis. Para o caso em que  $\alpha \neq 2$  obtemos outras distribuições. Estamos interessados nos sistemas onde a distribuição de passos não seja gaussiana, ou seja, o caminhante pode dar passos de tamanhos bastante variados, como nos vôos de Levy, caso em que não existe uma solução fechada para a transformada de Fourier da probabilidade de passos. Obtivemos leis de escala para o tempo de cobertura em uma dimensão para modelos de caminhantes que não obedecem ao modelo de caminhada aleatória simples, ou seja,  $\alpha \neq 2$ . Os resultados obtidos para o caso particular com caminhantes aleatórios estão de acordo com os resultados existentes. Inicialmente trabalhamos com 1 caminhante de Levy em redes unidimensionais (condições de contorno periódicas) de tamanhos variando de 3 a 600 sítios, com 300 realizações para cada tamanho de rede. Posteriormente aumentamos o número de caminhantes para analisar alguma mudança no comportamento difusivo do sistema. Também introduzimos uma diferenciação entre os caminhantes, atribuindo a cada um deles uma cor e medimos a dimensão fractal da interface formada, em função da distribuição inicial de caminhantes.

### THE ONSET OF LEUKEMIA AT THE EDGE OF CHAOS

MARCIO ARGOLLO FERREIRA DE MENEZES, RITA MARIA ZORZENON DOS SANTOS  
*Universidade Federal Fluminense*

There are a number of chronic and acute diseases in which the primary symptom is the altered periodicity of some observable; for example, the fluctuations in peripheral white blood cell counts in chronic granulocytic leukemia (CGL). In this work we study a model proposed by Mackey and Glass [1] based on a first-order nonlinear differential equation describing the physiological control associated to hematopoiesis regulation. They associate the onset of leukemia with bifurcations in the dynamics of the model. Here we present the bifurcation diagram of the model as a function of the time delay parameter, and show that according to their model the onset of leukemia is related to the edge of chaos. We also introduce modifications in order to describe the qualitative behaviour experimentally observed in the

peripheral white blood cell counts of CGL patients.  
[1] Mackey, M.C., and Glass, L., *Science* 197, 287-289 (1977).

### BLOCOMOTOS; EFEITOS DE INTERFACE, INTERMITÊNCIA E MEMÓRIA

VALDEMIRO DA PAZ BRITO, ALEXANDRE GUTEMBERG DA COSTA MOURA

*UFPI*

MARCELO ANDRADE DE FIGUEIRAS GOMES

*UFPE*

Mostra-se que a distribuição acumulada de comprimento de deslizamento ( $\lambda$ ) de blocos sólidos-blocos sobre uma calha inclinada de alumínio, em resposta a pequenas perturbações externas controladas, obedece a lei de escala  $N \sim \lambda^{-\beta}$ , com  $\beta = 0,45 \pm 0,05$ , para interface bloco-calha unidimensional, e  $\beta = 0,75 \pm 0,10$ , para interface bidimensional. Essas leis de escalas são mais definidas que as obtidas com experimentos similares envolvendo avalanches de líquidos e materiais granulares. Os expoentes  $\beta$  são próximos do valor de Gutenberg-Richter relacionado à distribuição de terremotos. As leis de potência aqui mencionadas se referem ao regime de inclinações não muito menores que o ângulo de repouso. O valor numérico da variação relativa de  $\beta$  com a dimensionalidade está de acordo com a previsão de alguns modelos de criticalidade auto-organizada como o de Chen et al [Phys. Rev. A 43 (1989) 625]. Acredita-se que os blocos estejam na mesma classe de universalidade de processos de microfaturas observados recentemente por Cannelli et al [Phys. Rev. Lett. 70 (1993) 3923] e Petri et al [Phys. Rev. Lett. 73 (1994) 3423]. Nos experimentos com blocos, as microfaturas ocorreriam na interface rugosa entre os dois sólidos antes dos deslizamentos. Para ângulos menores, mais afastados do ângulo de repouso, a distribuição de deslizamentos é intermitente (i.e.: um número variável de perturbações ocorre antes de cada deslizamento). Neste regime, o tempo de estase médio (i.e.: o tempo entre dois blocos sucessivos) escala com o comprimento  $L$  do bloco deslizante como  $\tau \sim L^{-\alpha}$ , com  $\alpha = 0,56 \pm 0,04$ , em concordância quase perfeita com a situação correspondente a terremotos. Ou seja, blocos maiores são sujeitos a deslizamentos mais frequentes que os menores. Análise da série temporal dos blocos indica que a atividade dinâmica deles se concentra num suporte temporal fractal de dimensão  $D \approx 0,85$  e que o processo de intermitência é acompanhado com uma diminuição da persistência dos deslizamentos, a qual é forte para inclinações da calha mais próximas ao ângulo de repouso.

## FÍSICA ESTATÍSTICA (Sistemas Complexos) – 13/06/97

### PATTERN FORMATION IN GLOBALLY COUPLED OSCILLATORS

GUY DEWEL, DIANA LIMA

*Center for Nonlinear Phenomena and Complex Systems - Université Libre de Bruxelles*

Parametric forcing has proved to be a major source of instability in many areas of physical sciences. Similarly it has been shown recently that intrinsic parametric instabilities can give rise to a large variety of spatiotemporal behaviors in a distributed oscillatory system in the presence of global delayed feedback. This mechanism could be responsible for the onset of non-trivial pattern observed during catalytic reactions on well-defined planes. In this case, the long range synchronization mechanism is supplied by the variations of the partial pressures in the gas phase. To describe these instabilities, the complex Ginzburg-Landau equation (CGLE) has been generalized to include a term describing the global coupling. Numerical integrations of this model have indeed produced in the oscillatory regime modulated waves and cellular structures in agreement with the experimental results. This self-induced mechanism might also find applications in the large variety of oscillatory chemical and biological systems which present both diffusive and global coupling. It is the main purpose of this lecture to discuss the selection of patterns generated by these instabilities.

### COMPUTER SIMULATION OF THERMAL SPRAY DEPOSITION

AMÉRICO TRISTÃO BERNARDES, FERNANDO GABRIEL

*Universidade Federal de Ouro Preto*

JOSÉ ROBERTO T. BRANCO

*Fundação Centro Tecnológico de Minas Gerais*

S. ARAÚJO

*Universidade Federal de Ouro Preto*

The deposition of powder on substrates is actually an important field of research. This process has several different applications, from chemical protection to preparation of specific materials, like those required in the health materials industry with the aim of bone substitution. This class of materials can be obtained by coating rigid substrates with biocompatible substances. In this case, it is generally used the deposition by thermal spray, as laser or plasma spray, for instance. The powder is heated around the melting point and accelerated in the substrate direction. Coats with different morphological features can be obtained depending on the external parameters: spray temperature, particles heat conductivity, particles mean size etc. By varying the external parameters one can obtain a variation of 100 times in certain mechanical properties. Thus, computer simulations can be a useful tool allowing a qualitative description of the process. In this work we show our preliminary results obtained on a model that simulates the thermal deposition of particles on a substrate. The substrate is kept at low temperatures while the particles are thrown at higher temperatures. They collide with the substrate while they are cooling. After some time they become rigid and the acquired deformation is considered as permanent. A lattice system inspired on

those models created to describe the falling/sliding of a drop of water were developed. The dynamical evolution of the roughness exponent is obtained and compared with those obtained in another models. The porosity - defined as the unoccupied volume into the deposit - is calculated as a function of the temperature.

### UM MODELO DINÂMICO DISSIPATIVO NA REDE PARA FRAGMENTAÇÃO NUCLEAR

JORGE SIMÕES DE SÁ MARTINS, PAULO MURILO DE CASTRO OLIVEIRA

*UFF*

Desde os experimentos pioneiros de Waddington e Finn, no início da década de 80, o debate sobre a suposta criticalidade observada através do decaimento em lei de potência da quantidade de fragmentos de massa intermediária tem dado origem ao aparecimento de diversos modelos teóricos explicativos. O mais bem sucedido até o momento tem sido um modelo de percolação por ligações em uma rede cúbica, apresentado, entre outros, por X. Campi. O caráter puramente geométrico deste modelo é, no entanto, algo incômodo. Neste trabalho, apresentamos um modelo alternativo, envolvendo uma regra dinâmica de evolução. Partindo do pressuposto de estarmos em presença de fenômeno nas vizinhanças da criticalidade, onde a especificidade das interações de curto alcance tem papel secundário frente a um mecanismo de propagação de ordem de longo alcance, escolhemos uma Hamiltoniana de interação simples - Ising, em 3 dimensões - que realiza uma mímica da energia de coesão superficial através da extensão das interações até segundos vizinhos. A partir de uma configuração

inicial, com o núcleo coeso representado como um gás na rede e caracterizado por uma energia de excitação definida, o sistema segue uma regra dinâmica de Metropolis, com conservação de massa. Eventualmente, um aglomerado de nucleons se destaca do núcleo original, constituindo-se num fragmento, cuja massa é então contabilizada, e dissipando energia. Os resultados das simulações reproduzem os experimentos e coincidem com os obtidos através do modelo percolativo.

### DESCRIÇÃO DE FENÔMENOS PLUVIOMÉTRICOS ATRAVÉS DE UM MODELO DE CRITICALIDADE AUTO-ORGANIZADA

SUANI TAVARES RUBIM DE PINHO, ROBERTO  
FERNANDES SILVA ANDRADE  
*Universidade Federal da Bahia*

Investigamos a hipótese de que as precipitações pluviométricas constituem em mais uma manifestação da criticalidade auto-organizada. A análise de um conjunto significativo de séries temporais de estações meteorológicas em diferentes regiões do mundo indicam a existência de leis de potência para as distribuições de intensidades pluviométricas e de intervalos de tempo entre precipitações. Propusemos e simulamos um modelo tipo 'pilha de areia' de altura crítica para descrever de maneira simples o processo de nucleação das gotículas na nuvem e a conseqüente eliminação das gotas em forma de chuva. A variável do autômato celular corresponde à massa de água associada a cada sítio da rede bidimensional, cuja borda inferior é aberta de modo a garantir a conservação da massa. Em cada iteração, um sítio é perturbado aleatoriamente, propiciando o acúmulo de mais gotículas na rede. Quando a massa de água ultrapassa a massa crítica em algum dos sítios da rede, o processo de avalanche é deflagrado. Constatamos que a estatística das avalanches internas, que descreve o processo dentro da nuvem, obedece a uma lei de potência. Quanto às avalanches externas, resultados registram um comportamento que não é tipicamente exponencial nem polinomial. No entanto, em diversos modelos de pilhas de areia, a estatística das avalanches externas não fornece informação suficiente para descrever a dissipação de energia, característica da criticalidade auto-organizada. Estamos fazendo diversas variações no nosso modelo a fim de introduzir aspectos físicos relevantes ao sistema, e os resultados têm evidenciado a robustez do modelo em relação a tais variações para diversos tamanhos de rede.

### RANDOM WALKS EM FRACTAIS E A RELAÇÃO DE ESCALA $D_s = 2D_F/D_w$

FÁBIO D. A. AARÃO REIS  
*Universidade Federal Fluminense*

A relação de escala de Alexander e Orbach  $D_s = 2D_F/D_w$ , onde  $D_s$  é a dimensão espectral das vibrações da rede,  $D_F$  é a sua dimensão fractal e  $D_w$  é a dimensão dos random walks na rede, é fundamental para a modelagem de estruturas fractais reais. Ela foi proposta a partir de um mapeamento do problema dos random walks no problema de vibrações da rede, quando  $D_s < 2$ . Alguns trabalhos posteriores sugeriram que ela não era válida em diversos fractais, em especial naqueles com estruturas ramificadas do tipo árvore. Simulações de random walks foram feitas em estágios finitos da construção de fractais regulares (Sierpinski carpets) e estatísticos (árvores de Eden em duas e três dimensões), de onde estimamos o deslocamento quadrático médio  $\langle R_N^2 \rangle$  e o número médio de sítios distintos visitados  $\langle S_N \rangle$  por random walks de  $N$  passos. Estes dados foram analisados usando-se técnicas de finite-size scaling (J. Phys. **A28**, 6277 (1995)). Obtivemos estimativas precisas de  $D_w$  e, estendendo as técnicas de análise desenvolvidas anteriormente, mostramos que nestes fractais é válida a relação  $\langle S_N \rangle \sim N^{D_F/D_w} / (\log N)^\alpha$ , onde  $\alpha$  é um expoente positivo (Phys. Lett. **A214**, 239 (1996); Phys. Rev. **E54**, R3079 (1996)). Observa-se que  $\alpha$  varia entre 0.1 e 0.5 para os carpets, dependendo de  $D_F$  e da lacunaridade, e é próximo de 1 para as árvores de Eden. Estes resultados confirmam a relação de escala de Alexander e Orbach, com correções logarítmicas semelhantes às das redes bidimensionais, em que  $\alpha = 1$ . Além disso, abre-se a questão da origem destas correções no problema dos random walks em fractais.

### DIFUSÃO ANÔMALA DE REDES REGULARES E FRACTAIS

PEDRO LICINIO, ALVARO VIANNA TEIXEIRA  
*Dep. de Física - ICEx - UFMG - C.P.702 - 30.161-970  
Belo Horizonte - MG.*

Uma rede é definida como um gráfico de ligação entre partículas. Redes com topologias variadas podem ser usadas como modelos de polímeros, membranas e geis, por exemplo. Investigamos as propriedades dinâmicas de redes generalizadas, imersas em um solvente. O solvente dissipa os fonons e fractons que a rede livre sustentaria, levando o problema ao contexto microscópico da difusão Browniana ou, ao nível macroscópico, das relaxações visco-elásticas do meio. Usando o formalismo de Rouse-Langevin obtivemos um comportamento anômalo para a difusão de redes regulares, com uma topologia crítica (difusão logarítmica) para superfícies. No regime super-crítico, a difusão se torna espacialmente limitada, mas ainda obedece a princípios de escala. Utilizamos ainda a técnica de dinâmica Browniana para observar a dinâmica de redes fractais como as redes de Sierpinski e de percolação. Neste caso mostramos que as distribuições de probabilidade de deslocamento dos nós das redes ainda só

gaussianas. Este importante resultado nos permite calcular os fatores de estrutura dinâmicos correspondentes à auto-difusão anômala para redes generalizadas, uma grandeza em geral acessível à técnicas de medida da física experimental como espalhamento de neutrons

(eco de spins) ou de luz (correlação de fótons).  
Apoio: FAPEMIG.

---

## FÍSICA ESTATÍSTICA (Redes Neurais)

### FÍSICA ESTATÍSTICA (Redes Neurais) – 11/06/97

#### Aprendizado supervisionado ótimo usando um professor e um livro.

EMERSON LUÍS DE SANTA HELENA, MARCO  
AURÉLIO IDIART  
UFRGS

O problema de aprendizado supervisionado de uma regra por um perceptron booleano simples que usa a regra de Hebb para ajustar o seu vetor sináptico é estudado em um contexto mais rico visando a sua otimização. No caso mais simples o perceptron aluno, representado pelo vetor sináptico  $J$ , recebe padrões binários de um livro, cujo vetor sináptico é  $B$ . O aprendizado da regra ( $B$  dado a priori) é feito através do uso da regra de Hebb para ajustar o vetor sináptico do aluno ao livro. A medida do aprendizado é executada através do cálculo do erro de generalização, que nada mais é do que produto escalar de  $B$  por  $J$ . O problema é sofisticado através da introdução de um professor, representado por  $T$ , que é um perceptron booleano igual ao aluno que recebe exemplos apenas do livro, e usa a regra de Hebb para aprender o vetor sináptico do livro. O vetor sináptico do professor,  $T$ , é escrito como uma soma de padrões vindos do livro. O vetor sináptico do aluno é constituído por soma de exemplos (padrões) vindos do livro e do professor com diferentes pesos, que indicam a atenção do aluno. Os padrões fornecidos pelo professor ao aluno podem ser iguais ou diferentes daqueles fornecidos pelo livro ao professor. Nos demonstramos que, com a escolha correta do coeficiente de atenção, a presença do perceptron professor aumenta a taxa de aprendizado do aluno que, ao final, tem um desempenho melhor que o próprio professor.

#### Propriedades da Generalização do Perceptron Reversed-Wedge

ROBERTA SIMONETTI, NESTOR CATICHA  
IFUSP  
CRISTIANO RODRIGUES DE MATTOS  
UNESP - Guaratinguetá

Neste trabalho investigamos o aprendizado supervisionado *on-line* de um tipo de perceptron, conhecido na literatura como *perceptron reversed wedge*, uma rede neural com uma camada e função de transferência não monotônica. Nosso interesse se concentra nas habilidades de generalização desta rede. Trata-se de um perceptron booleano capaz de implementar regras não linearmente separáveis e, portanto, constitui uma rede,

razoavelmente simples com uma riqueza de comportamentos e pode servir de elemento para construção de redes mais complexas. Estudamos os processos de aprendizagem que ocorrem na presença de ruído e que podem ser parametrizados por uma única quantidade: o nível de ruído. Consideramos duas fontes de ruído. A primeira, conhecida como *ruído multiplicativo*, altera diretamente a saída do professor. A segunda afeta as conexões sinápticas do professor e neste caso o ruído é conhecido como *aditivo*. A aprendizagem *on-line* é um processo dinâmico estocástico discreto, descrito por um conjunto de equações acopladas, onde a cada exemplo atualiza-se o vetor sináptico da rede aluno, com o objetivo de diminuir o erro de generalização, que é a probabilidade da rede aluno acertar um novo exemplo, que aumenta à medida que cresce sua correlação com o professor. Consideramos o caso no qual é desconhecido o nível de ruído, e estudamos a influência da utilização de uma estimativa deste valor sobre as curvas de aprendizado. A análise dos resultados é feita através do que chamamos de *diagrama de robustez*. Entre as propriedades mais interessantes encontradas, destacamos a universalidade do diagrama de robustez para ruído multiplicativo, uma vez que é exatamente o mesmo para a máquina paridade e comitê com estrutura de árvore. No caso de ruído aditivo essa universalidade não se verifica, já que o diagrama obtido depende da arquitetura da rede em questão.

#### APRENDIZAGEM E GENERALIZAÇÃO EM REDES MULTICAMADAS COM INTERAÇÕES HETERO-SINÁPTICAS

PAULO ROBERTO KREBS  
Instituto de Física e Matemática - UFPEL  
WALTER KARL THEUMANN  
Instituto de Física - UFRGS

Redes de neurônios multicamadas são sistemas que, em princípio, podem implementar qualquer associação entre uma camada de entrada e uma camada de saída. Consideramos uma rede com  $N$  unidades (neurônios) binárias de entrada e uma unidade binária de saída. Entre estas camadas existe uma cadeia ordenada de unidades escondidas, cada uma das quais conecta-se diretamente à camada de entrada e à unidade escondida precedente. Além das conexões homo-sinápticas, introduzimos conexões hetero-sinápticas entre as unidades de entrada e as unidades escondidas. O algoritmo de aprendizagem utilizado é uma variação do algoritmo do perceptron conhecido como "pocket algorithm". Este consiste em manter uma cópia do conjunto de conexões sinápticas que produz o menor número de erros durante a adição sucessiva de unidades escondidas até que a

associação proposta seja implementada. Este é, portanto, um algoritmo cuja arquitetura é variável. Um dos principais problemas associado aos algoritmos de aprendizagem para arquiteturas variáveis é assegurar a convergência em um tempo finito. Para a arquitetura utilizada, provamos um teorema que assegura a convergência do algoritmo tanto para o caso em que as conexões hetero-sinápticas envolvem todas as unidades da camada de entrada quanto para o caso em que apenas duas unidades da camada de entrada estejam conectadas por meio de sinapses hetero-sinápticas. Observamos que a introdução das hetero-sinapses reduziu drasticamente o número médio de unidades escondidas (camadas) necessárias para implementar a associação considerada. Além disso, também observamos uma ligeira melhora na eficiência de generalização da rede.

### APRENDIZAGEM EM PERCÉPTRONS MULTI-INTERAGENTES COM PESOS CORRELACIONADOS

EVALDO BOTELHO

*Universidade Federal de Santa Catarina*

Consideramos o problema de aprendizagem em rede neurais *feed-forward* multi-interagentes (perceptrons) com pesos correlacionados. Dada uma regra não-linearmente separável, podemos expressá-la em termos

de uma expansão multilinear, onde os pesos de ordens diferentes são correlacionados entre si. Em particular a regra conhecida como *reversed-wedge problem*, pode ser escrita como uma expansão multilinear contendo termos de primeira e terceira ordens, onde os pesos de terceira ordem podem ser ajustados a partir dos pesos de primeira ordem. Esta regra pode ser implementada numa rede neural *feed-forward* com sinapses de primeira e terceira ordens. Um perceptron com arquitetura idêntica (sinapses de primeira e terceira ordens) é então construído a partir de um conjunto de  $N$  pesos sinápticos independentes, onde cada um destes pesos sinápticos é ajustado a partir de um conjunto de  $P$  exemplos entrada-saída. Aplicando técnicas de mecânica estatística desenvolvidas para o problema de aprendizagem em perceptrons, em particular a aproximação *annealed*, ou usando uma regra de Hebb adaptada para perceptrons com saídas contínuas, obtemos que as curvas de erro de generalização caem assintoticamente a zero com a razão  $\alpha = P/N$  entre o número de exemplos aprendidos e o número total de pesos sinápticos independentes da rede. Os resultados analíticos obtidos estão em excelente acordo com as simulações numéricas.

# MAGNETISMO E MATERIAIS MAGNÉTICOS (Modelos Teóricos e Cálculos de Parâmetros)

## MAGNETISMO E MATERIAIS MAGNÉTICOS (Magnetismo e Materiais Magnéticos I) - 11/06/97

### PROPRIEDADES FÍSICAS PRÓXIMAS A UM PONTO CRÍTICO QUÂNTICO MUCIO AMADO CONTINENTINO UFF

Existe uma variedade de materiais que se encontram próximos a um ponto crítico quântico (PCQ) ou que podem ser levados a tal condição por dopagem ou sintonizando-se a pressão aplicada. Entre estes sistemas encontramos férmions pesados e isolantes de Kondo. No primeiro caso, em geral compostos envolvendo elementos com uma camada  $f$  instável como  $Ce$ ,  $Yb$  e  $U$ , eles encontram-se próximos a uma instabilidade magnética. No segundo de uma transição metal-isolante como indicado pelo pequeno gap medido, por exemplo, nas propriedades de transporte. As propriedades físicas destes sistemas são determinadas pela sua proximidade do ponto crítico em temperatura nula e pelos expoentes críticos associados a este ponto. Uma característica fundamental destes sistemas é que seu comportamento estático esta indissolúvelmente ligado a sua dinâmica. Isto se manifesta, por exemplo, na lei de hiperescala modificada,  $2 - \alpha = \nu(d + z)$  onde  $\nu$  é o expoente do comprimento de correlação,  $z$  o expoente dinâmico e  $\alpha$  é definido tal que a parte singular da densidade de energia livre em  $T = 0$  é dada por  $f \propto |\delta|^{2-\alpha}$ . O parâmetro  $\delta$  mede a distância ao ponto crítico e pode ser variado por pressão ou dopagem. Em particular sistemas metálicos que estão exatamente na condição de criticalidade,  $\delta = 0$ , apresentam uma série de propriedades anômalas, como comportamento não-líquido de Fermi, que iremos discutir. Mostraremos também que a proximidade do PCQ introduz novas temperaturas características no sistema como, por exemplo, a temperatura de coerência,  $T_c \propto |\delta|^{\nu z}$  no lado não-crítico do diagrama de fases. No caso dos férmions pesados esta temperatura indica a passagem, para  $T \ll T_c$ , a um estado líquido de Fermi com parâmetros renormalizados (massa efetiva aumentada, susceptibilidade magnética aumentada, etc.).

#### CRITICAL EXPONENTS OF METAL INSULATOR TRANSITION IN METALLIC SYSTEMS: A INTEGRAL FUNCTIONAL APPROACH

MARCUS VINICIUS TOVAR COSTA, AMÓS TROPER

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF)*

NILSON ANTUNES DE OLIVEIRA

*Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ)*

GLORIA MIGUEL JAPIASSÚ

*Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ)*

MUCIO AMADO CONTINENTINO

*Universidade Federal Fluminense (UFF)*

We present a theory to describe the hybridization induced metal-insulator transition as function of applied pressure and temperature. Our model is characterized by two overlapping bands: the  $f$ -like one and with large density of states and the  $d$ -like one- wide and with small density of states. The  $f$ -electrons have weak mobility, associated with a localized wave packet and consequently with a narrow band. We use the procedure em-

ployed by Zubarev within the framework of the Green's function method and present an analytical expression for the energies of the branches of the quasiparticles of the system, the densities of states and the hybridization gap. We treat the electronic correlations in this two-band model using a functional integral approach in the static approximation. From the two particle Green's function we also obtain a renormalized hybridization gap<sup>1</sup>, which gives rise to a critical value of the effective hybridization term at  $T = 0$ . We obtain the equation for the critical line in the temperature versus pressure phase diagram and the critical exponent characterizing the vanishing of the gap at the metal-insulator transition. We compare our results with those obtained using an Anderson lattice<sup>2</sup> and with experimental data mainly in intermediate valence compounds.

<sup>1</sup> M. A. Continentino, G. M. Japiassú and A. Troper, *J. Appl. Phys.* **79**, 6345 (1996).

<sup>2</sup> H. Ishikawa, *Phys. Rev. B* **28**, 5643 (1983).

**Propriedades Magnéticas de Warwickitas**

R. B. GUIMARÃES, J. C. FERNANDES, M. A.

CONTINENTINO

*Instituto de Física - UFF*

H. A. BORGES

*Departamento de Física - PUCRJ*C. S. MOURA, J. B. M. DA CUNHA, C. A. DOS  
SANTOS*Instituto de Física - UFRGS*

As warwickitas são minerais com a forma geral  $M^{2+}M^{3+}OBO_3$  tendo sido muito estudada nos últimos anos. Estes sistemas possuem estruturas na forma de tiras ao longo do eixo  $c$ . Além de sua característica unidimensional, as warwickitas compõem sistemas naturalmente desordenados. Apresentamos um estudo das propriedades magnéticas de uma série de warwickitas contendo diferentes metais de transição. Foram realizadas medidas Mössbauer e susceptibilidade AC na faixa de temperatura de 4.2 K a 300 K em amostras de apenas uma fase caracterizadas por difração de raios-x. Em todos os casos, observamos uma lei de Curie-Weiss em altas temperaturas, com uma intersecção negativa, indicando interações antiferromagnéticas. Ao baixarmos a temperatura até um valor típico, toma lugar um regime de flutuação abaixo da qual as susceptibilidades são descritas por uma lei de potência característica do "random exchange Heisenberg antiferromagnetic chain" (REHAC). Com excesso de Mg-TiOBO<sub>3</sub>, sempre observamos transição de spin-glass a temperaturas suficientemente baixas. O acoplamento magnético pode se dar entre os momentos das diferentes tiras ou entre os momentos dos átomos em uma mesma tira. Acoplamentos magnéticos devido à sobreposição d-d e interação de supertroca ao mesmo tempo que a localização aleatória dos cátions no interior das tiras dão origem ao comportamento REHAC observado a temperaturas suficientemente altas nas warwickitas. A passagem para o comportamento tridimensional que é associado com a transição de spin-glass é devida às interações de supertroca entre os cátions de diferentes tiras.

**Correlações eletrônicas em cadeias magnéticas inomogêneas**

THEREZA CRISTINA DE LACERDA PAIVA, RAIMUNDO

ROCHA DOS SANTOS

UFF

Nas duas últimas décadas, o desenvolvimento de diversas técnicas de deposição deu origem a uma nova classe de materiais, genericamente chamados de heteroestruturas. Em particular, sistemas feitos de camadas muito finas (em alguns casos com apenas alguns átomos de largura) de diferentes materiais foram crescidos. Se a estrutura de camadas é periódica o sistema é conhecido como superrede. Superredes formadas por metais de transição magnéticos separadas por espaçadores

metálicos não-magnéticos apresentam fenômenos novos e interessantes como a oscilação do acoplamento de troca entre as camadas magnéticas à medida que a largura da camada magnética ou do espaçador é variada. A superrede unidimensional considerada consiste de um arranjo periódico de  $L_U$  sítios ("camadas") nos quais a interação é repulsiva seguidos por  $L_0$  sítios livres (i.e.,  $U = 0$ ). As correlações eletrônicas são tratadas não-perturbativamente por meio de diagonalização via método de Lanczos para sistemas finitos. O estudo do sistema unidimensional permite testar a influência das correlações eletrônicas ao longo da direção de crescimento da superrede, analisando o papel da largura da camada magnética e do espaçador.

Resultados para a banda semi-cheia mostram que alguns arranjos dão origem a uma forma fraca de frustração que destrói as correlações de spin (SDW) que estariam presentes no sistema homogêneo. Por outro lado, correlações SDW aparecem em alguns casos acima da banda semi-cheia, característica essa ausente no sistema homogêneo correspondente. Abaixo da banda semi-cheia, os máximos do momento local são transferidos dos sítios repulsivos para os sítios livres para quase todos os arranjos. O pico do fator de estrutura magnética também é deslocado de  $q = \pi$  para o arranjo dimerizado ( $L_U = L_0 = 1$ ) para  $\rho = 1/3$  e  $5/3$ . Para  $\rho = 1/3$  encontramos ainda arranjos que têm sua distribuição de momentos locais drasticamente alterada quando o valor da repulsão coulombiana ( $U$ ) é modificado.

**SYNTHESIS AND BIREFRINGENCE STUDIES ON THE NEW MOLECULAR MAGNET  $Na_2Co_2[Cu(opba)]_3 \cdot 5DMSO \cdot 6H_2O$** LUIZ CLÁUDIO MEIRA BELO, ULISSES AZEVEDO  
LEITÃO*Depto. Física - ICEx - Univ. Federal de Minas Gerais*

HUMBERTO OSÓRIO STUMPF

*Depto. Química - ICEx - Univ. Federal de Minas Gerais*

New molecular-based magnetic materials are of interest due to their potential technological applications. We report the synthesis of a new molecular-based magnet  $Na_2Co_2[Cu(opba)]_3 \cdot 5DMSO \cdot 6H_2O$  and its characterization by optical measurements. In this formula above, *opba* stands for orthophenylenebis(oxamato) and *DMSO* for dimethyl sulfoxide. In this class of compounds, a graphite-type hexagonal structure has the  $Co^{2+}$  ions at each corner and  $Cu^{2+}$  ions at the middle of each edge of the almost planar hexagons. We carried out birefringence measurements versus the temperature using the Soleil-Babinet Compensator method on crystalline samples for both ac- and ab-plane. No birefringence signal is observed in the ab-plane within the

temperature range 5K to 300K . The ordering temperature is well determined by an anomaly present in the ac-plane temperature dependence of the birefringence at  $T_C = 68K$  . These results strongly indicated that the magnetic moment order parallel to the c-axes and the magnetic phase transition does not break the uniaxial symmetry of the disordered phase. This seems to be due to the strong single-ion anisotropy of the  $Co^{2+}$  ions in this compound.

I. H. O. Stumpf, L. Ouahab, Y. Pei, D. Grandjean and O. Kahn, Science 261(1993) 447

Work supported by the agencies FAPEMIG, CNPq and FINEP.

### QUANTUM TUNNELING AND MAGNETIC RELAXATION OBSERVED IN $Mn_{12}$ BENZOATE

ÂNGELO MÁRCIO DE SOUZA GOMES, MIGUEL ALEXANDRE NOVAK, WALTER SYDNEY DUTRA FOLLY, WALLACE DE CASTRO NUNES  
UFRJ

We present evidences of quantum tunneling effects of magnetization in the superparamagnetic compound  $Mn_{12}$ Bezoate similar to interesting results on  $Mn_{12}$  Acetate. This cluster is characterized by a lower symmetry and presenting a high total spin  $S=9$  at low temperatures with an anisotropy energy barrier of 70 K separating the states of magnetization in zero field. This compound was investigated by Ac susceptibility and specific heat measurements. In zero field, the spin lattice relaxation time determined from the maxima of the out of phase susceptibility, which follows an Arrhenius law  $\tau = \tau_0 \exp(\Delta E/k_b T)$  with  $\Delta E/k_b = 70.4$  K and  $\tau_0 = 8.2 \times 10^{-9}$  s. Blocking effects of the magnetic dynamics was also observed both by specific heat and magnetization. In an external magnetic field  $\tau$  increases instead of decreasing, and the real and imaginary parts of the susceptibility present anomalies at 0.5 T attributed to thermally activated quantum resonant tunneling of the cluster magnetization. From the analysis of  $\chi$  versus H plot, it was possible to determine the values of the field, from zero to 2 T, at which level crossing occurs by the increase of quantum tunnelling rate. Specific heat measurements in applied field show the blocking effect of the magnetization in the time scale of the measurements. A different behavior at higher temperatures indicates that this cluster is more complex than as  $Mn_{12}$ Acetate. The magnetic and lattice contribution could not be separated from the total specific heat due to inexistence of non magnetic compounds with the same structure as  $Mn_{12}$ Benzoate.

### MAGNETISMO E MATERIAIS MAGNÉTICOS (Magnetismo e Materiais Magnéticos I) - 11/06/97

#### WEAK-FERROMAGNETISM AND RAMAN-SCATTERING IN $Eu_{2-x}Pr_xCuO_4$

PASCOAL J. G. PAGLIUSO, EDUARDO GRANADO, JOSÉ A. SANJURJO, CARLOS RETTORI, IRIS TORRIANI

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

DEAN RAO, SAUL B. OSEROFF

San Diego State University, San Diego, CA 92182, U.S.A.

JOHN SARRAO, ZACK FISK

National High Magnetic Field Laboratory, Florida State University, Tallahassee, FL 32306, U.S.A.

Magnetization and Raman experiments performed in single crystals of  $Eu_{2-x}Pr_xCuO_4$  ( $0 \lesssim x \lesssim 1$ ) are interpreted in terms of local distortions within the  $CuO_2$  planes. We find that samples grown in Pt crucibles contain Pt impurities, that are partially responsible for these distortions. We observed: *i*) the appearance of two forbidden Raman modes (*f*RM) and *ii*) a weak-ferromagnetic (WF) component when the crystals are field cooled in the *ab*-plane. The WF component, the onset temperature where 3D long range WF is first observed,  $T_{WF}$ , the coercive field,  $H_C$ , and the intensity of the *f*RM decrease as the Pt content decreases. For crystals with a similar Pt content, the above quantities are larger for samples with smaller lattice unit cell volume,  $V$ . The crystal with the highest Pt content and smallest  $V$  ( $x = 0$ ) shows, for  $T \rightarrow 0$ , an average canted Cu moment of  $5.5(3) \times 10^{-3} \mu_B/Cu$ . The intensity of the *f*RM decrease with  $T$ , suggesting that the number of distortions decrease as  $V$  expands. We concluded that the Pt impurities and/or the reduction of  $V$  beyond a critical value,  $V_c$ , are the origin of the distortions which are in turn responsible for the *f*RM and WF observed.

## NMR STUDY OF THE AMORPHOUS AND NANOCRYSTALLINE $\text{Fe}_{86}\text{Zr}_7\text{B}_6\text{Cu}$

M. WÓJCIK

*Institute of Physics, PAS, 02 668 Warsaw, Poland*

I. S. OLIVEIRA

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, 22290-180 Rio de Janeiro, Brazil*

R. GRÖSSINGER

*Institut für Experimentalphysik, Technische Universität Wien, 1040 Wien, Austria*

A. P. GUIMARÃES

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, 22290-180 Rio de Janeiro, Brazil;*

NMR has been used to monitor, on an atomic scale, the process of structural transformation of a  $\text{Fe}_{86}\text{Zr}_7\text{B}_6\text{Cu}$  amorphous alloy introduced by heat treatment in the temperature range 200-550 °C. The NMR spectrum obtained on a quenched sample shows two broad maxima in the frequency range 10-90 MHz. The contributions to this spectrum from the various possible resonances due to the sample composition ( $^{57}\text{Fe}$ ,  $^{91}\text{Zr}$ ,  $^{11}\text{B}$ ) have been identified based on the reference NMR spectra from corresponding, crystalline ( $\text{Fe}_2\text{Zr}$ ,  $\text{Fe}_3\text{B}$ ) and amorphous ( $\text{FeB}$ ) systems. A broad maximum around 65 MHz, can be identified as pure  $^{91}\text{Zr}$  resonance.  $^{11}\text{B}$  resonance, along with a very small intensity from  $^{57}\text{Fe}$  resonance, contributes to the spectrum intensity below 40 MHz. Annealing in the temperature range 350-550 °C leads to drastic changes in the spectrum shape. While the broad amorphous contribution is still visible, the presence of two new narrow lines in the spectrum indicates a partial structural transformation from the amorphous to a crystalline state. The  $^{57}\text{Fe}$  resonance line, dominating in the 550 °C annealed spectrum, centered at 46.9 MHz, substantially broadened with respect to the crystalline  $\alpha\text{-Fe}$  reference, evidences the formation of nanocrystalline bcc Fe phase. The possible presence of another crystalline magnetic phase is indicated by a new narrow  $^{91}\text{Zr}$  line at 62 MHz on the top of the amorphous  $^{91}\text{Zr}$  spectrum. This frequency differs from known 50 MHz  $^{91}\text{Zr}$  resonance in crystalline  $\text{Fe}_2\text{Zr}$ , and its high value suggests the formation of a Fe-rich crystalline  $\text{Fe}_3\text{Zr}$  phase which precipitates along with the bcc Fe in the process of nanocrystallization.

## STUDY OF $\text{SmCo}_2$ BY NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE

CZ. KAPUSTA

*Department of Solid State Physics, University of Mining and Metallurgy, 30-059 Cracow, Poland*

I. S. OLIVEIRA

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro 22290-180, Brazil*

H. FIGIEL

*Department of Solid State Physics, University of Mining and Metallurgy, 30-059 Cracow, Poland*

P. C. RIEDI

*Department of Physics and Astronomy, University of St. Andrews, KY16 9SS, UK*

E. GRATZ, G. WIESINGER

*Institute for Experimental Physics, Technical University Vienna, A-1024, Austria*

A. P. GUIMARÃES

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro 22290-180, Brazil*

A  $^{59}\text{Co}$ ,  $^{147}\text{Sm}$  and  $^{149}\text{Sm}$  NMR study at 4.2 K of the intermetallic compound  $\text{SmCo}_2$  is reported. The compound shows very interesting magnetic properties, including a rhombohedral distortion of its cubic crystal lattice below  $T_c$ . The  $^{59}\text{Co}$  spectrum consists of two lines centered approximately at 44 MHz and 59 MHz. The higher frequency line shows a well resolved quadrupole splitting of 1.15 MHz, whereas the lower one is unresolved. The  $^{149}\text{Sm}$  pattern shows two resonance septets with two different quadrupole splittings. The lower resonance in the  $^{147}\text{Sm}$  spectrum, which is better resolved due to a much larger nuclear quadrupole moment, has two septets centered at 563.3 MHz and 563.1 MHz, with quadrupole splittings of 10.5 MHz and 9.4 MHz, respectively. The upper septet centered at 601.8 MHz has a smaller quadrupole splitting of 7.0 MHz. The two resonances in the Co spectrum show two magnetically inequivalent sites corresponding to magnetization direction along the  $\langle 111 \rangle$  axis. The splitting of the Sm resonances into distinct septets indicates that the Sm sites are not equivalent, due to the rhombohedral distortion of the crystal lattice. The results are analyzed in terms of the influence of the lattice distortion on the magnetic structure of the compound. The lattice contributions to the electric field gradient at the Sm sites are related to the crystal electric field coefficient  $A_{20}$  and thus, to the magnetocrystalline anisotropy brought about by the distortion of the cubic lattice.

## Utilização da Técnica de Solidificação Direcional no Estudo dos Sistemas Fe-Pr e Fe-Nd:

IVAIR A. DOS SANTOS, EDIVAL DE MORAES, SERGIO GAMA, CARLOS A. RIBEIRO

*Unicamp*

A análise térmica diferencial das ligas de Fe-Pr e Fe-Nd mostram dois sinais térmicos sequenciais ao redor da temperatura de reação eutéctica, separados por 10<sup>0</sup>C, para composições variando desde próximo a composição da fase  $\text{Fe}_{17}\text{TR}_2$  até próximo a composição da terra rara pura. Para o sistema Fe-Pr sabemos que esses sinais térmicos estão relacionados com] duas novas fases com estequiometrias  $\text{Fe}_3\text{Pr}_{13}$  e  $\text{Fe}_2\text{Pr}$ , ambas estáveis em um intervalo de temperatura estreito e próximo a temperatura de reação eutéctica [Hoyos, 1996]. Para o sistema Fe-Nd até agora não existe uma explicação coerente para esses eventos, mas apenas uma tendência

a associá-los a uma reação eutética metaestável, como no caso do sistema Fe-Pr. Para resolver melhor esses sinais térmicos duplos que aparecem no sistema Fe-Nd e verificar se as novas fases que aparecem no sistema Fe-Pr estão presentes no sistema Fe-Nd e, se estiverem, como estas participam do diagrama de equilíbrio de fases desse sistema, lançamos mão da técnica de solidificação direcional para o estudo desses sistemas. Esta técnica é similar a técnica de crescimento de cristais conhecida como método Bridgman e é capaz de produzir condições propícias à obtenção dessas fases. Neste trabalho apresentamos resultados de Análise Termomagnética e Metalografia Óptica para amostras solidificadas direcionalmente a várias velocidades. Apresentamos também resultados de Análise Calorimétrica para ambos os sistemas, estes resultados confirmam a existência da fase  $Fe_2Pr$  com  $T_c$  de  $205^\circ C$  e a existência de duas reações separadas por  $5^\circ C$ , envolvendo um eutético  $L \rightleftharpoons Fe_2Pr + Pr$ , seguido de uma reação peritectóide  $Fe_3Pr_{13} \rightleftharpoons Fe_2Pr + Pr$ . Nossos resultados sugerem fortemente que o mesmo conjunto de observações do sistema FePr aplica-se ao sistema Fe-Nd. No entanto, não observamos a formação da fase  $Fe_{17}Nd_5$ , como é esperado do diagrama de fases desse sistema, certamente por problemas de nucleação.

**MAGNETIC INTERACTIONS IN  $RENiBC$   
(RE=Gd, Tb, Dy, Ho AND Er) COMPOUNDS  
STUDIED BY MAGNETIC AND  
TRANSPORT MEASUREMENTS**

JULIO CÉSAR TRÓCHEZ MONDRAGÓN, BORIS  
GILBERT HENRI GIORDANENGO, MAGDA  
BITTENCOURT FONTES, ELISA MARIA  
BAGGIO-SAITOVITCH  
CBPF

MÚCIO AMADO CONTINENTINO  
UFF

During the last 3 years the recently discovered borocarbides  $(RC)_m(NiB)_2$  with  $m=1$  or  $2$  have been intensively studied by experimentalists and theoreticians, because of their complex magnetic structures, for some of them, coexistence of magnetism with superconductivity. With the goal to study details of magnetic interactions in these compounds we prepared samples of 1111 series of borocarbides  $(RNiBC)$  and characterized them by XRD, susceptibility, magnetization, and magnetoresistance measurements. This family of materials in spite of the structure rather similar to the 1221  $(RNi_2B_2C)$  does not present superconductivity with the exception of  $LuNiBC$ . All systems studied in the present work show a magnetic transition. In the case of Ho and Er, the nature of the long range magnetic order is known from neutron scattering. The first present a antiferromagnetic structure and the second a ferromagnet with the moments aligned along the c-axis. We investigated the type of order in the other

compounds using the above mentioned techniques together with previously reported Mössbauer results for samples doped with  $1\% \text{ } ^{57}Fe$  at Ni-site. The temperature dependence of the resistivity below the ordering temperature in different applied magnetic fields is analyzed in terms of electron scattering by the elementary excitations. However due to the presence of an anisotropy gap, resistivity data alone does not allow the determination of the nature of the long range magnetic order. In the specific case of  $GdNiBC$ , the gap is small and the field dependence of the magnetoresistance is very similar to that of a magnetic multilayer. The measurements for  $GdNiBC$  can be qualitatively correlated to the field dependence magnetization using a simple model of intrinsic multilayer

**ESTUDO DA PROPRIEDADE DE  
MAGNETORRESISTÊNCIA EM  
MATERIAIS CERÂMICOS La-Ca-Mn-O  
DOPADO COM TERRAS RARAS**

ENRIQUE P. RIVAS PADILLA, SERGIO GAMA,  
FLÁVIO GANDRA, ANTONIO MEDINA  
UNICAMP

Muito interesse tem sido centrado em materiais cerâmicos La-Ca-Mn-O de estrutura tipo perovskite, devido à sua propriedade de grande magnetorresistência, a qual pode ser utilizada para várias aplicações tecnológicas (sensor de corrente, microfone resistivo, cabeça de leitura de gravação, etc.). A alta magnetorresistência é possível se o transporte eletrônico está fortemente relacionado ao ordenamento de spins, especialmente naqueles casos de coincidência de transição magnética e transição metal-semicondutor. Neste trabalho, apresentamos o comportamento da propriedade da magnetorresistência do composto  $La_{0.67}Ca_{0.33}MnO_{3+\delta}$ , quando dopado com Y e os elementos de terras raras (TR) Er, Gd e Ho. A composição de nossas amostras foi  $La_{0.60}TR_{0.07}Ca_{0.33}MnO_{3+\delta}$  e foram preparadas por reação de estado sólido dos óxidos constituintes a  $1400^\circ C$  ao ar. As análises de raios X e metalografia óptica para todas as amostras preparadas mostram que a formação da fase desejada é majoritária, o que nos remete à conclusão que as medidas feitas de magnetorresistência e magnetização refletem o comportamento da fase perovskite. Observamos que para as amostras dopadas com terras raras, a magnetorresistência aumenta enormemente com respeito à amostra sem dopagem e que a temperatura de transição magnética diminui, à medida que o raio iônico da terra rara diminui, o que nos remete à conclusão que a magnetorresistência e a temperatura de transição dependem fortemente do raio iônico do material dopante. Também observamos que a magnetorresistência das amostras dopadas com terras raras são maiores que a da amostra dopada com ítrio ( $r_{Er} < r_Y \approx r_{Ho} < r_{Gd}$ ), o que nos leva a concluir que

a magnetorresistência depende em menor grau do tipo de elemento dopante.

### Reorientação de Spin na Série de Compostos Intermetálicos $\text{Er}_{1-x}\text{Ho}_x\text{Co}_2$

MÁRCIA REGINA SOARES, FLÁVIO GARCIA,  
ARMANDO Y. TAKEUCHI, SÔNIA FRANCO DA CUNHA  
*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas*

Foi feito o estudo da reorientação de spin que ocorre na série de compostos intermetálicos  $\text{Er}_{1-x}\text{Ho}_x\text{Co}_2$ , através de medidas de resistividade elétrica, magnetização e suscetibilidade magnética AC, na faixa de 1.5K até temperatura ambiente, e ressonância magnética nuclear (RMN) a 4.2 K. Nesta série  $\text{Er}_{1-x}\text{Ho}_x\text{Co}_2$ , as amostras com  $x \geq 0.60, 0.80$  e  $1.00$ , além da transição de fase de primeira ordem observase uma mudança da direção de fácil magnetização numa temperatura abaixo da transição de fase. Para o composto  $\text{HoCo}_2$  obteve-se o espectro de ressonância magnética nuclear a 4.2K, onde aparecem duas linhas. Isto acontece porque existem dois sítios de cobalto inequivalentes, que ocorre quando a magnetização está paralela ao eixo [100]. E ainda como a contribuição é a mesma para cada par de átomos, os picos no espectro tem aproximadamente a mesma área. Das curvas de resistividade em função da temperatura ocorre um degrau abaixo da temperatura de transição de fase,  $T_C$ , que está associado a mudança da direção de fácil magnetização, que passa a ser ao longo do eixo [110]. Esta reorientação de spin também foi observada, também, nas curvas de magnetização e de suscetibilidade em função da temperatura. A partir das medidas de magnetização em função do campo aplicado foi feita uma estimativa das constantes de anisotropia e uma análise de seu comportamento em função da temperatura. As temperaturas de reorientação de spin encontradas são 40, 30 e 15K para os compostos com  $x = 0.60, 0.80$  e  $1.00$ , respectivamente. Isto mostra que a temperatura de reorientação aumenta com aumento da quantidade de érbio, indicando ser função do fator de Landé,  $g_j$ , e do momento angular total,  $J$ .

### Estudo das Propriedades Elétricas e Magnéticas da Série $\text{Er}(\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x)_2$ .

FLÁVIO GARCIA, MÁRCIA REGINA SOARES,  
ARMANDO Y. TAKEUCHI, SÔNIA FRANCO DA CUNHA  
*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas*

Através de medidas de resistividade elétrica, magnetização e suscetibilidade AC, na faixa de temperatura de 1.5K até temperatura ambiente, fizemos o estudo das propriedades elétricas e magnéticas da série  $\text{Er}(\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x)_2$ . Nesta série, a substituição de cobalto por níquel causou uma diminuição da temperatura de ordenamento magnético e do momento magnético do cobalto. Nas curvas das medidas de resistividade em

função da temperatura notamos que todos os compostos apresentaram uma anomalia na temperatura de transição de fase,  $T_C$ , e que para algumas concentrações ocorre um pico nesta temperatura. Tal efeito é causado pelo aumento das flutuações de spin logo após a transição de fase, devido a uma interação de curto alcance existente nesta faixa de temperatura. Outro fenômeno interessante é a tendência à saturação das curvas de resistividade a altas temperaturas para alguns compostos. Este comportamento é causado pelo espalhamento dos elétrons-s por flutuações de spin dos elétrons-d. Das curvas de magnetização em função da temperatura observamos que todos os compostos seguem a lei de Curie-Weiss e apresentam diferença entre as curvas de ZFC e FC, antes de  $T_C$ , devido à formação de domínios no cristal. Os compostos com  $x = 0.05, 0.10$  e  $0.20$  apresentam um pico antes de  $T_C$ , indicando que o subsistema do cobalto se desmagnetiza antes do subsistema da terra rara. Das medidas de magnetização em função do campo aplicado obtivemos os valores da magnetização de saturação e o campo coercivo. Dos valores da magnetização de saturação notamos que o cobalto perde momento em função da concentração de níquel. A substituição, também, levou a uma troca na ordem da transição de fase. Inicialmente de primeira ordem ( $\text{ErCo}_2$ ), esta transição passou a ser de segunda ordem com acréscimo de 20% de níquel. Este resultado é discutido dentro do Modelo de Inoue-Shimizu.

### Theoretical Study of the ESR Spectra of $\text{Ce}_x\text{Y}_{1-x}\text{Pd}_3$ .

PAULO R. DE S. NETTO, PABLO A. VENEGAS  
*Universidade Estadual Paulista (UNESP), Campus Bauru*

$\text{Ce}$  intermetallic compounds have been extensively studied in the literature and many of them show anomalies typical of intermediate valence alloys. Doping  $\text{Ce}$  compounds with  $\text{Gd}^{3+}$  ions, their ESR spectra allow to study locally the influence of the intermediate valent  $\text{Ce}$  ions. In metals, the local moments ESR linewidth,  $\Delta H$ , is expected to increase linearly with the temperature. In contrast, in  $\text{Ce}_x\text{Y}_{1-x}\text{Pd}_3$  the  $\text{Gd}$  ESR spectra show a non-linear increase of  $\Delta H$  in the temperature range  $4.2 \leq T \leq 300\text{K}$ . At low temperatures the slope  $d(\Delta H)/dT$  is smaller than in the isostructural non-intermediate valence compounds  $\text{MPd}_3$  ( $M = \text{Sc}, \text{Y}, \text{La}$ ), whereas at high temperatures the resonance line is strongly broadened and the slope asymptotically approaches the value measured in  $\text{LaPd}_3$ . The temperature dependence of  $\Delta H$  becomes non-linear and cannot be explained only by invoking the usual Korringa mechanism.

In a previous work, we showed that at high temperatures ( $T$ ), the indirect exchange interaction between the local magnetic impurities and the  $\text{Ce}4f$  electrons has an appreciable contribution to the linewidth of the magnetic impurities. The  $\text{Ce}$  interconfigurational fluctuations

are transferred via RKKY interaction to the *Gd* site. This fluctuations produce an effective alternating magnetic field, which relaxes the *Gd* spins. However this mechanism is not sufficient to describe the low temperature behaviour of the linewidth. It is well known that the *Gd* ESR spectra shows a resolved fine structure at low T, which is narrowed when the temperature is increased. In this work we have made a detailed analysis of the narrowing effect and we calculate the ESR linewidth for the systems proposed.

### ESTUDO EXPERIMENTAL DAS PROPRIEDADES MAGNÉTICAS EM LIGAS $\alpha - FeV$ .

JOÃO CARLOS KRAUSE, JACOB SCHAF, MOACIR ÍNDIO DA COSTA JR  
 Instituto de Física - UFRGS  
 CLEDERSON PADUANI  
 Departamento de Física - UFSC

Neste trabalho realizamos um estudo das propriedades magnéticas em ligas  $\alpha - FeV$  de estrutura BCC, com relação aos efeitos introduzidos pela concentração de Vanádio e pela ordem e desordem atômica. Todas as ligas foram preparadas por fusão em forno a arco com atmosfera de argônio a partir de Fe e V de alta pureza (99.999%). O estado desordenado foi obtido por resfriamento super rápido em água a partir de  $1300^{\circ}C$  e o estado ordenado foi obtido por resfriamento lento de  $700^{\circ}C$  a  $550^{\circ}C$ . As medidas de magnetometria DC foram realizadas em um magnetometro a hélio líquido, com sensibilidade de  $10^{-4} emu$  e as medidas Mössbauer foram feitas todas a 290 k. O estudo do efeito relativo a concentração foi feito de 10 at. % até 80 at. % de V. No limite 80 at. % V a liga apresenta um comportamento paramagnet de Pauli. Para concentrações menores o momento magnético do Fe cresce linearmente até atingir  $2.53\mu_B$  na amostra de 10 at. % de V. Para as amostras entre 10 at. % até 40 at. % de V fizemos medidas da magnetização de saturação na temperatura de 4.2 k para os sistemas desordenados e ordenados. Os resultados mostram que o momento magnético do Fe varia sistemática e reversivelmente com a configuração atômica, da ordem de 20 %. A variação do momento magnético do Fe, devido a presença do V e a sua eventual anulação, já foi observada em magnetos itinerantes CrFeV, porém, a variação com a ordem atômica parece pioneira.

### MAGNETIC INTERACTIONS IN FLASH ANNEALED Pr-Fe-B

REGINA K. MURAKAMI, VALQUÍRIA VILLAS-BOAS,  
 SÉRGIO A. ROMERO, FRANK P. MISSELL  
 Instituto de Física, Universidade de São Paulo

Enhanced-remance  $Pr_{4.5}Fe_{77}B_{18.5}$  alloys were produced by using a high heating rate/short time an-

neal, the so-called flash annealing process. Partially amorphous ribbons were produced by melt spinning and then annealed for 10-30 s at temperatures  $560 - 680^{\circ}C$  by passing current through the sample. These annealed materials are nanocrystalline. They consist of a hard magnetic rare earth-based intermetallic, exchange-coupled to a soft magnetic phase and have been the subject of much recent interest due to the possibility of these materials presenting enhanced remanence and large energy products in magnets containing large volume fractions of a soft magnetic phase. In general, good coupling between the magnetic phases is obtained with flash anneals. However, in some cases, the nanocrystalline material does not present a coupling between the hard and soft phases despite being obtained in the same way. In a previous work about  $Nd_4Fe_{78}B_{18}$ , most of the alloys studied were found to show phase separation in the second quadrant, good coupling being obtained only from initially amorphous ribbons. In another previous work about  $Pr_4Fe_{78}B_{18}$ , good coupling was also obtained from partially amorphous ribbons. The aim of the present work is: (a) to determine the optimal conditions for obtaining good coupling between the magnetic phases and (b) to understand the differences between the magnetic interactions in these two types of materials (i.e., well-coupled and non-coupled materials) by means of X-ray diffraction analysis and Rietveld method, differential thermal analysis, magnetic analysis (coercive field measurements, Curie temperature measurements, magnetic remanence curves). The magnetic remanence curves  $M_r(H)$  and  $M_d(H)$  were determined for the construction of Henkel plots which have been used to determine the presence of interactions in concentrated magnetic systems. The positive or negative curvature exhibited by these plots is taken to be an indication of the magnetizing or demagnetizing effect of interactions between neighboring grains.

### MOESSBAUER STUDY OF MANGANESE OXIDES.

M. A. C. DE MELO, I. S. AZEVEDO, E. BAGGIO-SAITOVITCH  
 Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - Rio de Janeiro - Brasil  
 J. FONTCUBERTA, X. OBRADORS  
 Institut de Ciència de Materials de Barcelona. CSIC - Spain

Recently there has been intense activity in exploring giant magnetoresistence in manganese oxide system, however a detailed microscopic understanding of such huge magnetoresistence is not yet available. A partial substitution of Mn by Fe allows to use  $^{57}Fe$  Mössbauer spectroscopy for the study of magnetic properties as measured by a local probe. In this work we show a Mössbauer study of the  $La^{0.6}Y^{0.07}Ca^{0.33}Mn^{0.98}Fe^{0.02}O_3$

with applied magnetic fields up to 5 Tesla and variable temperature. The spectra above  $T_M$  (Mott transition) without magnetic field display only a paramagnetic pattern. At temperatures close to  $T_M$  (110K) a magnetic hyperfine splitting appears gradually. At lower temperatures, as the spontaneous magnetic order sets in, the magnetic moments become blocked and the typical magnetic spectra becomes apparent. The analysis of the spectra taken with external magnetic field indicate a broad polarization of the iron spins parallel to the external field, which tends to become aligned to the external field at high temperatures. This polarization of spins are also observed above  $T_M$ . The broad magnetic transition in zero magnetic field and the external field effect indicate a spin disorder and a strong field-induced polarizability of the spin clouds.

**$(RC)_m(NiB)_2$  INTERMETALLIC  
COMPOUNDS STUDIED BY MÖSSBAUER  
SPECTROSCOPY**

DALBER RUBÉN SÁNCHEZ CANDELA, JULIO CÉSAR  
TRÓCHEZ MONDRAGÓN, MAGDA BITTENCOURT  
FONTES, BORIS GILBERT HENRI GIORDANENGO,  
ELISA BAGGIO-SAITOVITCH  
*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas.*

The rare earth nickel borocarbides  $RNi_2B_2C$  ( $m = 1$ ) are intermetallic layered compounds which offer the possibility to study the interplay between superconductivity and magnetism, while the  $RNiBC$  ( $m = 2$ ) compounds have a similar structure to that of  $RNi_2B_2C$  with an additional  $R - C$  layer between the  $Ni - B$  sheets. The  $RNiBC$  compounds exhibit magnetic order but do not show superconductivity, except for the  $LuNiBC$ , providing a comparison with the properties of the related  $RNi_2B_2C$ . We have measured the  $^{57}Fe$  Mössbauer spectra of  $(RC)_m(NiB)_2$  ( $R = Er, Ho, Dy, Tb, Gd; m = 1, 2$ ) doped with 1 at %  $^{57}Fe$  at the  $Ni$  site. For the  $RNi_2B_2C$  compounds, at low temperatures, there appear a magnetic hyperfine (hf) field at the  $^{57}Fe$  nucleus in three of the compounds: In  $GdNi_2B_2C$  for  $T$  14K, in  $TbNi_2B_2C$  for  $T$  15K and in  $HoNi_2B_2C$  for  $5.5K > T > 4.2K$ . No magnetic hf field is observed in the superconducting compounds  $DyNi_2B_2C$  and  $ErNi_2B_2C$  down to 4.2K. Since  $TbNi_2B_2C$  and  $GdNi_2B_2C$  are non superconducting at all and superconductivity disappear in  $HoNi_2B_2C$  in the temperature region  $6K > T > 4.7K$ , it was conclude that in this series of compounds the magnetic hf field, observed at the  $^{57}Fe$  nucleus in these three compounds, acts as a pair-breaking field at the  $Ni$  site. In  $RNiBC$  ( $R = Er, Ho, Dy, Tb, Gd$ ) a magnetic hyperfine field at the  $^{57}Fe$  nucleus is observed only for the  $ErNiBC$  sample, with a ferromagnetic structure below

4.5K. On the other hand, no magnetic hyperfine field at the  $Ni$  site is observed in  $HoNiBC$  and  $GdNiBC$  due to their collinear antiferromagnetic structure. Also in  $DyNiBC$  and  $TbNiBC$  a magnetic hyperfine field at the  $Ni$  site is not observed, which lead us to propose a collinear antiferromagnetic structure for these compounds.

**Magnetic hyperfine field at diluted  $^{57}Fe$  in  
vapor quenched RE films**

E. C. PASSAMANI  
*Universidade Federal do Espírito Santo,*  
MARCO MORALES TORRES, ELISA BAGGIO  
SAITOVITCH  
*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas*  
HANS MICKLITZ  
*Visitor from Physikalisches Institut Universitaet  
Koeln, Germany*

In this work, we combine vapor quenching technique at low temperature (20 K) and in situ  $^{57}Fe$  Moessbauer spectroscopy (MS) at different temperatures (7-300 K) to study out-of-equilibrium solubility and magnetic properties of  $^{57}Fe$  (5 at. %) in some heavy rare-earth (RE) metals (RE = Dy, Ho, Er, Tm and Yb). Two magnetic components are observed in the 7 K Mössbauer spectra for Fe in magnetic RE hosts: one with a effective magnetic hyperfine field ( $B_{eff}$ ) varying between 5.3(2) and 1.9(2) T, which has been attributed to Fe at a substitutional site, and the other one, with a very small hf field ( $< 2.1T$ ), which is assumed to be due to Fe at an interstitial site. The  $B_{eff}$  at  $^{57}Fe$  nucleus in such cases are given by sum of two main contributions:  $B_{eff} = C(gJ - 1)J + A$ .  $A$  is the magnetic hyperfine field of magnetic moments of Fe themselves and the first term is due to transferred magnetic hyperfine field created by the RE moments. The behavior of  $B_{eff}$  for Fe at the substitutional site in the different RE metals scales with the de Gennes factor. In order to determine "A" directly, we have performed MS with an applied  $B_{ex}$  a film of Fe in non-magnetic hosts, i.e. Yb metal. The experimental values obtained are in agreement with those obtained by extrapolation given by the equation above, i.e.  $J + 0$  or  $A$ . We also found that: the magnetic hyperfine field for interstitial Fe site confirms the theoretical prediction that Fe at the interstitial site in non-magnetic Yb keeps a local magnetic moment.

**EVIDÊNCIAS DE ESTABILIDADE  
QUÍMICA EM COMPOSTOS  $R_2Fe_{17}$   
FLUORETADOS.**

FERNANDO AUGUSTO BATISTA, LUIZ ORLANDO  
LADEIRA, ABÁ ISRAEL COHEN PERSIANO  
*UFMG*

JOSÉ DOMINGOS ÁRDISSON, WALDEMAR AUGUSTO  
ALMEIDA  
*CDTN*

Os compostos  $R_2Fe_{17}$  ( $R$ =terra-rara) com adição intersticial de outros elementos (H,C,N) são atualmente materiais com grande potencial para a fabricação de ímãs permanentes e utilização em aplicações magneto-ópticas. Previsões teóricas indicaram que a adição de elementos halogênicos às ligas 2:17 poderiam melhorar significativamente suas propriedades magnéticas. Assim, desenvolvemos em nosso laboratório um processo de difusão controlada de halogênicos nestes compostos, em especial, o flúor. Este processo é realizado em um reator mantido à temperaturas na faixa de 200-300°C, com um controle preciso da pressão parcial de flúor numa mistura com argônio. A análise por espectroscopia Mössbauer e difração de raios-X mostrou que a incorporação de átomos de flúor em ligas  $R_2Fe_{17}$ , além de melhorar suas propriedades magnéticas, inibe sua oxidação quando expostas à atmosfera ambiente por longo tempo. Estudos da estabilidade química destas ligas foram realizados em amostras na forma de pó e em filmes finos. As amostras na forma de pó foram analisadas por espectroscopia Mössbauer de transmissão cerca de uma ano após fluoretadas sem apresentar qualquer processo aparente de oxidação. Amostras de filmes finos, produzidas por "sputtering DC" com plasma de argônio em alvos 2:17 puros, estudadas por CEMS, quando expostas à atmosfera ambiente, sofreram oxidação. No entanto, as amostras de filmes finos obtidas utilizando-se alvos 2:17 fluoretados produziram estruturas cristalinas similares às do alvo sem, contudo, apresentar defeitos de desproporcionamento devido à oxidação. Incluímos ainda neste trabalho resultados recentes obtidos por espectroscopia Mössbauer, à temperatura ambiente, em amostras que reagiram com flúor por longo tempo (35 dias). Além do aumento de  $T_c$  verificado (140 °C), o ajuste destes espectros foi realizado utilizando-se 4 sub-espectros, o que é característico quando os compostos 2:17 apresentam anisotropia magneto-cristalina uniaxial.

**STRUCTURE AND MAGNETIC  
PROPERTIES OF MECHANICALLY  
ALLOYED  $Fe_2Nb$  LAVES PHASE**

SIKE XIA, JAVIER GÓMEZ ROMERO, ARMANDO  
YOSHI TAKEUCHI, ELISA BAGGIO-SAITOVITCH  
*CBPF*

ROBERTO AVILLES, FERNANDO RIZZO ASSUNÇÃO  
*DCMM, PUC-RIO*

It is known that mechanical milling (MM) can induce atomic disordering in many intermetallic compounds. Some ball-milled disordered alloys exhibit interesting magnetic properties. Some novel magnetic alloy systems have been produced by MM of intermetallic compounds. Therefore, the disordered alloys obtained by MM of intermetallic compounds represent a new type of alloy system. Mechanical milling induced atomic disorder can be followed by X-ray diffraction (XRD) through the observation of the change in the diffraction intensities of the superlattice. However, there are intermetallic compounds which does not have superlattice structures and also exist some intermetallics on which MM leads to amorphization without undergoing a detectable structural variation. Therefore, XRD is insufficient to determine the atomic disorder in these intermetallic compounds. It has been claimed that, for the intermetallic compounds which do not show a structural variation by XRD during a milling process, magnetization measurement can give some indication of atomic disorder before amorphization. Differing from magnetization measurement which measures the macroscopically collective magnetic properties, Moessbauer spectroscopy measures directly the hyperfine parameters which is related to the local atomic configurations. In this work, we studied the effect of MM on structure and magnetic properties of  $Fe_{-2}Nb$  C14-Laves phase, an intermetallic compound which does not show superlattice diffraction in XRD patterns. Moessbauer and magnetization measurements were performed to study the changes in atomic configuration and magnetic properties. The results show that the milling leads to atomic disorder in the compound, which results in a large distribution of magnetic moment of Fe. In addition the average magnetic moment is much higher than the original compound. Upon further milling the crystalline disordered phase transforms to amorphous phase.

**ESTUDO POR RESSONÂNCIA  
MAGNÉTICA DE MANGANITES  
DOPADOS COM TERRAS-RARAS.**

A. N. MEDINA, E. P. PADILLA, S. GAMA, F. G.  
GANDRA

*UNICAMP - Instituto de Física Gleb Wataghin*

Foram feitos experimentos de Ressonância Magnéticas em amostras de  $(La:TR)_{0.67}Ca_{0.33}MnO_{3+\delta}$ , onde TR : Gd, Er, Ho e Y. Estas amostras foram caracterizadas por raio-X, metalografia, magnetização e magnetoresistência, tendo sido observadas as mesmas características essenciais reportadas na literatura para este tipo de amostra. Os experimentos de ressonância foram feitos no intervalo de temperatura de 100K a 360K, na amostra em pó, a 9.5GHz e 50 $\mu$ W de potência. Foi observado uma linha praticamente simétrica para  $T > T_c$  enquanto que para  $T < T_c$ , a linha mostrou-se

muito alargada e distorcida, como é característico para ressonância ferromagnética de um pó. O valor de  $g$  decresce desde valores da ordem de 2.10 para  $T \sim T_C$  e permanece praticamente constante em  $g = 1.97$  (0.02) para todas as amostras, para  $T \gg T_C$ . A largura de linha ( $\Delta H$ ) apresenta um mínimo ao redor de 30K acima de  $T_C$ , alargando-se fortemente à medida que se torna ferromagnética. Na região paramagnética,  $\Delta H$  aumenta linearmente com a temperatura, o que está de acordo com dados obtidos por Oseroff e outros<sup>1</sup> para a amostra não dopada. A taxa de alargamento térmico encontrada é a mesma para todas as amostras, e igual a 1.9 (0.2) G/K que é similar ao observado na literatura. Este resultado indica que para esta região de temperatura e concentração estudados, o processo de relaxação não é alterado pela presença do momento magnético da terra-rara e que, portanto, a interação spin-fonon deve ser predominante. A variação de  $T_C$  obtida pode ser consequência da variação do parâmetro de rede induzido pela presença da terra-rara, alterando a interação de double-exchange.

1 - S.B. Oseroff, M.Torikachvili, J. Singley, S. Ali S.W.Cheong and Schultz, Phys. Review B, 53 (10), 6521 (1996)

### ESTUDO DO EFEITO DE TENSÃO MECÂNICA NAS PROPRIEDADES DE $Co_{67}Fe_4Cr_7Si_8B_{14}$ ATRAVÉS DE MAGNETOIMPEDÂNCIA E RESSONÂNCIA MAGNÉTICA.

A. N. MEDINA, M. KNOBEL, F. G. GANDRA  
UNICAMP - Instituto de Física Gleb Wataghin

Reportamos medidas de magnetoimpedância (MI) e ressonância magnética (RM) em compostos amorfos, em função de strain mecânico aplicado durante tratamento térmico da amostra. Foram preparadas fitas amorfas de  $Co_{67}Fe_4Cr_7Si_8B_{14}$ , submetido a tensões entre 0 e 790 Mpa. A MI foi determinada em várias frequências (10 - 120 KHz) para H longitudinal (MIL) e transversal (MIT) à direção da corrente aplicada. A RM foi medida em amostras na forma de discos com 3mm de diâmetro, cortadas da fita usando eletroerosão. As amostras foram posicionadas na cavidade de forma a ter o campo magnético de microondas normal à sua superfície. Os resultados de MIL mostram um pico para  $H = H_K$  que aumenta com o aumento da tensão aplicada, embora permaneça com a mesma ordem de grandeza (5%). Nossos resultados mostram ainda que  $H_K$  aumenta desde 0 até 17G com a tensão aplicada. O espectro de RM obtido consiste de uma estrutura em baixo campo e o modo normal de ressonância ferromagnética. A varredura angular do campo de ressonância ferromagnético, para o campo magnético externo no plano da amostra, nos possibilita determinar o valor de  $H_K$ , bem como a direção do eixo fácil de magnetização. Na

região de baixo campo, o espectro de RM mostra uma estrutura composta da superposição de dois picos. O primeiro é observado claramente para H paralelo ao eixo difícil e é atenuado à medida em que H aproxima-se do eixo fácil, simultaneamente ao aumento do segundo pico. O primeiro pode ser explicado pela teoria de FMR e reflete o comportamento de  $H_K$ .

### Estudo da Absorção de Oxigênio pelas Fases $Fe_{17}R_2$ (R= Sm, Pr e Nd).

EDIVAL DE MORAIS, SÉRGIO GAMA, ROBERTO CÂMARA DE ARAÚJO, CARLOS ALBERTO RIBEIRO  
UNICAMP

Desde a descoberta por Coey e Sun [1] em 1990, de que as fases  $Fe_{17}R_2$  (R= Terra Rara) absorvem, intersticialmente, até três átomos de nitrogênio por fórmula unitária (at/fu), muitos trabalhos têm aparecido na literatura reportando resultados dos efeitos da absorção sobre as propriedades estruturais e magnéticas dessas fases [2]. Para todas as terras raras, a absorção de nitrogênio preserva a estrutura cristalográfica (ortorrômbica ou hexagonal), embora cause um aumento no volume atômico. A temperatura de Curie ( $T_c$ ) é aumentada para valores próximos a 470 °C, há também um aumento na magnetização de saturação ( $M_s$ ) e no campo de anisotropia ( $H_a$ ) [1,2]. No caso de R= Sm, ocorre uma mudança na anisotropia magnetocristalina de planar para uniaxial, o que torna esse material um bom candidato para fabricação de ímãs permanentes. Neste trabalho, são apresentados os resultados de um estudo dos efeitos sobre a fase  $Fe_{17}R_2$  da absorção de oxigênio. As amostras (em pó) foram tratadas num sistema Sievertes onde foram empregados sensores tipo MKS de membrana capacitiva para medidas de pressão. As amostras foram caracterizadas por metalografia óptica, microanálise eletrônica, análise termomagnética (TMA), difração de raios x, análise térmica diferencial (DTA) e análise termogravimétrica (TGA). [1] J. M. D. Coey, H. Sun, J. Magn. Magn. mat. 87, L-251 (1990). [2] K. H. J. Buschow, R. Coehoorn, D. B. de Mooij, K. de Waard, T. H. Jacobs. J. Mag. Mag. Mat. 82, L-35 (1990).

### ESTUDO MÖSSBAUER DE FERRITA DE Ni E Zn EM MATRIZ DE SÍLICA

ADRIANA SILVA DE ALBUQUERQUE, JOSÉ DOMINGOS ARDISSON, WALDEMAR A. A. MACEDO  
Laboratório de Física Aplicada- Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear - CDTN/CNEN

As propriedades de sólidos compostos por partículas magnéticas uniformemente dispersas e embebidas em um meio isolante ou metálico dependem crucialmente de suas nanoestruturas, caracterizadas pela fração volumétrica e pelo tamanho de partículas dispersas. Neste

trabalho, investigamos a obtenção, pelo processo sol-gel, de ferritas de níquel e zinco embebidas em matriz de sílica,  $Ni_{0,5}Zn_{0,5}Fe_2O_4/SiO_2$ . Utilizamos como reagentes precursores nitratos de *Fe*, *Ni* e *Zn*, e alcóxido de silício (tetraetilortossilicato). O gel foi tratado termicamente entre 1073K e 1273K, em atmosfera ambiente. Foram obtidas amostras com teores de ferrita entre 30 e 50%, as quais foram caracterizadas por difração de raios X (DRX) com tubo de  $CuK\alpha$  e por espectroscopia Mössbauer de  $Fe^{57}$  em geometria de transmissão, a 300K e a 100K. As amostras apresentaram tamanho médio (D) de partículas de ferrita entre 10 e 150nm, como determinado por DRX. A temperatura ambiente, os espectros Mössbauer das amostras calcinadas a 1073K apresentaram relaxação superparamagnética decrescente com o aumento do teor de ferrita. Tais espectros foram ajustados a uma única distribuição de campos hiperfinos, resultando em um desvio isomérico médio de 0,33(2)mm/s e campo hiperfino médio (BHF) entre 12,0(2)T e 20,3(3)T, resultado do aumento da interação magnética entre as partículas de ferrita. Para as amostras com 50% de ferrita, o aumento da temperatura de calcinação para 1273K resultou na formação de ferrita de *Ni* e *Zn* e de pequena fração de ferrita de *Ni* (cerca de 10%). A temperatura ambiente, a fase ferrita de *Ni* e *Zn* apresenta ainda relaxação superparamagnética. Nos espectros Mossbauer a 100 K observa-se a definição também dos sextetos referentes à ferrita de *Ni* e *Zn*. A formação da ferrita de *Ni* ocorre provavelmente devido a perda de *Zn* com o aumento da temperatura do tratamento térmico.

**Microestrutura de Ligas do Tipo  
Fe-(Nd-MM)-B, MM=Mischmetal**  
CLEBER SANTIAGO ALVES, SERGIO GAMA,  
ROBERTO CAMARA DE ARAÚJO  
UNICAMP  
CARLSON PEREIRA DE SOUZA, FRANCISCO DE ASSIS  
OLIMPIO CABRAL  
UFRN

A descoberta de ímãs de alta performance baseados em ligas do tipo Fe-Nd-B despertaram o interesse da comunidade científica e das indústrias produtoras de ímãs permanentes em todo o mundo, que passaram a realizar estudos visando tanto a melhoria de suas propriedades magnéticas (em especial o aumento de sua temperatura de Curie) quanto o barateamento do seu custo de produção, em função do alto custo do processo de obtenção de terras raras com grau de pureza necessário para a fabricação desse tipo de ímã. A substituição de 50% do Neodímio puro por "Mischmetal" nacional de terras raras (rico em Cério) em ligas ternárias Fe-Nd-B foi estudada através de microscopia ótica, difratometria de raios-x e análise termomagnética, com o objetivo de se avaliar a viabilidade de fabricação de ímãs permanentes de baixo custo, uma vez que o custo do Mischmetal

é de cerca de 1% (um por cento) o custo do Neodímio puro. Os valores das Temperaturas de Curie observados para as ligas com Mischmetal, em torno de 20% abaixo do valor apresentado pela liga sem a mistura, justifica economicamente essa substituição. Além disso, a forte presença de domínios magnéticos e a formação do composto de estrutura tetragonal 14-2-1 confirmados pelas análises de microscopia ótica e dos difratogramas de raios-x obtidos, demonstram que essas ligas podem ser usadas na produção de ímãs permanentes de alta performance e baixo custo.

**EFEITOS DA ANISOTROPIA  
MAGNETOCRISTALINA NA  
MAGNETO-IMPEDÂNCIA DO  
 $FeSi_3(110)[001]$**

MARCOS CARARA

IF-UFRGS, Porto Alegre - RS

ANDRÉ GÜNDEL, RUBEM L. SOMMER

Depto. de Física-UFSM, Santa Maria - RS

Neste trabalho são apresentados resultados de medidas de magneto-impedância longitudinal no  $FeSi_3(110)[001]$ . As amostras foram cortadas na forma retangular por eletroerosão a partir de lâminas comerciais (ACESITA), sendo elas diferenciadas pelo ângulo de corte com relação a direção de fácil magnetização, [001]. Esse material é caracterizado por ser altamente texturizado e macio magneticamente, resultado de sua alta anisotropia magnetocristalina. Foram estudadas as dependências da impedância com o campo magnético e com a intensidade da corrente de sonda para cada ângulo de corte em uma ampla faixa de frequências (100 Hz a 100 MHz). Para frequências relativamente baixas (até 100 kHz) foi feita uma análise do comportamento tanto da parte real (associadas à componente dissipativa) quanto da imaginária da impedância complexa (associada à energia necessária para promover a variação no campo magnético interno ao material). A anisotropia magnetocristalina se manifesta na magneto-impedância através da anisotropia na permeabilidade transversal efetiva, gerando espectros de impedância em função do campo e em função da frequência bem diferenciadas para amostras cortadas a diferentes ângulos. As curvas de impedância em função da frequência associados àquelas em função da intensidade da corrente de medida permitem determinar as faixas em que a profundidade de penetração da corrente tem o seu papel mais pronunciado, bem como identificar os processos excitados pelo campo ac. A magneto-impedância em função da frequência apresenta um máximo em torno de 400 kHz, fenômeno esse explicado em termos da profundidade de penetração da corrente ("skin-depth effect") combinado com a queda na permeabilidade transversal efetiva para frequências altas. As altas taxas de variação da magneto-impedância associados ao baixo

custo do material, coloca esse sistema como um bom candidato à fabricação de sensores de campo de alta sensibilidade e baixos custos.

### PROPRIEDADES MAGNÉTICAS NA PEROVSKITA $\text{La}_{1-x}\text{Pb}_x\text{MnO}_3$

NELSON O. MORENO, GASTON E. BARBERIS

*Instituto de Física, Universidade Estadual de  
Campinas-Brasil*

MAITE INSAUSTI PEÑA, TEÓFILO ROJO

*Depto. de Química Inorgánica, Universidad del País Vasco  
- España*

Medidas da magnetização foram realizadas nas perovskitas magnéticas  $\text{La}_{1-x}\text{Pb}_x\text{MnO}_3$  com  $x=0.01, 0.20$  e  $0.69$ . Recentemente, tem surgido um grande interesse no estudo de compostos do tipo  $\text{La}_{1-x}\text{M}_x\text{MnO}_3$  (M representa um metal alcalino terroso como Ca, Sr ou Ba), que foi criado pelo fato do aparecimento do efeito de magnetorresistência colossal nestes sistemas. As medidas da magnetização (M) como função da temperatura e do campo magnético foram realizadas num magnetômetro de SQUID com variação de campo de 0 até 5,5 Tesla e de temperatura de 1.8 K até 400 K. As temperaturas de Curie são estimadas das medidas da magnetização vs a temperatura com valores entre 150 K e 230 K para estas concentrações. Foi observado que para campos baixos (1000 Oe) as curvas da magnetização medidas por procedimento de esfriamento a campo nulo (ZFC) e esfriamento com campo (FC) são diferentes abaixo de uma temperatura de irreversibilidade  $T_i(H)$ , a temperatura na qual as curvas se separam. Este comportamento foi observado nas três concentrações e para  $x=0.20$   $T_i(H)$  foi medido para vários campos magnéticos e a linha resultante foi ajustada por uma linha de Almeida-Thouless[1]. Das medidas de magnetização vs o campo magnético foi observado uma pequena histerese com campos coercivos bastante pequenos e a magnetização de saturação obtida a 1.8 K para  $x=0.01, 0.20$  e  $0.69$  é comparada com os valores calculados usando a aproximação de campo molecular. [1] J. R. L. de Almeida and D. J. Thouless, J. Phys. A 11, 983 (1978).

### VISCOSIDADE MAGNÉTICA EM ÍMÃS NANOCRISTALINOS DE $\text{PrFeB}$ E $\text{SmFeCo}$

DANIEL R. CORNEJO, REGINA K. MURAKAMI,  
VALQUÍRIA VILLAS-BOAS

*Instituto de Física, Univ. de São Paulo, São Paulo, Brazil*

Realizamos medidas de viscosidade magnética nas curvas de desmagnetização de dois tipos diferentes de materiais magnéticos nanocristalinos: (i)  $\text{Pr}_4\text{Fe}_{78}\text{B}_{18}$  obtido via resfriamento rápido e tratado termicamente via "flash annealing"; (ii)  $\text{Sm}_{18}\text{Fe}_{33}\text{Co}_{49}$  obtido por "mechanical alloying" e tratado termicamente em forno

convencional.

O parâmetro mais importante nas medidas de "after-effect" magnético é o coeficiente de viscosidade magnética  $S_v$ , o qual pode ser obtido da relação  $S_v = \frac{S_0}{\chi_{irr}(1+\eta)}$ , onde  $S_0$  é a viscosidade magnética (para fator desmagnetizante zero),  $\chi_{irr}$  é a susceptibilidade irreversível e  $\eta(H) = \frac{dM_{rev}}{dM_{irr}}$  leva em conta a dependência da componente reversível da magnetização com a componente irreversível. Esta relação vale somente quando a função distribuição de barreiras de energia envolvida no processo de inversão da magnetização assume os mesmos valores tanto nas medidas de "after-effect" como nas de susceptibilidade irreversível. Se  $S_v$  é independente da magnetização (e do campo magnético), então pode-se dizer que ele é uma característica do material a uma dada temperatura.

Nossas medidas mostram que para  $\text{Pr}_4\text{Fe}_{78}\text{B}_{18}$  (75% de  $\text{Fe}_3\text{B}$ , 15% de  $\text{Pr}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$  e 10% de  $\alpha - \text{Fe}$ ) as dependências de  $S_0$  e  $\chi_{irr}$  com relação à magnetização são diferentes, e o material apresenta grandes valores de  $\chi_{rev}$  associados com inversões em campos baixos. Para  $\text{Sm}_{18}\text{Fe}_{33}\text{Co}_{49}$  as dependências de  $S_0$  e  $\chi_{irr}$  são muito semelhantes e  $\chi_{rev}$  é quase desprezível (neste material as fases duras tipo  $\text{Sm}(\text{Fe}-\text{Co})_5$  e  $\text{Sm}(\text{Fe}-\text{Co})_7$  são predominantes). Os valores de  $S_v$  para  $\text{Pr}_4\text{Fe}_{78}\text{B}_{18}$  dependem da magnetização e do campo, um comportamento que pode estar vinculado à presença de uma fase mole predominante no material, ou ao fato das propriedades coercivas do sistema não serem homogêneas. No caso do  $\text{Sm}_{18}\text{Fe}_{33}\text{Co}_{49}$   $S_v$  mostra-se independente da magnetização e do campo.

Trabalho financiado por CAPES, FAPESP, CNPq e FINEP

## MAGNETISMO E MATERIAIS MAGNÉTICOS (Excitações em Sistemas Magnéticos) – 12/06/97

### Dinâmica de vórtices no modelo de Heisenberg anisotrópico em duas dimensões.

B. V. COSTA, J. E. R. COSTA

*Departamento de Física - ICEx - UFMG*

D. P. LANDAU

*Center for Simulational Physics - University of Georgia*

O modelo de Heisenberg Anisotrópico em duas dimensões (2D-XY) é um protótipo para sistemas que exibem excitações topológicas. O modelo não exhibe qualquer ordem de longo alcance, como estabelece o teorema de Mermin-Wagner, contudo, ele sofre uma transição a uma temperatura finita  $T_{KT}$ , vindo de uma fase de alta temperatura onde as funções de correlação tem um decaimento exponencial, para uma fase de baixa tempe-

ratura, onde elas decaem com um lei de potencia. Esta transição de fase é conhecida como Kosterlitz-Thouless e acredita-se que seja causada pelo desligamento de pares vórtice-anti-vórtice. Abaixo de  $T_{KT}$  pares vórtice-anti-vórtice formam um condensado superposto a ondas de spin. Acima de  $T_{KT}$  vórtices são encontrados livres e as ondas de spin são amortecidas. As propriedades termodinamicas do modelo são bem conhecidas, não podendo-se dizer o mesmo das propriedades dinâmicas. A quantidade importante para se estudar na dinâmica é a função de correlação,  $S^{i,i}(q, \omega)$ . Dave Huber (D.L.Huber, Phys. Lett., **68A**, 125(1978)), sugeriu que a dinâmica destes vórtices poderia levar ao aparecimento de um pico central em  $S^{x,x}(q, \omega)$  para  $T > T_{KT}$ . Alguns estudos posteriores usando simulação mostraram que  $S^{x,x}(q, \omega)$  apresenta um pico central bem definido em toda região de temperatura. Estes resultados não são explicados por nenhuma teoria desenvolvida até o momento. Nós usamos Monte Carlo e dinâmica de spins para estudar a dinâmica deste modelo. Nos calculamos o tempo de vida de um par vórtice anti-vortice, o tempo necessário para um vórtice se mover por um espaçamento de rede, a densidade de vórtices e a distancia entre pares como função da temperatura. Nossos resultados dão suporte à idéia de que vórtices não são livres para se mover pela rede, e um processo de criação aniquilação parece ser muito mais adequado para descrever sua dinâmica.

### Magnetic Vortex-Spinwave Interactions and Mass

GARY MATTHEW WYSIN

*Universidade Federal de Minas Gerais and Kansas State University, Manhattan, Kansas, U.S.A.*

I will discuss properties of magnetic vortices in quasi-two-dimensional magnetic materials, with special emphasis on how their stability, motion, and mass can be related to their interaction with spinwaves. To do so, a numerical procedure to calculate the spinwaves in the presence of a vortex will be described. The resulting spinwave spectrum exhibits a mode related to an instability of the vortex structure, whose frequency goes to zero at a well-defined critical value of magnetic easy-plane anisotropy. At this critical anisotropy, the vortex structure changes from purely within the easy-plane to one having non-zero out-of-easy-plane components. In antiferromagnets, this mode is found to be localized on the vortex, suggesting that it is really an internal dynamic property. I also will describe how the spinwave modes associated with vortex translation can produce orbital motions of the vortex center, and how their frequency can be used to estimate a vortex mass. The dynamical mass of a vortex in a two-dimensional easy-plane magnetic model is calculated from the translational mode spectrum and an effective force constant for the vortex in a finite lattice system. A significant fea-

ture of this method is that the mass can be calculated for both the in-plane and out-of-plane vortices.

### Calculation of the out of plane dynamical correlation for $CsNiF_3$

SIDINEY DE ANDRADE LEONEL

*Universidade Federal de Juiz de Fora*

ANTÔNIO SÉRGIO TEIXEIRA PIRES

*Universidade Federal de Minas Gerais*

In the past years the spin dynamics of one dimensional magnetic systems have been studied extensively both theoretically and experimentally. The Heisenberg Hamiltonian with an easy plane anisotropy, and  $S=1$  has been found to describe the ferromagnet  $CsNiF_3$  quite well. In zero field the most important excitations in this system is the spin-wave-like propagating modes, for wavevectors  $q$  larger than the inverse correlation length. Villain using a self consistent harmonic approximation was the first to predict the existence of two characteristic linewidth, due to in-plane (IP) and out-of-plane (OP) spin fluctuations. The IP component of the dynamic structure factor has been quite well studied showing a well behaved structure. However the linewidth of the OP component displays an anomalous wavevector dependence due to a singularity in the three spin wave density of states. This anomalous behavior was observed for the first time by Kakurai, Steiner and Dorner by means of inelastic polarized neutron scattering. In this work we calculate the in plane dynamic structure factor for the one dimensional quantum Heisenberg ferromagnet with an easy plane anisotropy, at low temperatures, using a diagramatic expansion for the temperature dependent Green function. We will take the classical easy plane ferromagnetic state as the zeroth approximation and expand in powers of the amplitude of the out of plane and in plane fluctuations. We will carry out the expansion to the two loop level. The multiplicity of diagrams and their greater complexity make it impractical to go beyond two loops. We compare our theoretical calculation for the spin wave linewidth with the experimental data of Kakurai et. al.

### Dinâmica de Antiferromagnetos Quânticos Unidimensionais

MARIA ELIZABETH DE GOUVÊA, A. S. T. PIRES

*Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais*

G. M. WYSIN

*Kansas State University*

O interesse em magnetismo quântico unidimensional experimentou um renascimento em 1983 devido ao trabalho teórico de Haldane [Phys. Lett. **93A**, 464; Phys. Rev. Lett. **50**, 1153, (1983)]. Usando modelos de teoria de campos contínuos para Heisenberg quântico unidimensional, Haldane sugeriu que, para sistemas

de spin *inteiro*, o estado fundamental é um singlete não magnético com uma energia de gap  $\Delta$  no espectro magnético. Desde então, um grande número de trabalhos teóricos buscaram esclarecer a natureza do estado fundamental de Haldane e das excitações de baixa energia. Entre os resultados teóricos e previsões numéricas mais importantes está o fato de que próximo ao vetor de onda antiferromagnético ( $q = \pi/a$ , onde  $a$  é o espaçamento entre spins) as excitações magnéticas são bem definidas e do tipo de ondas de spin. Também foi demonstrado que a fase de Haldane não é destruída por interações fracas entre cadeias nem por anisotropias de plano fácil do tipo ion-simples que são encontradas nos materiais quasi-unidimensionais reais.

A conjectura de Haldane já está, e essa altura, muito bem estabelecida tendo sido verificada, também, numericamente e, mais importante, em experimentos. Suporte experimental para a teoria foi obtido através de experimentos em vários materiais. No entanto, alguns aspectos do comportamento *dinâmico* desses sistemas têm sido pouco estudado. Nosso trabalho se concen-

trará na área de dinâmica. Para estudar a dinâmica de antiferromagnetos quânticos de spin 1 a baixas temperaturas, aplicamos o formalismo da função memória combinado com uma teoria modificada de ondas de spin formulada por Takahashi [Phys. Rev. B 40,2494 (1989)]. Apresentaremos também resultados para o comportamento do gap com a temperatura comparando nossos resultados com resultados experimentais [T. Sakaguchi et al, J. Phys. Soc. Jpn 65, 3025 (1996)].

## MAGNETISMO E MATERIAIS MAGNÉTICOS (Magnetismo e Materiais Magnéticos II)

– 12/06/97

### CALOR ESPECÍFICO DO MODELO KONDO DE DUAS IMPUREZAS

WANDA DA CONCEIÇÃO DE OLIVEIRA

UFF

WASHINGTON LUIZ CARVALHO LIMA

Universidade do Tocantins-TO

JEREMIAS BORGES DA SILVA

UEPG-PR

LUIZ NUNES DE OLIVEIRA

IFSC-USP

Este trabalho tem como objetivo apresentar resultados do calor específico do modelo Kondo de um sistema de duas impurezas magnéticas, imersas num meio metálico, utilizando uma extensão da técnica do Grupo de Renormalização Numérico, desenvolvido por Wilson<sup>1</sup>, inicialmente para calcular propriedades termodinâmicas no modelo Kondo de uma impureza. Considerando a competição entre a energia de Kondo ( $K_B T_K$ ) e a interação RKKY ( $I$ ) existente no modelo<sup>2</sup> de duas impurezas, já é conhecido que usando a técnica de scaling perturbativo, para interações ferromagnéticas fortes existe um efeito Kondo de dois estágios e para interações antiferromagnéticas existe uma transição contínua do regime Kondo para o regime RKKY. Também devemos ressaltar que usando técnica do Grupo de Renormalização Numérico no modelo Kondo, um sistema invariante sob a transformação partícula-buraco, apresenta um comportamento de líquido não-de-Fermi para um valor crítico de  $I/K_B T_K \approx 2$ , separando o regime Kondo do RKKY antiferromagnético. Preservando a assimetria partícula-buraco no sistema de duas impurezas os resultados da contribuição das impurezas para o calor específico serão apresentados em três casos representativos para as diferentes distâncias,  $R$ , entre as impurezas: (1°) para  $K_F R = \infty$ , onde  $K_F$  é o momento de Fermi, retamos no caso de duas impurezas isoladas, (2°) para  $K_F R = \pi$ , regime RKKY antiferromagnético, obtemos uma anomalia de Schottky e (3°) para  $K_F R = \pi/2$ , regime RKKY ferromagnético, obtemos uma anomalia de Schottky quando as impurezas se acoplam e à medida que a temperatura diminui obtemos duas anomalias do tipo Kondo, refletindo o efeito Kondo de dois estágios.

1. K. G. Wilson, Rev. Mod. Phys. 47,773(1975)

2. J. B. Silva et al, Phys.Rev.Lett.76,275(1996)

**EXPANSÃO PERTURBATIVA  
REGULARIZADA PARA O EFEITO  
KONDO**

NEEMIAS ALVES DE LIMA, VALTER LUIZ LIBERO,  
LUIZ NUNES DE OLIVEIRA  
IFSC

Nas últimas duas décadas, a teoria dos sistemas eletrônicos correlacionados obteve enorme progresso, que sustentou o paralelo desenvolvimento da pesquisa experimental dos sistemas de Férmions pesados. Dada a complexidade do problema proposto pelas correlações fortes, diversas técnicas complementares de cálculo foram desenvolvidas no período. O presente trabalho explora uma extensão de uma das mais antigas, a técnica do grupo de renormalização numérico (GRN). (K. G. Wilson, *Rev. Mod. Phys.* **47** (1975)) Já com vinte anos, esse método teórico matêm a sua importância por conseguir resolver problemas fora do alcance dos outros procedimentos. Essa resistência do método introduzido por Wilson se deve em parte a generalizações conseguidas ao longo dos anos. É justamente para aprofundar o estudo de uma dessas extensões que estamos tratando perturbativamente o modelo de Kondo para uma impureza magnética em meio metálico. Como se sabe, a expansão perturbativa das propriedades físicas do modelo de Kondo (a susceptibilidade, por exemplo) em função da constante de acoplamento  $J$  conduz a divergências logarítmicas nas vizinhanças da temperatura de Kondo. No esquema tradicional de tratar este problema usa-se a transformação *discreta* do GRN,

$$T[H_N] = H_{N+1},$$

onde  $H_N$  é uma sequência de Hamiltonianos truncados e redimensionalizados. Neste trabalho pretendemos demonstrar que a transformação *contínua* equivalente

$$T_{\delta z}[H_N(z)] = H_{N+1}(z + \delta z),$$

onde  $z$  é um parâmetro adimensional arbitrário, que generaliza a discretização logarítmica do GRN, (M. Yoshida, M. A. Whitaker, and L. N. Oliveira, *Phys. Rev. B* **41**, 9043 (1990)) oferece um procedimento que regulariza essas divergências. Isso permitirá que, no futuro, tratamentos perturbativos de Hamiltonianos mais complexos possam ser realizados, complementando os dados que são obtidos por diagonalização numérica.

**Exact solution of a simplified periodic  
Anderson model in infinite dimensions:**

**Electronic structure and transport properties**

ROBERTO CONSIGLIO, MIGUEL GUSMÃO

*Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul*

Starting with perturbation theory on the hybridization term, the exact dynamical mean-field equations for the

periodic Anderson model in infinite spatial dimensionality are recovered,<sup>a</sup> and the perturbation expansion turns into a power series in the local mean-field for the resulting effective single-site problem. Searching an analytic solution of the latter, we propose a simplified version of the periodic Anderson model in which only electrons with a given spin orientation (spin-up) hybridize. In this case, the perturbation series can be summed and the local problem solved exactly. Of course, with the broken spin symmetry, some characteristic properties of the Anderson model are modified. The results for the particle-hole symmetric situation do not show a Kondo peak in the density of states (DOS), although the initially localized  $f$ -levels are broadened and some spectral weight is displaced to energies close to the Fermi level. A gap opens in the center of the band for sufficiently large hybridization. The dynamic conductivity and static resistivity at low temperature present a behavior similar to what is experimentally observed in disordered Kondo compounds.<sup>b</sup> We attribute this similarity to the intrinsic randomness that characterizes the simplified model, since the down-spin  $f$ -electrons are frozen at random equilibrium positions, behaving as randomly distributed scattering centers for the moving electrons. The non half-filled case as well as the effect of an applied magnetic field are briefly addressed. We also discuss the inclusion a summable class of corrections due to the hybridization of the electrons with opposite spin.

<sup>a</sup>A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth and M. J. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996).

<sup>b</sup>L. Degiorgi, H. R. Ott, and F. Hulliger, *Phys. Rev. B* **52**, 42 (1995).

**COMPORTAMENTO MAGNÉTICO DE  
PARES DE IMPUREZAS EM Au**

SONIA FROTA-PESSÔA

*Instituto de Física da Universidade de São Paulo - IFUSP*

Neste trabalho obtemos a partir de primeiros princípios a estrutura eletrônica e as propriedades magnéticas de impurezas e pares de impurezas em Au. Utilizamos em nossos cálculos os programas "linear muffin-tin orbitals" na aproximação da esfera atômica, implementados no espaço direto (RS-LMTO-ASA). Devido as propriedades interessantes que apresentam, especial atenção é dada aos pares de impurezas de Fe-Cr e Fe-Nb ocupando sítios vizinhos no hospedeiro Au. No caso do Fe-Cr obtemos acoplamento antiferromagnético entre as impurezas e os momentos magnéticos das impurezas no par são comparáveis aos das impurezas isoladas. Os cálculos indicam que a impureza de Nb isolada não apresenta momento magnético em Au, mas desenvolve um momento induzido considerável no par Fe-Nb, devido à presença do Fe. Notamos que nosso interesse em sistemas envolvendo pares de impurezas foi despertado por resultados TDPAD recentes [1] do grupo do

Hahn Meitner Institut (Berlín, Alemanha), com quem temos colaborado. Esse grupo desenvolveu uma sistemática que permite acesso experimental a propriedades magnéticas e hiperfinas de pares de impurezas em metais. Uma discussão dos resultados teóricos obtidos será feita dentro deste contexto.

1. Dietmar Riegel and Jivan Kapoor, comunicação privada.

**MAGNETIC HYPERFINE FIELDS AT  
DILUTED IMPURITIES SYSTEMATICS OF  
FERROMAGNETIC RARE EARTH  
COMPOUNDS GdZn AND GdCd.**

ALEXANDRE LOPES DE OLIVEIRA, MARCUS VINICIUS  
TOVAR COSTA

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas ( CBPF )*

NILSON ANTUNES DE OLIVEIRA

*Universidade do Estado do Rio de Janeiro ( UERJ )*

AMÓS TROPER

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas ( CBPF ) and*

*Universidade do Estado do Rio de Janeiro ( UERJ )*

The hyperfine fields at 3d transition impurities and at non-magnetic (s-p and noble) impurities in ferromagnetic CsCl type compounds GdZn and GdCd are theoretically discussed in the framework of an "effective" Gd host. In the case of non-magnetic impurities, the hyperfine fields are described within an extended Daniel-Friedel model, which takes into account the effect of the translational invariance break introduced by the impurity<sup>1</sup>. The case of 3d transition impurities is discussed within a two band (s-d) model in the framework of an extended RKKY picture<sup>2</sup>. This allows us to self-consistently calculate the conduction electron polarization and core polarization field contributions to the hyperfine field. The observed general trend of the measured hyperfine fields by Kasamatsu et al.<sup>3</sup> is well reproduced by our model calculations in both cases. The calculated local moments at Sc, Cu and Ni impurities in these intermetallics are nearly zero, whereas in the case of Mn and Fe impurities one gets a finite moment of about  $1.8\mu_B$  and  $1.0\mu_B$  respectively which couples antiferromagnetically with the host Gd moments in a quite good agreement with experimental data<sup>3</sup>.

<sup>1</sup> A. L. de Oliveira, M. V. Tovar Costa, N. A. de Oliveira and A. Troper, to appear in *J. Appl. Phys.* **81**, 15 April ( 1997 ).

<sup>2</sup> C. E. Leal and A. Troper, *J. Less. Com. Met.* **149** 377 ( 1989 ).

<sup>3</sup> Y. Kasamatsu, K. Kojima and T. Hihara, *J. Phys. Soc. Jpn.* **63** 1508 ( 1994 ).

**MAGNETISMO E MATERIAIS  
MAGNÉTICOS (Magnetismo e Materiais Magnéticos III)  
- 13/06/97**

**Influência das interações de troca e dipolar no  
processo de desmagnetização de sistemas  
magnéticos compostos de fase dura e mole.**

MARÍLIA EMURA, FRANK P. MISSELL

*Instituto de Física, Universidade de São Paulo*

JESUS M. GONZÁLEZ

*Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid*

Ímãs permanentes formados de uma fase magneticamente dura e outra fase de alta permeabilidade têm recebido muita atenção devido à possibilidade de obter altos valores do produto energético. A idéia básica no desenvolvimento desses materiais consiste em otimizar as suas propriedades combinando o alto valor da magnetização remanente da fase mole e o alto campo coercivo da fase dura. Vários estudos têm mostrado que o acoplamento de troca entre as fases desempenha um papel fundamental para a obtenção de tais propriedades. Por outro lado, sabe-se da importância da interação dipolar no processo de desmagnetização de ímãs permanentes. Neste trabalho apresentamos resultados de simulações em triades de grãos duro/mole/duro, onde investigamos a influência das interações de troca e dipolar em seu campo coercivo ( $h_c$ ). Foi utilizado o método de Monte Carlo - Metrópolis, e o sistema foi descrito pelo formalismo micromagnético, considerando as energias de anisotropia, Zeeman, troca e dipolar. Os resultados mostraram uma forte dependência do campo coercivo com o parâmetro de troca ( $a_d = Ad^{-2}/K$ ). Para baixos valores de  $a_d$  (energia de troca menor que energia de anisotropia) foram obtidos dois valores de campo coercivo, indicando um desacoplamento entre as fases. Para  $a_d > 2.5$  um único campo coercivo (fases acopladas) crescente com  $a_d$  foi obtido. A dependência com o parâmetro dipolar ( $m_d = \mu_0 M_s^2/2K$ ) mostrou-se suave (variando entre 0.1 e 0.3 do campo de anisotropia), embora também fosse observado o desacoplamento das fases para baixos valores de  $m_d$  ( $m_d < 0.25$ ). Verificações na configuração do sistema mostraram que para  $m_d$  pequenos o processo de desmagnetização dos grãos duros se dava através da propagação de uma parede tipo Néel, enquanto que para  $m_d > 0.25$  formava-se uma parede tipo Bloch.

**MAGNETIC FIELD EFFECTS IN THE  
MAGNETIC DOMAINS IN  $AF_1$  AND  $AF_2$   
PHASES OF DILUTE Cr-V ALLOYS**

A. J. A. DE OLIVEIRA, W. A. ORTIZ

*Grupo de Supercondutividade e Magnetismo - DF -  
UFSCar*

P. C. DE CAMARGO

*Laboratório de Materiais - DF - UFPr.*

The antiferromagnetic state in Cr is described by spin-density-waves (SDW) incommensurate with the reciprocal lattice and characterized by a wave vector  $\vec{Q}$ . Chromium and its alloys with small V concentrations present three distinct phases: the paramagnetic (P) phase above the Néel temperature ( $T_N$ ), the transverse polarization ( $AF_1$ ) in the interval between  $T_N$  and the spin-flip temperature ( $T_{SF}$ ) which for Cr is 123.5 K, and the longitudinal polarization phase ( $AF_2$ ) below  $T_{SF}$ . The  $AF_1$  phase is characterized by magnetic domains of the type  $(\vec{Q}_i, \vec{S}_j)$ , where  $i$  is different of  $j$ , having orthorhombic symmetry, while the  $AF_2$  phase has magnetic domains such that  $i = j$  and present tetragonal symmetry. This work presents the temperature dependence of the DC magnetic susceptibility,  $\chi_{DC}(T)$ , of Cr-x at.%V ( $x = 0, 0.2, 0.4$ ) alloys showing the magnetic field effects on the shape of  $\chi_{DC}(T)$  around the spin-flip transition. The results show that a strong dependence of the magnetic history and effects in the formation of magnetic domains in the  $AF_1$  and  $AF_2$  phases. We observed that, as the magnetic field increases, the values of  $\chi_{DC}(T)$  in the  $AF_2$  phase decrease faster than those of the  $AF_1$  phase, indicating an inversion of the susceptibility jump, i.e., for small fields the value of  $\chi_{DC}(T)$  is smaller for the  $AF_1$  phase.

**EFEITO DA TENSÃO MECÂNICA NO  
RUIDO BARKHAUSEN EM FITAS  
AMORFAS MAGNÉTICAS**

JULIANO CASAGRANDE DENARDIN, ANTONIO

MARCOS H. DE ANDRADE, RUBEM L. SOMMER

*Universidade Federal de Santa Maria - RS*

O ruído Barkhausen corresponde aos pulsos randômicos de tensão gerados nos terminais de uma bobina sensora envolvendo uma amostra de material ferromagnético, quando submetida a um campo magnético variável. Os pulsos são consequência dos saltos na magnetização da amostra, associados a modificações abruptas na estrutura de domínios da mesma. Em geral este efeito é gerado pelo aprisionamento e a liberação das paredes de Bloch durante seu movimento devido aos defeitos, impurezas ou tensões localizadas, isto é, o mesmo conjunto de inhomogeneidades que são responsáveis pelo campo coercivo e as perdas por histerese. As características macroscópicas de um dado material, por exemplo a permeabilidade, são fortemente dependentes da sua estrutura de domínios. Portanto, as técnicas de ruído Bar-

khausen podem produzir informações sobre a dinâmica da magnetização e sua correlação com o comportamento macroscópico do material em estudo. Neste trabalho são apresentados os resultados das medidas de ruído Barkhausen nas fitas amorfas: Metglas 2605TCA, Metglas 2705M e Metglas 2714A, submetidas a diversos níveis de tensão mecânica para produzir uma anisotropia magnetoelástica efetiva. Com isto se quer controlar a espessura das paredes de domínios, o que por sua vez vai influenciar o comportamento dinâmico das mesmas bem como a intensidade das suas interações com os vários defeitos do material. Os resultados são analisados através dos espectros de potência do ruído Barkhausen e comparados com os modelos propostos por Bertotti e colaboradores [1].

1. B. Alessandro, C. Beatrice, G. Bertotti and A. Montorsi, *J. Appl. Phys.*, vol. 68, p. 2901, 1990.

**ANISOTROPIC MAGNETIZATION AND  
MAGNETORESISTANCE OF  $SmSb_2$**

SERGEY L. BUD'KO

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF/CNPq,  
R. Dr. Xavier Sigaud 150, Urca, Rio de Janeiro, RJ,  
22290-180, Brazil*

PAUL C. CANFIELD

*Ames Laboratory and Department of Physics and  
Astronomy, Iowa State University, Ames, IA, 50011, USA*

$SmSb_2$  belongs to the family of highly anisotropic orthorhombic light rare earth dantimonides  $RSb_2$  ( $R = La-Nd, Sm$ ). Large high quality single crystals of this family were recently grown and studied in the Ames Laboratory. High resistivity ratios were achieved (in-plane  $RRR = 415$  for  $SmSb_2$ ). The measurements of anisotropic low field temperature - dependent and low temperature field - dependent magnetization together with the anisotropic in - plane and out - of - plane resistivity and transverse and longitudinal magnetoresistance were performed for  $SmSb_2$ . This material has an antiferromagnetic ground state with the Neel temperature  $T_N = 12.5K$ . The inverse susceptibility is non - linear in temperature up to 350K. Low temperature field dependent magnetization and magnetoresistance have no indication of metamagnetic transitions up to 55kG. de Haas - van Alfen oscillations in magnetization were observed in a wide range of fields and temperatures for magnetic field along  $c$  - axis. Magnetoresistance is anisotropic and remarkably high at low temperatures both in the ordered state and above the magnetic transition. The anisotropy of zero field resistivity  $\rho_{(ab)}/\rho_c$  is about 0.16 at room temperature. The results will be discussed within the frame of existing theories of galvanomagnetic effects in ordered and paramagnetic state. Similarities and differences of  $SmSb_2$  with respect to another

members of the family will be outlined. *Ames Laboratory is operated for the U.S. Department of Energy by Iowa State University under Contract No. W-7405-Eng-82. This work was supported by the Director for Energy Research, Office of Basic Energy Sciences.*

### HELMAGNETIC TRANSITION IN $TbNi_5$

V. M. T. S. BARTHEM, E. A. M. DA GAMA  
UFRJ

The  $TbNi_5$  compounds crystallize in the hexagonal  $CaCu_5$  structure (space group,  $P6/mmm$ ). The main contribution to the magnetization in this compound came from the 4f electrons of the Terbium ions. The Nickel contribution to the magnetism is very small because its 3d shell is almost filled up by the 5d electron of Terbium ions. There is a magnetic order disorder transition at 23K. Just now, results of magnetic measurements made always at field higher than 400 Oe, show that the magnetic moments are ordered ferromagnetically in the basal plane of the  $hc$  structure and lying there due to a strong anisotropy vector. With this work we can show, through the analysis of the AC susceptibility, in applied magnetic fields, magnetization and resistivity measurements, that, for magnetic fields  $H < 400Oe$ , the compound is helimagnetic. One has that, at low field, the interactions between Tb ions second neighborhoods (the atoms are at different planes and these planes are perpendicular to the  $c$  direction) became at the same order that the ferromagnetic interactions between Tb atoms in the same plane. The low anisotropy in the basal plane favors the helical structure, that is, changes in the magnetic moment directions makes little changes in the free energy.

### MOAGEM MECÂNICA DO $HfFe_2$ : PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E MAGNÉTICAS

ARMANDO YOSHIKI TAKEUCHI, ELISA MARIA  
BAGGIO-SAITOVITCH, HENRIQUE SAITOVITCH,  
PAULO ROBERTO DE JESUS SILVA, XIA SIKE  
*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF/CNPq)*

Intermetálicos podem ser quimicamente desordenados por moagem mecânica (MM). A difração de Raios-X (RX) evidencia as super-redes nos compostos com estruturas desordenadas; naqueles intermetálicos que não apresentam esta característica estrutural, a caracterização apenas por (RX) é insuficiente. Existem intermetálicos onde a super-rede não é suprimida por MM; onde medidas de magnetização (M) podem indicar o desordenamento do composto. Comparando com estas técnicas as espectroscopias de caráter localizado -efeito Mössbauer (EM), RMN, Correlação Angular (CA)- caracterizam o ordenamento local; o que as torna poderoso instrumento de análise no estudo do desordena-

mento, ocasionado por MM, nos intermetálicos. Apresentamos um estudo do intermetálico  $HfFe_2$  moído mecanicamente, a partir de experimentos de EM e CA em combinação com RX e M. A estrutura cristalográfica do  $HfFe_2$  é C-14, fase de Laves, daí não apresentar super-rede. Na TA é ferromagnético, com o Fe localizado em dois sítios distintos; o sítio do Hf é único; foi preparado em forno de arco a partir dos reagentes e recozido, durante 100hs, em 900C. Foram preparadas dez amostras com diferentes tempos de moagem (5 min até 30hs) em máquina SPEX-8000 MILL. As medidas de CA -interações hiperfinas (IH) no sítio do Hf evidenciam um aparecimento de desordenamento a partir dos primeiros 5 min de MM, que vai acentuando, totalizando aos 40 min de MM. Estes resultados são consistentes com aqueles mostrados por EM medido nos sítios do Fe. Os resultados de ambos os experimentos mostram também o aparecimento de uma componente de IH na magnética devido a uma fase amorfa; já as evidências de uma precipitação de Fe transparecem somente na CA; resultado consistente com as medidas de M. Com a MM introduzindo grandes quantidade de defeitos na rede cristalina -vacâncias, deslocamentos, fronteiras de grão, deslizamento de planos etc- a reorganização do sistema tende a uma fase desordenada.

### Superparamagnetismo em nanopartículas de Cu-Fe-O obtido a partir de moagem mecânica.

GERARDO FABÍAN GOYA, HERCÍLIO RODOLFO  
RECHENBERG

*Instituto de Física da Universidade de São Paulo*

Os processos de mistura mecânica têm sido utilizados intensamente para síntese de materiais nanométricos, sistemas quasicristalinos e ligas amorfas. Particularmente, estudos recentes sob mistura mecânica de óxidos de metais de transição revelaram a possibilidade de induzir reações químicas e mudanças no estado de oxidação dos sistemas reagentes. Os diversos óxidos do sistema Fe-O, com domínios magnéticos na escala nanométrica, são os principais constituintes das superfícies magnéticas de fitas e dispositivos de gravação, tendo por isso grande interesse tecnológico. Na prática, estes sistemas nanométricos estão limitados respeito aos pequenos comprimentos dos domínios magnéticos, devido ao fenômeno do Superparamagnetismo (SPM). Daí a importância do conhecimento experimental e teórico dos parâmetros que governam este tipo de transições na escala nanoscópica. Neste trabalho apresentamos resultados de medições Mössbauer e magnetização no sistema de composição nominal  $Cu_{1-x}Fe_xO$ , submetidos a moagem mecânica durante diferentes intervalos de tempo até atingir comprimentos na escala nanoscópica. Os resultados da espectroscopia Mössbauer das amostras sem misturar, a  $T=295K$ , indicam uma forte esta-

bilidade da espinela tetragonal  $Fe_2CuO_4$ , fornecendo um limite superior estimado em 150 ppm para a solubilidade do  $Fe^{+3}$  na matriz CuO sem mistura mecânica. Para as amostras moídas durante 1, 2, 11, 15, e 21h observa-se a aparição de sinais superparamagnéticos (SPM) correspondentes a nanopartículas monodomínio com temperatura de bloqueio acima de temperatura ambiente. A coexistência de partículas multi e monodomínio, devida a distribuição do comprimento de grão resultante do moagem, observa-se nos espectros Mössbauer. As fases SPM crescem com o tempo de moagem em forma aproximadamente linear. Para amostras misturadas durante 48h, a totalidade das fases contendo  $Fe^{+3}$  encontram-se no estado SPM. Medições em função da temperatura revelam efeitos de relaxação a  $T=78K$ , correspondentes a proximidade da temperatura de bloqueio TB.

Apoio financeiro FAPESP

#### APLICAÇÃO DO MODELO DE PREISACH EM LIGAS NANOCRISTALINAS DE $SmFeCo$

DANIEL R. CORNEJO, FRANK P. MISSELL

*Instituto de Física, Univ. de São Paulo, São Paulo, Brazil*

MARTINO LO BUE, VITTORIO BASSO, GIORGIO BERTOTTI

*Istituto Elettrotecnico Nazionale Galileo Ferraris, Torino, Italy*

O modelo de histerese de Preisach tem recebido uma renovada atenção nos últimos anos e é conhecida sua aplicação como modelo físico para o cálculo de curvas de histerese e perdas em materiais magnéticos moles, supercondutores, etc. No modelo, um sistema magnético é representado por uma distribuição de ciclos elementais retangulares não-simétricos com valores de magnetização  $m = \pm 1$  e campos de inversão  $\alpha$  e  $\beta$  ( $\alpha > \beta$ ). Se o campo aplicado  $H$  é maior que  $\alpha$ , então a magnetização é  $m = 1$ , se  $H < \beta$  então  $m = -1$ , e se  $\beta < H < \alpha$  o valor de  $m$  depende da história do campo.

Assim a magnetização do sistema é calculada como:

$$M(H) = \int \int_{S^+} p(\alpha, \beta) d\alpha d\beta - \int \int_{S^-} p(\alpha, \beta) d\alpha d\beta$$

sendo  $S^\pm$  as regiões do plano  $(\alpha, \beta)$  onde  $m = \pm 1$ .

Os ciclos elementais são igualmente caracterizados pelos campos  $h_c = (\alpha - \beta)/2$ , o campo coercivo, e  $h_u = (\alpha + \beta)/2$ , o campo de interação. A determinação da função  $p(h_c, h_u)$  do sistema, permite a sua utilização para simular curvas de histerese com qualquer histórico do campo.

Aplicamos estes princípios ao estudo das propriedades magnéticas de ligas nanocristalinas de  $SmFeCo$ , obtidas por "mechanical alloying", as quais apresentam características de "exchange-spring magnets". Os processos magnéticos reversíveis e irreversíveis presentes nas ligas são tratados supondo que  $p(h_c, h_u) = p_{irr}(h_c, h_u) + p_{rev}(h_c, h_u)$  e que  $p_{rev}(h_c, h_u) = f_{rev}(h_u)\delta(h_c)$ . Para o cálculo numérico da distribuição foram medidos um conjunto de ciclos menores de histerese partindo do estado desmagnetizado ac. O resultado numérico da parte irreversível mostra uma forma que indica uma fatorização do tipo:  $p_{irr} = f(h_c)g(h_u)$  onde  $f(h_c)$  e  $g(h_u)$  podem ser aproximadas por distribuições log-normal e gaussiana, respectivamente. A parte reversível é razoavelmente aproximada por uma lorentziana. Estas expressões analíticas e o modelo móvel de Preisach (o qual inclui interações de campo médio) foram utilizadas para simular ciclos menores, curvas "recoil" e "Henkel plots". Uma concordância muito boa entre teoria e experiência foi obtida.

Trabalho financiado por CAPES, FAPESP, CNPq e FINEP.

#### Palestra Convidada – 13/06/97

#### THEORY OF THE TWO-CHANNEL KONDO LATTICE<sup>\*,†</sup>

D. L. Cox

*Department of Physics, University of California, Davis CA 95616*

The two-channel Kondo lattice has been proposed as a possible model for the heavy fermion superconductors  $UBe_{13}$  and  $CeCu_2Si_2$  which display exotic electron pairing together with unusual (non-Fermi Liquid) normal states[1]. This model consists of two identical bands of conduction electrons interacting through antiferromagnetic exchange with a lattice of spin 1/2 local moments. In this talk, I will first summarize the evidence for non-Fermi liquid behavior in these metals and the microscopic motivations for a two-channel Kondo model description, including a brief review of the quadrupolar Kondo effect[1]. I will then summarize results obtained for the lattice model which include: (i) an "incoherent metal" paramagnetic phase with finite density of states, but with residual entropy and

concomitant residual scattering at the Fermi energy for which a quasiparticle description is meaningless[2,3]; (ii) weak antiferromagnetism near half filling of the bands with susceptibility exponents less than unity[4]; (iii) a low temperature odd-frequency and (possibly) finite center of mass momentum pairing state[4].

\*Work carried out in collaboration with M. Jarrell, F. Anders, H.-B. Pang, and K.H. Luk.

†Research supported by the U.S. Department of Energy, Office of Basic Energy Sciences, Division of Materials Research (normal state properties), and by the NSF under DMR-9420920 (superconducting states).

[1] A recent pedagogical overview may be found in D.L. Cox and M. Jarrell, *J. Phys. Condens. Matt.* **8**, 9825 (1996).

[2] M. Jarrell, H.-B. Pang, D.L. Cox, and K.-H. Luk, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1612 (1996).

[3] F. Anders, M. Jarrell, and D.L. Cox, to be published in *Phys. Rev. Lett.* Feb. 1997.

[4] M. Jarrell, H.-B. Pang, and D.L. Cox, to be published in *Phys. Rev. Lett.*, Feb. 1997.

---

## MAGNETISMO E MATERIAIS MAGNÉTICOS (Técnicas de Caracterização)

### MAGNETISMO E MATERIAIS MAGNÉTICOS (Magnetismo e Materiais Magnéticos II) - 11/06/97

#### ANOMALOUS BEHAVIOR IN LOCALIZED SPINS SYSTEMS: CRYSTAL FIELD EFFECTS

N. A. DE OLIVEIRA, P. J. VON RANKE  
*Universidade do Estado do Rio de Janeiro*  
A. CALDAS  
*Universidade Gama Filho*

In this work we study the effect of the crystal field on the localized spins systems and its connection to the appearance of anomalies in the magnetic properties. Here, for sake of numerical simplicity we used a simple Ising-like model where the spin-spin interaction is dealt with by the mean-field approximation. This is a reasonable approach, since we want to verify the effects mainly associated to the crystal field interaction. In our calculations we found, for particular values of exchange interaction and crystal field parameters, the possibility of first order magnetic phase transition and anomalies in the magnetization and in the magnetic specific heat curves. All of these anomalies are associated to break of symmetry of localized energy levels by the action of crystal field. If the crystal field interaction is neglected, the localized energy levels are degenerated and the field dependence of these energy levels is completely symmetric, which inhibits the possibility of first order magnetic phase transition and the magnetization curve has always the usual behavior with second order magnetic phase transition. However these anomalies are not an universal behavior of the localized spins system but depend critically on the sequence of splitted energy levels and on the magnitude of crystal field interaction. The higher the magnitude of crystal field the higher the probability of finding anomalous behavior in the magnetic properties of the system.

#### ANALYTICAL STUDY OF MAGNETIC PHASE TRANSITION FOR SYSTEMS UNDER THE INFLUENCE OF CRYSTAL ELECTRICAL FIELD.

NILSON ANTUNES DE OLIVEIRA, PEDRO J. VON RANKE  
*Universidade do Estado do Rio de Janeiro*  
AIRTON. CALDAS  
*Universidade Gama Filho*

The magnetic systems of our interest are described by a model Hamiltonian which takes in account the localized magnetic ions, with total angular momentum  $J=1,2$  and  $3$ , in presence of cubic crystal electrical field and exchange interaction. The exchange interaction is considered in the molecular field approximation and the crystal field is wrought using the proper Steven's operators in LLW-cubic-crystal-field-Hamiltonian. In this work we have constructed an algorithm, using algebraic computation (Maple), to study magnetic phase transitions. As starting point, entering with the total angular moment, the algebraic program build the following steps: 1) the proper Steven's operators; 2) the model Hamiltonian; 3) the partition function ; 4) the magnetic state equation and 5) the Landau free energy. In our case, the magnetization is the order parameter in which the Landau free energy can be expanded as a power series and the coefficients of this serie are functions of the absolute temperature and model parameters (crystal field and exchange parameters). In order to investigate the influence of the model parameters on the order of the ferromagnetic-paramagnetic phase transition, as well as, the dependence of Curie temperature on model parameters, we have constructed a tree dimensional plot for the temperature and spontaneous magnetization dependence of the Landau free energy. The conclusions are vastly discussed in terms of the analytical results, which permit a transparent comprehension of the role of model parameters on magnetic phase transition.

#### Estudo dos Expoentes Críticos Estáticos no Sistema Magnético Reentrante $Ni_{1-x}Mn_x$

CLAUDIA MARIA HAETINGER, PAULO PUREUR,  
JACOB SCHAF  
*UFRGS*  
ILDEMAN ABREGO CASTILLO, LUIS GHIVELDER  
*UFRJ*  
RUBEM SOMMER  
*UFMS*

Este trabalho visa o estudo experimental do comportamento crítico estático nas proximidades da temperatura de Curie no sistema ferromagnético reentrante  $Ni_{1-x}Mn_x$  onde  $x=0.21$  e  $0.22$ . Este sistema é chamado reentrante por apresentar uma transição de fase para-ferromagnética seguida, a uma temperatura inferior de uma transição a um estado fundamental do tipo vidro de spin. As amostras foram fundidas em forno a arco e tratadas termicamente a  $900^{\circ}C$  durante 1 hora. Em seguida foi feito um resfriamento rápido até temperatura ambiente ("quenching"), que torna o sistema

desordenado magneticamente. Estuda-se a fenomenologia crítica das seguintes propriedades: Susceptibilidade AC, Magnetização, Calor Específico e Resistividade. A transição de fase para-ferromagnética ocorre em torno de uma temperatura de 225 K. Através dessas medidas temos a possibilidade da obtenção dos expoentes críticos estáticos. Das curvas de Magnetização podemos extrair os expoentes  $\beta$  e  $\gamma$  enquanto que da componente real da Susceptibilidade AC em temperaturas superiores a  $T_C$  pode-se obter o expoente  $\gamma$ . Já da Resistividade e do Calor Específico obtemos o  $\alpha$ . Dessa forma será possível verificar as várias relações de "scaling" entre esses expoentes e comparar com as expectativas teóricas. É importante sobretudo estudar os efeitos da desordem e frustração nos valores dos expoentes críticos através da comparação dos valores medidos e aqueles conhecidos para sistemas ferromagnéticos 3D clássicos.

#### Transições Metamagnéticas em Compostos Intermetálicos $Nd_6Fe_{14-x}Al_x$ : Propriedades Magnéticas e de Transporte.

SHINTARO JONEN, HERCÍLIO RODOLFO RECHENBERG  
Instituto de Física da Universidade de São Paulo

As propriedades magnéticas dos compostos intermetálicos  $Nd_6Fe_{14-x}Al_x$ , com  $x=3, 3.5$  e  $4$ , foram estudadas através de medidas de magnetização em campos de até 90 kOe, num intervalo de temperatura de 4.2 a 300 K. A estrutura cristalina desses compostos é tetragonal, com dois sítios não equivalentes para a terra rara, quatro para o Fe, e um sítio para o alumínio no caso  $x=1$ . Para  $x>1$ , os átomos excedentes de Al substituem o Fe em um sítio específico. As temperaturas de Néel, determinadas através da espectroscopia Mössbauer, são 308 K ( $x=3$ ), 286 K ( $x=3.5$ ) e 239 K ( $x=4$ ). A magnetização, quando medida em campos moderados, apresenta valores muito baixos indicando um ordenamento ferrimagnético para  $x=3$  e  $3.5$ , e um ordenamento antiferromagnético para  $x=4$ . Em todas as amostras produzidas foi observado um salto na magnetização quando submetidas a campos na ordem de 4 T, caracterizando uma transição de fase de um estado antiferromagnético ou ferrimagnético, para um estado ferromagnético. Esse tipo de transição, conhecida na literatura como *transição metamagnética* corresponde a uma ruptura de uma estrutura de spins antiparalelos induzida por um campo magnético. A constatação de que os campos críticos das transições metamagnéticas tendem a diminuir com o aumento de  $x$ , é um indicativo de que um aumento de teor de alumínio nos compostos enfraquece sensivelmente o acoplamento antiferromagnético. Por outro lado, medida preliminar de magneto-resistência na amostra  $x=4$ , apresentou um aumento brusco da ordem de 3% da resistência elétrica durante o processo de transição metamagnética, ao contrário da diminuição que normalmente se associa

à transição antiferro  $\rightarrow$  ferromagnética.  
Apoio financeiro FAPESP

#### Low temperature dynamics of the one dimensional quantum XY model

ANTÔNIO SÉRGIO TEIXEIRA PIRES  
Universidade Federal de Minas Gerais

The one-dimensional XY model is of special importance in the field of spin dynamics because exact results have been obtained for many of its properties. For  $S=1/2$  this model can be mapped to the non interacting spinless fermion model via Jordan-Wigner transformation. In this case the time-dependent correlation function have been calculated exactly at zero and non zero temperatures. The out of plane spin correlation function is a simple fermion density correlation function, and the in plane correlation function can be reduced to a determinant whose size increases linearly with the number of sites. For general spin quantum number  $S$  no exact solution for the XY model exists. In this work we calculate the spin-spin relaxation function for a one dimensional quantum XY ferromagnet, of arbitrary spin, at low temperature, using a projection operator technique proposed by Reiter. This method has proven successful in the study of the classical and quantum Heisenberg model in one and two dimensions. The theory is exact in the large  $S$  limit, in that the leading term in the frequency shift and damping is given exactly, to first order in  $1/S$ , in the limit of small temperature. Terms of higher order will involve the decay of a spin wave into three or more modes, and these corrections are thought to be small. The static correlation functions, needed in calculation of the dynamical memory function, are evaluated using a self consistent harmonic theory. In the classical limit we have obtained an analytical expression for the time dependent memory function. In the long wavelength limit our result agree with those obtained by Nelson and Fisher.

#### Grupo de Renormalização Fenomenológico para tratar a Criticalidade do Modelo de Heisenberg Quântico Antiferromagnético Tridimensional

J. RICARDO DE SOUSA

UA

J. A. PLASCAK

UFMG

Recentemente, a criticalidade do modelo de Heisenberg antiferromagnético (HAF) tem sido muito estudado na literatura por causa da conexão com os supercondutores de altas-temperaturas. O uso dos métodos de grupo de renormalização (GR) para tratar sistemas quânticos (por exemplo: Ising com campo transversal e Heisenberg- $1/2$ ) apresenta uma grande dificuldade por causa da não-comutatividade dos operadores. Em muitos casos,

os resultados das grandezas críticas estão em excelente concordância com os obtidos por métodos mais elaborado, por exemplo Monte Carlo e expansão em série. Um dos métodos, simples e que apresenta resultados satisfatórios, é o de GR na aproximação de campo médio (MFRG). O método de MFRG foi aplicado por Plascak (J. Phys. A 17, L597 (1984)) no modelo de Heisenberg anisotrópico ferromagnético (HF), onde temperatura crítica ( $T_c$ ) e expoentes críticos forma obtidos como uma função do parâmetro de anisotropia ( $\Delta$ ), onde  $\Delta = 0$  e  $\Delta = 1$  correspondem os limites de Heisenberg isotrópico e de Ising, respectivamente). Neste trabalho generalizaremos o método MFRG para tratar o modelo de HAF numa rede cúbica simples. Temperatura de transição ( $T_N$ ) e expoente crítico são calculados como uma função de  $\Delta$ . Observamos que a influência quântica ( $\Delta \neq 1$ ) modifica a criticalidade (isto é,  $T_c \neq T_N$ ) mas não a classe de universalidade. Nossos resultados estão de acordo com o calculado recentemente por *finite-size-scaling* numa rede tridimensional.

#### COMPORTAMENTO DE VIDROS DE SPIN DA FASE DE LAVES $Zr(Fe_xCr_{1-x})_2$ .

JOSÉ ANTONIO HUAMANÍ COAQUIRA, HERCÍLIO RODOLFO RECHENBERG, CARLOS HENRIQUE WESTPHAL

*Instituto de Física, Universidade de São Paulo*

#### Intermetálicos

pseudobinários  $Zr(Fe_xCr_{1-x})_2$ , também chamados de fases de Laves pelo tipo de estrutura cristalina, são de grande interesse científico e em aplicações tecnológicas pela capacidade de armazenar hidrogênio na sua estrutura. Para estudar estas ligas foram preparadas cinco amostras do intermetálico  $Zr(Fe_xCr_{1-x})_2$  com  $x=0.3, 0.4, 0.5, 0.6$  e  $0.7$  por fusão, em um forno de arco voltaico e sob atmosfera de argônio. Não foi feito nenhum tratamento térmico adicional. A caracterização cristalina foi feita por difração de raios-X, e a análise dos difratogramas, feita pelo método de Rietveld, revelou o predomínio (>90%) da fase hexagonal C14 para todas as amostras. Medidas de suscetibilidade a. c. na faixa de temperatura 1.5-200 K com amplitude do campo magnético de 3 Oe e variando a frequência do campo alternado foram feitas para estudar o comportamento de vidros de spin. A posição da temperatura do pico mostra um comportamento quadrático com a concentração do Fe ( $x$ ). A análise dos resultados foi feita usando os modelos fenomenológicos de relaxação superparamagnética. A altura da barreira de energia  $E_a/k_B$  (>1000 K) obtida aplicando a lei de Arrhenius foi razoavelmente melhorado ( $E_a/k_B < 210$  K) aplicando a lei de Vogel-Fulcher. Por outro lado, o parâmetro que magnifica a interação entre os superparamagnetos ( $T_0$ ), mostrou um comportamento quadrático com  $x$ . Segundo isto, ausência de interação entre os "clusters" (por ex-

trapolação), se encontra em  $x=0.07$ . Medidas de espectroscopia Mössbauer foram feitas em 4.2 K. Os espectros foram ajustados impondo três tipos de distribuições de campos hiperfinos (histograma, binomial e gaussiana). O melhor ajuste dos pontos experimentais foi obtido com a distribuição gaussiana. Os resultados confirmam o comportamento de vidros de spin obtido com medidas de suscetibilidade. Amostras com  $x > 0.4$ , cujos picos de suscetibilidade se encontram a  $T > 4.2$  K apresentam desdobramento hiperfino. Já a amostra com  $x=0.3$  com pico em  $T=3.25$ K não apresenta este desdobramento.

#### STUDY OF VERWEY TRANSITION OF $Nb_xFe_{3-2x}O_4$ SYSTEM

EUSÉBIO C. TORRES-TAPIA, LIGIA F. MOREIRA, MANOEL ROTHIER DO AMARAL JR, PAULO HENRIQUE DOMINGUES, JULIO MARIA NETO  
*Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro  
Cidade Universitaria Ilha do Fundao, P.O. Box 68528  
21945-970 Rio de Janeiro*

We have studied of Verwey transition of the  $Nb_xFe_{3-2x}O_4$  system ( $0 < x < 0.200$ ) prepared by solid state reactions. The ordering of bivalent, trivalent iron ions in magnetite ( $Fe_3O_4$ ) below the Verwey temperature  $T = 120$  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 ordering is accompanied by monoclinic distortions of the original cubic crystal, by corrected atomic displacements [1-8]. The presence of impurities concentrations or vacancy in magnetite causes a considerable lowering of Verwey transition [9-11] temperature  $T_v$ . A careful magnetic susceptibility measurements on the Verwey transition is carried one to investigate niobium magnetite the influence of  $Nb^{5+}$  of the spinel system  $Nb_xFe_{3-2x}O_4$  with  $0 < x < 0.200$ . A decrease in transition temperature,  $96 < T_v(K) < 100$ , with increasing concentration  $x$  is observed. In pure synthetic magnetite measurements the first order transition  $T_v = 123.45$  K was found. Reinvestigation by Mössbauer Spectroscopy of powder niobium magnetite from synthetic sample ( $x = 0.050$ ), a gradual alteration in the spectra near the Verwey transitions ( $T_v$ ) was found between  $97 < T_v(K) < 99$ .  
Reference

- 1.- V.P. Romanov, V.D. Checherskii, V. V. Eremanko: Phys. Stat Sol. 31 (1969) K153
- 2.- R.S. Hargrove and W. Kündig Sol. State Commun. 8 (1970)303
- 3.- V.P. Romanov, V.D. Checherskii, V. V. Eremanko: Phys. Stat Sol. (a) 9(1972)713
- 4.- C. Boekema, F. Van der Woude and G. A. Sawatzky: J. Phys. C 9( 1976) 2439
- 5.- Special issue: The Verwey transition, Philosophical

Magazine B42 (1980)No 3.

6.- T. Merceron and J.L. Dormann: J. Magn. Magn. Mater. 15-18(1980)1435

7.- R. Aragon, D.J. Butterey, J.P. Shepherd and J.M. Honig: Phys. Rev. B31(1985)430

8.- R. M. Persoons and E. De Grave: Sol. State Commun 72(1989)977

9.- G. Haley, J.M. Mullen, and J.M. Honig: Sol. State Comm. 69(1989)285

10.-Yu. Chukalkin, V. Shtirts, G.V.Bich and Yu. Petrov: Sov. Phys, Sol. Stat. 34(1992)250

11.- A.Kozlowski, Z. Kakol, R. Zalecki, J. M. Honig: J. Mag. Mag. Mat. 140-144(1995)2083

### TERMODINÂMICA DE UMA CADEIA LINEAR ALTERNADA COM SPINS 1 E S(GERAL) COM TERMOS DIPOLAR E ANISOTROPIA DO ÍON SIMPLES

ELTON CASADO FIREMAN, ROBERTO JORGE VASCONCELOS DOS SANTOS  
UFAL

A termodinâmica de cadeia lineares alternada tem sido estudada extensivamente para spins quânticos e clássicos. Os resultados podem ser aplicados a compostos magnéticos quasi-unidimensionais como  $MM'(EDTA)6HH_2O$ , onde M e M' são metais de transição divalentes. Estudamos uma cadeia linear alternada com spin 1 e S geral com termos bilinear e de anisotropia de íon simples. Os resultados são obtidos dentro de um recente desenvolvimento de uma transformação de decoração para spin 1, considerando S como o spin decorador, onde são calculados termos efetivos: bilinear, de anisotropia de íon simples e biquadrático; obtendo o modelo de BEG efetivo. A resolução da função de partição é feita exatamente via matriz de transferência. As propriedades termodinâmicas como: energia livre de Helmholtz, energia interna, calor específico só calculadas pelas relações usuais da mecânica estatística. Para calcularmos a susceptibilidade magnética a campo nulo, utilizamos a proposta de Suzuki et al, escrevendo a matriz de transferência como a soma de duas matrizes, uma par e outra ímpar em h (campo aplicado), a matriz ímpar é considerada uma perturbação, utilizamos então teoria de perturbação de segunda ordem. Os resultados são analisados para diversos valores de S, bem como de  $\Delta$  e  $\Delta'$ , termos de anisotropia de íon simples nos spins S e 1. Estes resultados são analisados com o estado fundamental, que são analisados para diversos valores de S no plano  $\Delta$  e  $\Delta'$ . No estado fundamental observamos a presença de uma linha de separação fase ferromagnética de uma fase tipo antiferromagnética, o que é observado nos gráficos da susceptibilidade magnética.

### ESTUDO DA INTERAÇÃO DE PAREDES DE DOMÍNIOS COM CORRENTES ALTERNADAS

LUIZ GUILHERME MELO, ANTONIO DOMINGUES DOS SANTOS  
IFUSP

A técnica da magneto-óptica a efeito Kerr tem se mostrado um poderoso meio na compreensão do processo de magnetização tanto de filmes finos quanto de fitas amorfas. Com o intuito de observarmos os domínios com um microscópio óptico usando-se o efeito Kerr longitudinal, nas condições em que a amostra é submetida à passagem de uma corrente alternada de 10mA de diferentes frequências, responsável por um campo circular que envolve o eixo longitudinal do condutor, determinamos claramente a extensão dos deslocamentos das paredes de domínios até aproximadamente 10kHz, para o amorfo  $Co_{70.4}Fe_{4.6}Si_{15}B_{10}$ . Acima desta frequência não observamos qualquer deslocamento das paredes. Acreditamos estar diante da manifestação de dois fenômenos simultaneamente: o Skin-effect responsável pelo comportamento da penetração de correntes alternadas de altas frequências num condutor e sua conseqüente distribuição de campo, e a profundidade de penetração da luz responsável pelos sinais medidos por técnicas magneto-ópticas. Nos concentramos na produção, por evaporação com feixe de elétrons, de filmes finos de alta permeabilidade e baixo campo coercivo de  $Fe_{88}Si_{12}$ . Esses filmes apresentam uma anisotropia perpendicular ao seu eixo mais longo, devido ao campo magnético aplicado durante a deposição. Assim podemos estabelecer a direção com que as paredes de domínios interagem com o campo gerado pela corrente alternada. Serão apresentados os resultados experimentais obtidos com filmes de FeSi. Trabalho parcialmente financiado por FAPESP, CNPq e FINEP.

### FLEX vs. PARQUET THEORY FOR LATTICE FERMIONS IN TWO-DIMENSIONS

GERARDO MARTÍNEZ  
Instituto de Física, UFRGS, Porto Alegre, RS  
GERALD D. MAHAN  
Oak Ridge National Laboratory & Univ. of Tennessee,  
USA

We study the relationship of the pseudopotential parquet theory and flex approximations of Bickers-White-Scalapino for electrons in two-dimensions. Both schemes have been successfully applied to the zero-range Hubbard model in 2-D giving a remarkable accuracy as compared to Quantum Monte Carlo results in the

intermediate coupling regime for finite clusters. Recently, these theories were also extended to the three-band Hubbard model for the cuprates. An algorithm of this sort is required in this subject to answer important questions related to the symmetry of the order parameter in the high- $T_c$  superconductors and/or a possible superconducting phase instability due to purely electronic mechanisms. These self-consistent theories are the proper tools to answer these questions since they deal with instabilities in both the particle-particle and the particle-hole channels in a consistent way. In this work we present a formal expression of these equations for one-band Hubbard models with extended-range Coulomb interactions. The extension to interactions others than in-site Coulomb repulsion is essential in connection to the superconducting properties of the model. Special emphasis is given to the *crossing symmetry relations* that must satisfy the vertex corrections in order to fulfill the Pauli principle. These theories deal with the one-particle correlation functions, like the electron self-energy, and the two-particle correlation functions, like vertex corrections, in a self-consistent way. However, a fully conservative approximation in the sense of Baym-Kadanoff approach should include irreducible interaction parts related to "envelope" diagrams, which are very difficult to obtain numerically. An algorithm to develop a full parquet theory for the extended-range Hubbard models is given in this work. Its relation to the pseudopotential parquet approach by Bickers is indicated.

#### DIMENSIONAL CROSSOVER IN MAGNETIC WARWICKITES

RENATO BASTOS GUIMARÃES, JOÃO CARLOS  
FERNANDES, MUCIO AMADO CONTINENTINO

UFF

HORTÊNCIO BORGES

PUC-RJ

CASSIO MOURA, JOÃO BATISTA MARINON DA  
CUNHA, CARLOS ALBERTO DOS SANTOS

UFRGS

We present an investigation of the magnetic properties of a series of warwickites with different transition metals. These materials are characterized by one-dimensional structures called ribbons where the transition metals are randomly located. The present results allow for a systematic investigation of the hierarchy of magnetic interactions in these systems. While the intra-ribbon interactions are mainly direct d-d interactions between the transition metal ions, the inter-ribbon is due to superexchange between metals in different octahedra mediated by the oxygen in the common corner. The warwickites have been the subject of several investigations in the last years. These systems are mixed borates with general formula  $M^{2+}M^{3+}OBO_3$  which have linear structures in the form of ribbons extending along

the c-axis. The ribbons are formed by four columns of edge sharing oxygen octahedra in which centers are located divalent and trivalent metallic ions ( $M+2$ ,  $M+3$  respectively). These ribbons act from the magnetic, as well as electronic point of view, as independent entities and this is responsible for the low dimensional properties of the warwickites. Another feature of these structures is that the cation sites are randomly occupied by the divalent and trivalent metals. Consequently besides its one-dimensional character, the warwickites are naturally disordered systems and this should be taken into account in understanding both their transport and magnetic properties. Furthermore the warwickites can be formed with most of the transition metals allowing for systematic investigations of their physical properties. One-dimensional magnetic materials are, as a rule, idealizations in nature. Eventually at sufficiently low temperatures weak interactions between the low dimensional structures will set in producing a crossover to higher dimensions in general accompanied by the appearance of long range magnetic order as we have observed.

#### EFEITO DO HOPPING E DA REPULSÃO COULOMBIANA DE LONGO ALCANCE NA ESTRUTURA ELETRÔNICA DO MODELO DE HUBBARD

FERNANDO FRANÇA, BEN HUR BERNHARD  
UDESC

O modelo de Hubbard é um modelo simplificado que serve como referência geral no estudo de sistemas eletrônicos fortemente correlacionados. Ele leva em conta explicitamente a competição que existe entre a repulsão coulombiana entre elétrons em um mesmo sítio atômico e o hopping, geralmente considerado apenas entre sítios vizinhos. Versões estendidas deste modelo permitem a sua aplicação na descrição de algumas classes bastante importantes de materiais, como os supercondutores de alta temperatura e os materiais condutores quase-unidimensionais. Dentro desta perspectiva, há um crescente interesse, nos últimos anos, em analisar o papel desempenhado pelos outros parâmetros que normalmente eram desprezados no modelo, em especial, a repulsão coulombiana e o hopping de longo alcance. Neste trabalho, o modelo é abordado sobre uma cadeia linear através de uma expansão dimérica, caracterizada pelo tratamento exato da repulsão coulombiana local e de parte do termo de hopping entre sítios primeiros vizinhos. Dando continuidade a um trabalho anterior (Phys. Rev. B **47**, 12408 (1993)), são incluídos também o hopping entre sítios segundos vizinhos e a repulsão coulombiana entre primeiros vizinhos. O primeiro destes parâmetros é introduzido na matriz de hopping, e o segundo é tratado em campo médio, definindo um cálculo autoconsistente. Analisamos a influência dos novos parâmetros na forma das densidades de estados

do modelo, que podem ser calculadas para qualquer valor da temperatura e da concentração eletrônica. A partir destas funções calculamos ainda a energia interna e o calor específico da cadeia, o que permite uma comparação com os resultados obtidos através de outras abordagens.

## MAGNETISMO E MATERIAIS MAGNÉTICOS (Técnicas de Preparação e Caracterização)

– 12/06/97

### GRAPHICAL PROGRAMMING FOR BROADBAND PULSE NMR SPECTROSCOPY

S. B. BELMONTE, I. S. OLIVEIRA, A. P. GUIMARÃES

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas*

Automatic broadband pulse NMR experiments involves sweeping in frequency and acquiring absorption signals over several megahertz. Signals are averaged and acquired in quadrature; corrections for gain, phase, baseline subtraction, etc, are made, and the whole experiment is under computer control. Graphical programming has proved to be a convenient way of designing control software for this purpose. We are using the graphical language *Labview* in the automatization of a broadband (20 - 200 MHz) NMR pulse spectrometer. In the present work we report the inclusion of a TECMAG Mini Pulse Kit pulse programmer and a WAVETEK P556 programable attenuator. *Labview* allows straight connection to a parallel port through the OUTPORT *sub VI*. A sequence of two or three pulses with widths and separations ranging from 500 ns to 430 s is generated for spectroscopy or relaxation measurements. The automatic control of the radiofrequency (RF) power allows the measurement of several NMR spectra, each one for a different RF power level. This type of study is important for the identification of domain and domain wall NMR signals in magnetically ordered materials. The use of SUB VI's (corresponding to subroutines in the usual linear programming) allows the straight inclusion of new tasks, keeping the overall program structure tidy and compact.

### Magnetômetro de Haste Ressonante (Reed).

MARIO DE SOUZA REIS JUNIOR, ARMANDO Y. TAKEUCHI, SÔNIA FRANCO DA CUNHA, LUIZ C. SAMPAIO

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas*

Este trabalho consiste na montagem do Magnetômetro Reed. Este aparato tem uma grande sensibilidade, sendo capaz de medir a magnetização de amostras nas quais magnetômetros convencionais (Amostra Vibrante, Extração, e outros), não são capazes de medir. Portanto, ideais para realizar medidas magnéticas em filmes finos ou nanopartículas. Artigos de referência conseguem até  $10^{-11}$  emu de sensibilidade. Este aparelho tem uma montagem muito sensível, por se tratar de pequenas dimensões, consistindo de um reed (haste flexível de quartzo, da ordem de 6 cm), uma cerâmica piezoelétrica (10 x 2 x 0.5 mm), dois conjuntos de bobinas geradoras de campos magnéticos, sendo um constante e outro com gradiente alternado no tempo. A cerâmica piezoelétrica é fixada na haste, que por sua vez sustenta a amostra na sua outra extremidade. A amostra é submetida a um gradiente de campo magnético, respondendo, assim, com uma força proporcional à magnetização. Esta força faz com que a haste oscile e transmita esta oscilação para o piezoelétrico que converterá esta força mecânica em um sinal elétrico. A frequência do campo magnético alternado é tal que o sistema mecânico esteja em ressonância a fim de podermos maximizar o sinal de resposta do piezoelétrico. O campo magnético constante é usado para orientarmos os momentos magnéticos da amostra e assim traçar, por exemplo, uma curva de histerese. O sistema está sendo aperfeiçoado, otimizando o conjunto de bobinas, haste e piezoelétrico, para que possamos obter uma melhor sensibilidade nas medidas. No protótipo em construção está sendo medido, à temperatura ambiente, amostras de Ni e ímãs permanentes, com campo constante aplicado variando até 300G. Para estas amostras conseguimos obter, com sucesso, curvas de magnetização por campo externo com uma ressonância típica de 73 Hz.

### EFEITOS DE MOAGEM SEVERA SOBRE AS PROPRIEDADES DE $DyFe_2$

RICHARD ZAHNAN, KLINGER MARCOS BARBOSA ALVES, CARLOS LARICA  
*Depto. de Física, UFES*

Este trabalho apresenta os efeitos produzidos pela moagem sobre a estrutura cristalina e as interações hiperfinas nos sítios de Fe do composto intermetálico  $DyFe_2$ . O composto  $DyFe_2$  tem estrutura cúbica do tipo fase de Laves C-15 e se orienta de modo ferrimagnético com uma temperatura de transição de 635 K. A direção de fácil magnetização coincide com  $[0\ 0\ 1]$ , com um momento de saturação de  $5,75 \mu_B/mol$ . A moagem foi realizada em moinho do tipo SPEX, com o material contido em um recipiente de aço sob atmosfera de argônio de alta pureza. A amostra inicial foi preparada em forno de arco elétrico sob atmosfera de argônio ultrapuro, a partir dos componentes Dy e Fe em proporção estequiométrica, e submetida a um tratamento térmico a  $850^\circ C$  durante 96 horas. Os efeitos da moagem foram

observados por medidas de difração de raios-X e espectroscopia Mossbauer nos sítios de Fe. Os resultados indicam que a moagem induz inicialmente uma acentuada segregação entre Dy e Fe: o espectro Mossbauer para 25h de moagem é semelhante ao do Fe metálico. A continuidade do processo para longos tempos de moagem (>25 h) produz uma redução no tamanho dos grãos e uma recombinação dos elementos constituintes numa fase amorfa, gerando espectros Mossbauer a baixas temperaturas caracterizados por uma distribuição de campos magnéticos hiperfinos e efeitos de superparamagnetismo. Os resultados experimentais são discutidos e comparados com os efeitos obtidos nos sistemas  $YFe_2$  e  $GdFe_2$ .

### Magnetômetro a Efeito Kerr baseado em LEDs

ADRIANA P. B. TUFALÉ, ANTONIO DOMINGUES DOS SANTOS

USP, Instituto de Física, São Paulo, Brasil

YVES SOUCHE

Laboratoire de Magnétisme Louis Néel, CNRS, France

Atualmente há um rápido desenvolvimento das técnicas de armazenamento de informações digitais em meios magneto-óticos. A gravação das informações é termomagnética; os meios atualmente utilizados são filmes finos amorfos de terra-rara/metal de transição; e na leitura das informações gravadas se utiliza o Efeito Kerr magneto-ótico. Atualmente a densidade de informação conseguida com discos magneto-óticos é aproximadamente 2 vezes maior que a dos discos rígidos (winchester drives) e mais que 1000 vezes maior que os atuais disquetes. O comprimento de onda da luz utilizada é um fator limitante para densidade de informações que pode ser armazenada no meio de gravação. O limite de difração luminosa para diodos laser vermelhos projeta uma densidade de até 100Mbits/cm<sup>2</sup>. Mas o uso de diodos laser azuis permitirá quadruplicar essa densidade. Ainda não temos no mercado diodos laser azuis, mas seu desenvolvimento está em ritmo acelerado e a previsão é que em poucos anos estarão disponíveis. Porém já se dispõe de LEDs azuis. Apresentamos um magnetômetro a Efeito

Kerr que utiliza um LED de alto brilho como fonte luminosa, um foto-diodo como detetor, polarizadores, um lock-in, que sincroniza a detecção do sinal, e um gerador de função, que modula o LED. O campo magnético é aplicado por bobinas de Helmholtz (H=150 Oe). Esta é uma modificação de um magnetômetro a Efeito Kerr (utilizado na caracterização magneto-ótica de filmes de terra rara/metal de transição) que utilizava um diodo laser vermelho, no qual substituímos a fonte luminosa. Essa modificação trouxe a possibilidade de utilizarmos comprimentos de ondas diferentes, o equipamento já está funcionando com LEDs azul ( $\lambda=430\text{nm}$ ), verde ( $\lambda=565\text{nm}$ ) e vermelho ( $\lambda=660\text{nm}$ ). Para filmes ricos em Co e Fe verificamos a queda do sinal magneto-ótico

com o aumento do comprimento de onda da luz. Trabalho parcialmente financiado por CNPq, FAPESP e FINEP.

### Caracterização Magnética das Fases Precursoras da Ferrita $YFeO_3$

GERARDO FABÍAN GOYA, HERCÍLIO RODOLFO RECHENBERG, RENATO FIGUEIREDO JARDIM

Instituto de Física da Universidade de São Paulo.

ADÉLIA MARIA LIMA DA SILVA, JIVALDO DO ROSÁRIO MATOS

Departamento de Química Fundamental da Universidade de São Paulo.

As ferritas  $RFeO_3$ , onde R é uma terra rara, possuem um grande interesse tecnológico desde que elas são componentes fundamentais nas superfícies de fitas e discos magnéticos, e dos sistemas de leitura/escritura mais utilizados. Os materiais utilizados nestas aplicações requerem propriedades estruturais e magnéticas controladas, sendo portanto de grande importância o conhecimento da dinâmica de formação de compostos intermediários no processo de síntese, e sua relação com as propriedades dos óxidos finais. A partir deste interesse, desenvolvemos um novo método de síntese de ferritas, utilizando o método de coprecipitação numa suspensão de  $R_2O_3$  e  $FeCl_3$  em proporções estequiométricas com HCl concentrado. Neste trabalho, apresentamos um estudo da cinética de formação do óxido  $YFeO_3$ , caracterizando as propriedades magnéticas dos compostos intermediários no processo de síntese. Os hidroxicarbonatos precursores foram estudados através de análise termogravimétrica (TG), difração de raios-X (DRX), e espectroscopia Mössbauer. A curva TG do precursor apresentou três regiões de composição estável, centradas aos 230, 510 e 880°C. Estas temperaturas foram escolhidas para investigar as transformações de fase durante o calcinação do precursor. Os dados DRX do precursor obtido a partir da coprecipitação indica baixa cristalinidade do sistema, composto principalmente pelos hidroxicarbonatos de partida. O espectro Mössbauer desta amostra confirma a grande variação dos entornos cristalinos do  $Fe^{+3}$ , mostrando sinais de relaxação magnética devido provavelmente ao pequeno comprimento dos grãos resultantes da coprecipitação. Os parâmetros hiperfinos dos correspondentes espectros Mössbauer das amostras calcinadas a 235, 500 e 900 C mostram uma transformação gradual dos hidroxicarbonatos de partida num aumento da ortoferrita para maiores temperaturas de calcinação. Para a amostra calcinada a 990°C, observa-se segregação de pequenas quantidades da fase  $Y_3Fe_5O_{12}$ , observada também pelos raios-X.

Apoio financeiro FAPESP

### Susceptômetro AC simples para medidas rápidas em baixas temperaturas

WALTER SYDNEY DUTRA FOLLY, ÂNGELO MÁRCIO DE SOUZA GOMES, WALLACE DE CASTRO NUNES, MIGUEL ALEXANDRE NOVAK  
*Universidade Federal do Rio de Janeiro*

Apresentamos neste trabalho, o desenvolvimento de um susceptômetro que permite a realização de medidas rápidas de susceptibilidade magnética nas faixas de frequência de 500 Hz a 125 KHz, e temperatura entre 4K e 300K. De construção compacta, o susceptômetro opera por inserção direta em containers de hélio líquido, sendo necessário apenas um amplificador lock-in de dois canais, um multímetro digital com saída para interface GPIB, um amplificador de potência e um computador. Todas as operações envolvidas no processo de medição, com exceção da fixação de temperatura, são controladas pelo computador. O susceptômetro completo é composto pelo conjunto de bobinas de indutância mútua e pelas seguintes unidades: Unidade de medição de temperatura; unidade de balanceamento; unidade de posicionamento da amostra e unidade gerenciadora. O conjunto de bobinas de indutância mútua, é um transformador solenoidal com dois secundários e enrolados em oposição dentro dos quais a amostra é posicionada. A unidade de medição de temperatura é composta de um diodo de silício e do multímetro operando em medida de resistência a quatro fios. A unidade de balanceamento permite que pequenos desbalanceamentos sejam convenientemente cancelados. A medição do campo magnético rms é feita de forma indireta através da medição da corrente aplicada na bobina primária. A unidade de posicionamento da amostra é composta de um servo-mecanismo controlado pelo computador que tem a função de posicionar a amostra no centro de cada secundário durante o processo de medição e a unidade de gerenciamento é o próprio computador, que comanda as operações de todos os demais equipamentos. Foram realizadas medidas de calibração utilizando-se várias amostras, para as quais obtiveram-se excelentes resultados quando comparados com os obtidos de um magnetômetro/susceptômetro comercial.

### X-RAY CHARACTERIZATION OF ANTIFERROMAGNETIC CHROMIUM-VANADIUM ALLOYS

PAULO CESAR DE CAMARGO  
*Laboratório de Materiais, Universidade Federal do Paraná - UPPR*

ADILSON J. A. DE OLIVEIRA

*Gr. de Superc. e Magn., Universidade Federal de São Carlos - UFSCar*

FABIANO YOKAICHIYA, FÁBIO M. PRADO, IRIS L. TORRIANI

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

CARLOS GILES

*Laboratório Nacional de Luz Sincrotron - LNLS*

Chromium and Chromium-Vanadium antiferromagnetic alloys can be called "pure itinerant antiferromagnets", meaning that there is no local moments associated to their antiferromagnetic ordering [1]. From the theoretical point of view the nature of the magnetic transition is still being explored [2]. From the experimental side good quality samples are required, because, adding as little as 0.2 at % of vanadium in chromium may change the transition from first order to second order [2]. Non-uniform internal stresses can shift the Néel temperature and broaden the transition, this result is readily understood considering the pressure dependence of the Néel temperature is about  $-5K/Kbar$ . An extreme case which is a good illustration of the internal stresses effect is the first observation of the Néel transition with neutron diffraction on Chromium powder [2], which showed  $T_N \cong 475K$ , instead of correct value of  $311K$ . Recently, several publications on single crystals have appeared in the literature, however, in most cases the crystal characterization has been limited to a Laue picture to determine the crystal directions, however, the determination of the mosaic width (FWHM) is a parameter which would help in understanding several discrepancies which appear in the literature. One example of this was Fawcett's work [3], where it was assumed that the broadening of the transition on  $Cr - 0.2at\%V$  was due to the chemical disorder caused by Vanadium atoms. Latter, it was proved that chemical disorder did not cause the broadening, which was due to bad sample quality [4]. Recently, J. P. Hill has showed that itinerant magnetism of Chromium can be studied with X-ray scattering [5], however, for that investigation crystal quality is of major importance. X-ray characterization of Chromium-Vanadium alloys have 0.2, 0.67, 1.0 and 1.5 % V and pure Chromium was performed and the results are compared with the literature, stressing on the aspects where crystal perfection is of major importance.

- [1] E. Fawcett et al, *Rev. Mod. Phys.*, **66**, (1994) 25-127.
- [2] R. S. Fishman et al, *Phys. Rev. B*, **45**, (1992) 12306-12318.
- [3] E. Fawcett et al, *Europhys. Letters* **1**, (1986) 473.
- [4] P. C. de Camargo et al, *J. Phys. F*, **18**, (1988) 9.
- [5] J. P. Hill et al, *Phys. Rev. B*, **51**, (1995) 10336-10344.

## DESENVOLVIMENTO DE UM MAGNETÔMETRO A EFEITO KERR POLAR

CARLOS EDUARDO SANTI, ANTONIO DOMINGUES  
DOS SANTOS

*Instituto de Física da USP*

Estamos estudando filmes finos de ligas magnéticas amorfas formadas por metais de transição (Fe, Co) e terras raras (Tb, Dy, Gd), que são usadas como mídia de gravação magneto-óptica e apresentam anisotropia magnética perpendicular ao plano do filme. O magnetômetro Kerr que temos disponível, permite medidas nas configurações transversal e longitudinal que são incompatíveis com as medidas que pretendemos fazer, pois como a anisotropia magnética de nossas amostras é perpendicular ao plano do filme, a sua caracterização magneto-óptica deve ser feita na configuração Kerr polar. Este fato nos levou a dedicar parte de nosso tempo ao desenvolvimento de um magnetômetro que suprisse esta necessidade. Para obter um equipamento de fácil confecção e também de baixo custo, adaptamos um CD-head como sendo nossa fonte de luz laser e seu controle está sendo feito com um circuito eletrônico semelhante aos usados em leitura de compact disk (CD). Um eletroímã construído em nosso laboratório está sendo usado para magnetizar as amostras e pode gerar campos de até 1,8 kOe. Os atuais programas de aquisição de dados do magnetômetro Kerr transversal serão adaptados para esta nova configuração. Apresentaremos dados de montagem deste magnetômetro e de caracterizações feitas com ele.

(CNPq)

### Preparação e Análise Magnética e Estrutural de Ligas Fe-Cu Preparadas Pelo Processo de Moagem Severa

DAVIES WILLIAM DE LIMA MONTEIRO, CARLOS  
LARICA, KLINGER MARCOS BARBOSA ALVES  
LEMAG - Departamento de Física - Universidade Federal  
do Espírito Santo

Os elementos Fe e Cu são insolúveis nos estados líquido e sólido e portanto não é possível formar uma liga metálica do tipo Fe-Cu pelo processo de fusão dos dois elementos, exceto nos limites extremos de diluição. Destarte, é necessário que se aplique técnicas alternativas para que ocorra a formação da liga almejada. Utilizou-se a técnica de moagem (mechanical alloying) com um recipiente e um cilindro maciço interno, ambos de aço inox. Preparou-se ligas Fe-Cu com duas concentrações diferentes de Ferro: 30 e 40%. Todo o processo, inclusive a manipulação das amostras, foi realizado sob atmosfera de gás argônio com o intuito de prevenir reações oxidantes. Através do acompanhamento sis-

temático das amostras para vários tempos de moagem e com o auxílio das análises de difração de raio-x e espectroscopia Mössbauer observou-se em ambas as concentrações a transformação dos pós iniciais dos elementos Fe e Cu em uma liga Fe-Cu metaestável com estrutura cristalina cúbica de face centrada e com os átomos de Fe e Cu distribuídos desordenadamente nos sítios da rede. As temperaturas de ordenamento magnético das ligas puderam ser estimadas através de diferentes medidas como susceptibilidade AC e Mössbauer tanto em temperaturas abaixo como acima da ambiente, sendo 283 K e 385 K para as ligas de 30 e 40% de Fe, respectivamente. Realizou-se também o tratamento térmico em uma amostra da liga formada  $Fe_{0.4}Cu_{0.6}$  para várias temperaturas até 700 K, o que induziu a segregação dos elementos originais, já que 695 K é a temperatura em torno da qual uma reação exotérmica fora máxima, conforme análise de DSC. Conclui-se que pelo processo de moagem torna-se possível a obtenção de ligas Fe-Cu, cujas etapas de formação podem conter informações relevantes para o entendimento dos mecanismos de transformação e interação de redes cristalinas sob condições locais de pressão e temperatura criadas pelos constantes choques mecânicos ocorridos dentro do recipiente de moagem.

### Analysis of magnetic bubbles coarsening with digital image processing

F. L. DE MELLO, M. P. DE ALBUQUERQUE, G. F.  
ALEX, L. C. SAMPAIO

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF/CNPq.*

P. MOLHO

*Laboratoire de Magnetisme Louis Néel - CNRS  
(Grenoble/France)*

A magnetic bubble pattern is a domain structure obtained in a magnetic garnet film<sup>1</sup>. When a magnetic field is applied in the direction of the magnetization in the bubbles, one can see a coarsening of the pattern driven by the collapse of small bubbles leading to a disordered cellular pattern. We use digital image processing tools to analyze and quantify the coarsening of the structure. Image processing tools applied to physics experiments are in fact an information process work. An image treatment means transform it successively in order to make the information inside more accessible in terms of computing. In this work we use two distinct software packages: NIH-Image and Visilog. We can in both packages add special procedures dedicated to our problems. Image processing consist of a classical treatment, like background corrections, image binarization and bubble labeling, which leads to an individual bubble parameters such as surface, perimeter, .... In a second and more specific treatment we can investigate

the evolution of each category of bubble and observe, in the magnetic case, the Von Neumanns law. To classify each bubble we have applied the radial distribution function distances algorithm, between bubble centers of mass. Each bubble is then classified depending on its neighborhood. The surface is then computed for each cell group.

<sup>1</sup>- M.P. de Albuquerque and P.Molho, "Evolution of magnetic cellular pattern under field cycles"; Journal of Magnetism and Magnetic Materials . 140-144 (1995) 1869-1870.

### Caracterização de Filmes Finos da Fase $Fe_{17}Pr_2N_x$ Obtidos por "Flash Evaporation".

ALEXANDRE URBANO

Universidade Estadual de Londrina - UEL

SERGIO GAMA, EDIVALDE MORAES, CARLOS RIBEIRO

Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP

Filmes finos das fases  $Fe_{17}TR_2N_x$ , com TR = terra rara, são de muito interesse devido as boas qualidades destes materiais na forma "bulk", principalmente quando TR = samário, que apresenta anisotropia magnética uniaxial. Na forma de filmes finos estas propriedades são mantidas, e estes podem ainda exibir anisotropia magnética perpendicular e altas coercividades. Neste trabalho nós descreveremos a preparação de filmes finos da fase  $Fe_{17}Pr_2N_x$  utilizando a deposição relâmpago como técnica de preparação, bem como as caracterizações estruturais e magnéticas dos mesmos. A obtenção do pó para a deposição "flash" foi conseguido por fusão a arco em atmosfera inerte de argônio, seguido de tratamento térmico de 1.000 °C por 10 dias. As amostras foram então trituradas e peneiradas até uma dimensão de 200 mesh. Os filmes foram depositados em uma evaporadora da marca Balzers, usando fontes de evaporação de Ta e W. A pressão base de trabalho foi tipicamente  $10^{-6}$  Torr. Os melhores resultados foram obtidos utilizando substratos de cobre laminado, sendo a espessura dos filmes da ordem de 3 a 5.000 Å. Depois da deposição os filmes foram tratados termicamente em um forno de lâmpadas sob atmosfera ultra pura de argônio. O intervalo de temperatura foi de 300 a 700°C, sendo o tempo de tratamento variado de 10 a 180 min. Após o tratamento térmico a amostra era nitretada no forno de lâmpadas sob atmosfera ultra pura de nitrogênio a 400°C por 10 min. As caracterizações estruturais e magnéticas revelam a obtenção do composto no filme bem como os efeitos da nitrogenação, que desloca os picos de difração para baixos ângulos e varia a temperatura de Curie dos mesmos.

### Absolute measurements of the AC-susceptibility of cylindrical samples of arbitrary aspect ratio

WAGNER DE ASSIS CANGUSSU PASSOS, RUBENS DE ANDRADE JUNIOR, WILSON AIRES ORTIZ

Grupo de Supercondutividade e Magnetismo Departamento de Física Universidade Federal de São Carlos

In a recent paper, de Faria et alli<sup>(1)</sup> developed a relationship between the output voltage of an AC-susceptometer ( $V = V_R - jV_L$ ) and the complex susceptibility of a cylindrical sample ( $\chi = \chi' + j\chi''$ ).

$$V_L = -\Gamma a^2 \left( \chi' + \frac{(1 + \chi')\chi''}{4} \mu_0 a^2 \omega \sigma \right) F_L(l)$$

$$V_R = \Gamma a^2 \left( \chi'' - \frac{(1 + \chi')^2 - \chi''^2}{8} \mu_0 a^2 \omega \sigma \right) F_R(l)$$

where  $l$  is the sample length,  $a$  is its radius,  $\sigma$  is the sample conductivity,  $\Gamma$  is a calibration constant,  $F_{L,R}(l) = 1 - \exp(-\frac{l}{2\Delta_{L,R}})$ , and  $\Delta_{L,R}$  are parameters to be determined experimentally. Based on a semi-empirical approach, they have also confirmed the validity of their relations for samples of pure copper. As the relationship involves not only  $\chi$ , but also the sample conductivity,  $\sigma$ , and considering that many systems experience dramatic changes in  $\sigma$  while undergoing a phase transition (e.g., superconductors and metallic spin-glasses) it becomes extremely important to validate the above mentioned relationships for different materials, in order to properly interpret experimental data taken near such phase transitions. In this work we have studied the AC-susceptibility of a family of good-quality cylindrical samples of the high-temperature superconductor  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ . The samples were made by the solid state reaction method in oxygen atmosphere. We started from Cu and Y oxides and Ba carbonate, which mixture was calcinated at 850 °C and sintered as a cylinder at 930 °C. X-ray diffraction analysis show only the  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  phase, confirming the quality of the sample. Samples were cut from the 2.5 mm diameter sintered cylinder, with lengths ranging from 0.5 to 19.0 mm. AC-measurements were carried out in a high-precision homemade susceptometer, and have validated those relationships previously derived by de Faria and co-workers.

(1) C. C. Faria, A. J. A. Oliveira, F. M. Araújo-Moreira and W. A. Ortiz, IEEE Trans. on Magn., 31, 6, p. 3403-3405, Nov 1995.

### Obtenção de Nitretos de $Fe_{17}Sm_2$ por meio da Técnica de Nitretação a Plasma.

ROBERTO CÂMARA DE ARAÚJO, SÉRGIO GAMA,  
EDIVAL DE MORAIS  
UNICAMP

Desde a descoberta em 1990 por Coey e Sun [1] de nitretos de  $Fe_{17}TR_2$  (TR=Terra Rara) para aplicação em ímãs permanentes, muitos trabalhos têm sido desenvolvidos com esses nitretos afim de compreendê-los cada vez melhor. Atenção especial tem sido dado ao nitreto  $Fe_{17}Sm_2N_3$ , uma vez que este é o único da série dos nitretos de Fe-TR que apresenta anisotropia uniaxial. Neste trabalho serão apresentados os resultados da obtenção do nitreto de  $Fe_{17}Sm_2$  por meio da técnica de nitretação a plasma, que tem sido largamente utilizada para melhorar a resistência de aços ao desgaste mecânico. Para esse trabalho foi montado em nosso laboratório uma câmara de nitretação a plasma. Através de medidas de Análise Termomagnética (ATM) e Difração de Raios - X estudamos a influência da pressão, temperatura e composição da mistura da atmosfera nitretante, composta de Hidrogênio mais Nitrogênio gasoso, no processo de nitretação das ligas de  $Fe_{17}Sm_2$ . Esses resultados mostram que o processo pode ser bem utilizado numa faixa de pressão de 2 a 15 torr e numa faixa de temperatura de 300 a 500 °C. Esses resultados mostram também que a variável mais importante nesse processo de nitretação é a quantidade de Hidrogênio presente na mistura. Resultados de ATM e Difração de Raios - X mostram também que há uma decomposição da fase original  $Fe_{17}Sm_2$ , quando a percentagem de Hidrogênio na atmosfera nitretante é maior que 50%. Neste trabalho faremos também uma comparação entre o método utilizado por nós e o método convencional de obtenção dos nitretos de Fe-Sm.

[1] Coey, J. M. D. and Sun, H. J. ; J. Magn. Magn. Mater. 87 L251, 1990.

### CARACTERIZAÇÃO DE FILMES DE $Pr_2Fe_{17}$ e $Pr_2Fe_{17} + F$ POR XPS E ESPECTROSCOPIA MÖSSBAUER.

JOSÉ DOMINGOS ARDISSON, WALDEMAR AUGUSTO ALMEIDA MACEDO, MAXIMILIANO DELANY MARTINS, PEDRO LANA GASTELOIS  
Laboratório de Física Aplicada - CDTN/CNEN  
ABA ISRAEL COHEN PERSIANO  
UFMG

A presença da alta saturação magnética, de altas temperaturas críticas ( $T_c$ ) aliada à anisotropia uniaxial encontrada em alguns dos compostos a base de Terras Raras e metais de transição 3d, com estequiometria  $R_2TR_{17}$ , e com adições intersticiais de carbono, nitrogênio, oxigênio ou fluor, tornam esses materiais

interessantes para aplicações em ímãs permanentes e, mais recentemente, em filmes magneto-ópticos. Neste trabalho são investigados filmes finos de  $Pr_2Fe_{17}$  e  $Pr_2Fe_{17} + fluor$  obtidos a partir de suas ligas básicas. Na fluoretação da liga básica foi utilizado o processo de difusão lenta sob baixa pressão parcial de fluor à temperatura de 200° por 30 dias. Os filmes finos foram evaporados por sputtering DC sob fluxo de argônio ultra puro à pressão de  $10^{-2}$  mbar e depositados sobre substrato de titânio, até uma espessura de aproximadamente 400 Å. Os filmes obtidos foram caracterizados por espectroscopia de fotoelétrons excitados por raios X (XPS), utilizando radiação de 1253,6 eV ( $MgK\alpha$ ) e por espectroscopia Mössbauer de elétrons de conversão (CEMS), com fonte de  $^{57}Fe$  em matriz de Rh. Os perfis composicionais, para os primeiros 100 Å da superfície dos filmes, obtidos por XPS indicam que a relação Pr:Fe se mantém constante, nos dois sistemas analisados. Os resultados obtidos por CEMS, à temperatura ambiente, evidenciam que a fase  $Pr_2Fe_{17}$  é predominante apenas nos filmes obtidos a partir dos alvos fluoretados, nos quais encontramos aproximadamente 10% de  $Fe - \alpha$ . Esses resultados confirmam a estabilidade química dos filmes obtidos a partir de compostos  $Pr_2Fe_{17}$  fluoretados. Por outro lado, os filmes obtidos a partir de  $Pr_2Fe_{17}$  resultaram em aproximadamente 90% de  $Fe - \alpha$ . Isso mostra que esses filmes passam por um processo de degradação durante a deposição.

### SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE $Fe$ EM $Al_2O_3$

ARMINDO SANTOS, JOSÉ DOMINGOS ARDISSON,  
WALDEMAR AUGUSTO DE ALMEIDA MACEDO  
LABORATORIO DE FISICA APLICADA, CDTN/CNEN  
ELIAS B. TAMBOURGI  
FEQ/UNICAMP

Usamos o Processo Sol-Gel para sintetizar uma estrutura granular de nanopartículas de ferro em matriz de alumina ( $Al_2O_3$ ), com teores de 3.0%, 5.8% e 7.8% de  $Fe$ , conforme determinado por fluorescência de raios X (FRX). Procedemos a tratamentos térmicos diferenciados de amostras com 7.8% de  $Fe$ , resultando na Série A (material seco a 353 K e reduzido sob  $H_2$  a 873 K e 1273 K, por 2 horas) e na Série B (material seco a 353 K, calcinado, ao ar, em temperaturas crescentes variando de 373 K até 1473 K, seguido de redução a 873 K, sob  $H_2$ , por 2 horas). As amostras obtidas foram caracterizadas por difração de raios X (DRX), espectroscopia Mössbauer  $^{57}Fe$  (MS) e magnetometria de amostra vibrante (VMS). Nossos resultados mostraram para a Série A uma redução de 16% (873 K) e 72% (1273 K) do  $Fe$  em  $\alpha - Fe$ , com coercitividade de 590

Oe (873 K) e 363 Oe (1273 K) e magnetização de saturação de 2.03 (873 K) e 9.35 (1273 K) emu/g. Para a Série B obtivemos redução por volta de 24%, coercitividades de 554 Oe (573 K), 816 Oe (1073 K) e 380 Oe (1273 K) e magnetização de saturação de 2.42 (573 K), 2.36 (1073 K) e 3.86 (1273 K) emu/g. O *Fe* restante, em ambas as Séries, encontra-se principalmente na forma de  $\alpha - Fe_2O_3$  e  $Fe_3O_4$ . Pelos resultados até aqui obtidos, este processo de síntese de nanopartículas magnéticas em matrizes não magnéticas se mostra bastante promissor.

#### DESENVOLVIMENTO DE UM MAGNETÔMETRO ADEQUADO PARA CARACTERIZAÇÃO DE FILMES FINOS MAGNÉTICOS

SIMONE CAMARGO TRIPPE, IVETE FRIDA CYMBAUM  
OPPENHEIM, ANTONIO DOMINGUES DOS SANTOS  
IFUSP

No Laboratório de Materiais Magnéticos (LMM) do IFUSP os filmes magnéticos produzidos, apresentam espessuras da ordem de algumas centenas de angstroms e o momento magnético de saturação é da ordem de  $10^{-5}$  emu. Particularmente essas medidas são difíceis pois os momentos magnéticos estão próximos do limite de sensibilidade do Magnetômetro de Amostra Vibrante (VSM) (EGG-PAR mod.4500). O objetivo deste trabalho é desenvolver um magnetômetro que utilize técnicas que permitam uma primeira análise da qualidade do filme produzido. Neste trabalho descreveremos o desenvolvimento de um VSM e um magnetômetro à gradiente de campo, os quais deverão ser de forma a não exigirem sofisticação de recursos, possibilitando uma construção rápida e com baixo custo. Estes equipamentos possuem configurações de cerâmicas piezoelétricas, as quais podem ser usadas para vibrar a amostra ou então, para detectar o seu deslocamento. O gradiente de campo é gerado através de um conjunto de bobinas sensoras (pick-up), as quais são arranjadas de forma a produzir esse gradiente em uma dada região. O princípio de funcionamento desse magnetômetro pode ser de duas formas. Passando corrente através das bobinas sensoras, ocorre a produção de um gradiente de campo mas, como a amostra é magnetizada por um campo magnético externo, haverá um deslocamento da amostra, o qual é medido através da cerâmica piezoelétrica. Uma outra forma, é o de VSM, onde a magnetização da amostra é feita através de um campo magnético externo, além da vibração da amostra, que é feita por intermédio da cerâmica piezoelétrica; a medida será feita pela variação do fluxo magnético, o qual é detectado nas bobinas sensoras. Será apresentada uma comparação das técnicas utilizadas, bem como as vantagens e des-

vantagens quanto a sua utilização. (Este trabalho foi financiado pelo CNPq).

## MAGNETISMO E MATERIAIS MAGNÉTICOS (Sistemas Granulares) – 13/06/97

### Modelo Semiclássico para a GMR em Sistemas Granulares

LUIS GUSTAVO PEREIRA

Instituto de Física - Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Desde a descoberta da Magnetoresistência Gigante (GMR) do tipo Válvula de Spin ao final da década de 80, até o momento, grandes avanços foram obtidos. O que era inicialmente conhecido apenas em sistemas de multicamadas com acoplamento antiferromagnético entre as camadas magnéticas, foi observado também em sistemas de multicamadas sem acoplamento, assim como em sistemas de "bolhas" magnéticas, os chamados sistemas granulares. Na visão teórica, os sistemas de multicamada são tratados de maneira idêntica, pois o efeito de válvula de spin não depende do acoplamento. Entretanto, o cálculo da GMR para sistemas granulares é um pouco mais complexo. Neste caso existe um conjunto de dificuldades adicionais, como por exemplo, o alinhamento magnético entre as partículas que compõem o granular. Por outro lado, para um sistema granular real, as bolhas magnéticas não são uniformes. Elas apresentam tamanhos diferentes e, com isto, o tratamento teórico do tipo multicamada infinita não pode ser aplicado. Neste trabalho será apresentada uma forma de calcular a GMR para sistemas granulares usando uma expressão analítica para o cálculo da condutividade elétrica obtida para sistemas de multicamadas. O princípio básico do desenvolvimento está em "criar" um sistema com a espessura das bolhas fluando em torno de um tamanho médio. O mesmo procedimento é usado para gerar a matriz. Usando um programa computacional foram efetuadas simulações para diferentes tamanhos de grãos e espaçamentos intergranulares, assim como serão considerados efeitos de temperatura. No presente trabalho também serão discutidas formas alternativas de construir um sistema granular com bolhas magnéticas com seus momentos magnéticos orientados aleatoriamente.

### OPTIMIZAÇÃO DA GMI EM FITAS AMORFAS DE CoFeSiB.

KÊNIA CARVALHO MENDES, FERNANDO LUIS DE ARAUJO MACHADO, ALEXANDRE RICALDE RODRIGUES  
UFPE

No presente trabalho investigamos os efeitos da amplitude da corrente  $I_{ac}$  e do comprimento  $L$  da amostra na magnetoimpedância gigante (GMI), em fitas amorfas de  $Co_{70,4} Fe_{4,6} Si_{15} B_{10}$  na ausência de tratamentos térmicos. As medidas da GMI longitudinal foram feitas a temperatura ambiente em função de  $I_{ac}$  no intervalo  $0.5mA < I_{ac} < 84mA$ , para uma frequência de  $100kHz$ . Investigamos também a dependência angular variando a direção entre  $I_{ac}$  e  $H$ . O principal efeito da variação angular foi introduzir uma forte assimetria no espectro da GMI. Da dependência com  $I_{ac}$  foi observado um crescimento progressivo da GMI para valores de  $I_{ac}$  menores que  $54mA$ , permanecendo em seguida aproximadamente constante e diminuindo para valores maiores que  $68mA$ . O aumento máximo é superior a um fator de 3. Esses resultados estão de acordo com o modelo proposto para GMI em fitas amorfas  $/1/$ . Os efeitos do comprimento da amostra sobre a GMI foram estudados para  $5mm < L < 30mm$  nas configurações longitudinal e transversal, para diferentes valores de amplitude da corrente e para  $f = 100kHz$ . O principal efeito da variação de  $L$  é modificar a dependência da GMI com  $H$ , enquanto que a amplitude varia dentro de um fator de 2. Efeito de tamanho similar é observado também em medidas de permeabilidade magnética. As medidas apresentadas no presente trabalho possibilitam a otimização da GMI em fitas, permitindo atingir valores da ordem de 100%, mesmo em frequências relativamente baixas ( $100kHz$ ).

Trabalho parcialmente financiado pela FINEP, CNPq, CAPES e FACEPE.

[1] F.L.A. Machado and S.M.Rezende, J.Appl.Phys. 79(8), 6558 (1996).

### RELAXATION OF GIANT MAGNETO-IMPEDANCE IN AMORPHOUS WIRES AND RIBBONS

MARIA LUÍSA SARTORELLI, JEROEN SCHOENMAKER, KLEBER ROBERTO PIROTA, MARCELO KNOBEL  
*Instituto de Física "Gleb Wataghin" (IFGW),  
Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP*  
JOÃO PAULO SINNECKER  
*Instituto de Magnetismo Aplicado, Madrid, Spain*

The expanding interest on soft magnetic materials which display the giant magnetoimpedance (GMI) effect is mainly owing to the enormous perspectives of technological applications, mainly as magnetic field sensors. Co-based amorphous wires and ribbons are among the systems which show the largest GMI effect, because they are extremely soft magnetic materials. Ho-

wever, it is well known that the permeability of amorphous samples decays quasilogarithmically after a sudden rearrangement of the domain configuration (magnetic aftereffect, or disaccommodation), and this relaxation should be reflected in the impedance behaviour. In this work we present measurements of the impedance decay after the removal of a saturating magnetic field ( $H = 7.9kA/m$ ), for a  $Co_{68.25}Fe_{4.5}Si_{12.25}B_{15}$  amorphous wire and for CoFeSiB ribbons of different compositions. Both components of the impedance are measured for 16 s after the field removal, and a continuous decay of the impedance is observed, achieving relative values up to 3%, depending on the amplitude ( $i = 0.1-12mA$ ) and frequency ( $f = 100-900kHz$ ) of the driving current. The results are interpreted following the existent aftereffect models. Although the effect is small compared with the total GMI ratio (up to 250 % in the case of the amorphous wire), it is easily detectable and displays a very slow kinetics, and it is therefore important to take it into account in any possible application.

### PROPRIEDADES MAGNÉTICAS E INTERAÇÕES HIPERFINAS NAS LIGAS GRANULARES $(Fe_{0,97} Si_{0,03})_x Cu_{100-x}$ OBTIDAS POR RESFRIAMENTO RÁPIDO.

JOÃO BATISTA MARIMON DA CUNHA, WLADIMIR HERNANDEZ FLORES, SÉRGIO RIBEIRO TEIXEIRA  
UFRGS

Nos últimos anos tem havido considerável interesse na magnetoresistência gigante (GMR) de multicamadas magnéticas, que está associada com a mudança da orientação relativa da magnetização nas sucessivas camadas e resulta do fenômeno de espalhamento dependente de spin nas interfaces ou no interior da camada ferromagnética. Efeitos similares de GMR foram observados em ligas heterogêneas, constituídas de dois metais imiscíveis, um magnético e outro não magnético, obtidas por coevaporação, resfriamento rápido ou compactamento mecânico. O tamanho das partículas magnéticas pode ser aumentado por tratamentos térmicos sucessivos. Como um grande número de parâmetros afeta a GMR, as condições para a otimização da GMR são um tanto empíricas. O entendimento da GMR em ligas granulares é baseado no espalhamento dependente de spin dos elétrons de condução nos grãos magnéticos e na sua interface com a matriz não magnética. Sabe-se que a rugosidade da interface, o tamanho dos grãos magnéticos e sua distribuição são parâmetros importantes que influenciam a GMR em sistemas granulares magnéticos. São investigados as propriedades magnéticas e estruturais das ligas metaestáveis  $(Fe_{0,97} Si_{0,03})_x Cu_{100-x}$  obtidas pelo método de resfriamento rápido (melt-spinning). As primeiras ligas foram preparadas a partir dos componentes pré-fundidos em forno a arco, ocorrendo uma grande perda

de material devido à imiscibilidade dos componentes. Posteriormente, partiu-se dos componentes em pó, misturados e compactados, para depois serem fundidos no forno de indução imediatamente antes do resfriamento rápido. Espectroscopia Mössbauer, difração de raio-X e medidas magnéticas foram usadas para caracterizar o tamanho dos grãos de Fe em função da temperatura de tratamento térmico. Estas propriedades magnéticas e suas relações com composição, tamanho de grão e a presença de Si (disperso no Fe e/ou na matriz de Cu?) são discutidos.

**THE PROPERTIES OF CoCu  
HETEROGENEOUS RIBBONS  
TRANSFORMED BY ANNEALING**

M. G. M. MIRANDA, G. J. B. RODRÍGUEZ, A. B.

ANTUNES, M. N. BAIBICH

*Instituto de Física, UFRGS*

M. KNOBEL

*Instituto de Física Gleb Wataghin, UNICAMP*

Granular ribbons of composition  $Co_{10}Cu_{90}$  show giant magnetoresistance (GMR) when heat treated, usually an anneal at around  $500^{\circ}C$  for 1 hour in an inert atmosphere. Another approach with better results uses "flash annealing", where high temperatures are reached in a very short period of time. In order to understand the kinetics of the transformation of the original ribbons into the aggregate with ideal Co clusters size and

distribution, we have measured the resistivity of these materials during anneals at different heating rates, based on the assumption that, even in the case of Joule self-heating, the thermodynamic parameters do transfer from one type of treatment to the other. The hysteresis curves for these samples, measured at room temperature, show a clear change in size for the magnetic grains, whether considering a pure superparamagnetic interaction (SPM) or a small ferromagnetic contribution added to the SPM. The isochronal heat treatments show a clear two step process. Most of the results in the literature consider only the initial one, perhaps ignoring the existence or the consequences of this latter phase segregation, which starts to be noticeable above  $400^{\circ}C$ . This is most probably associated to the solubility limit that defines a high temperature, high Cu concentration phase, as seen in standard phase diagrams. We have also measured, at low temperatures, the thermopower, resistivity and magnetoresistance of these alloys at different stages of the annealing process. The experimental results clearly show that both the thermopower and GMR are highly dependent on the size and average distance between the precipitates, being a good parameter for the evolution of the induced transformations. The low temperature resistivity shows a distinct minimum around 20 K which disappears upon annealing at even the lowest temperatures.

## MAGNETISMO E MATERIAIS MAGNÉTICOS (*Magnetismo e Materiais magnéticos*)

### MAGNETISMO E MATERIAIS MAGNÉTICOS (*Magnetismo e Materiais Magnéticos III*)

– 12/06/97

#### EXPANSÃO EM CUMULANTES PARA O MODELO DE HUBBARD A TEMPERATURA FINITA

MARCOS SERGIO FIGUEIRA, ENRIQUE VICTORIANO  
ANDA  
UFF  
FLAVIO NOGUEIRA  
UERJ

O Hamiltoniano de Hubbard, extensamente usado para descrever sistemas fortemente correlacionados, é estudado através de uma expansão perturbativa em cumulantes, para a função de Green (FG), em torno do limite atômico (W. Metzner, *Phys. Rev. B* **43**, 8549 (1991)). Nesta expansão a integral de transferência de elétrons, entre diferentes sítios atômicos, é tomada como Hamiltoniano de perturbação do sistema. A expansão só envolve diagramas conectados com somas irrestritas sobre a rede, o que permite formular um teorema do tipo “linked cluster”.

As aproximações propostas incluem cumulantes de até quatro operadores com e sem termo de “spin-flip”, vestindo autoconsistentemente os propagadores e que combina de todas as formas possíveis os diagramas de cadeias e anéis simples de qualquer tamanho ((M. S. Figueira, G. G. Martinez e M.E. Foglio, *Phys. Rev. B* **50**, 17933 (1994)). Vamos nos limitar ao caso de metade preenchimento do modelo. Essa aproximação satisfaz as relações de completude nos números de ocupação e a introdução dos termos de “spin-flip” geram um pico tipo ressonância de Kondo no nível de Fermi, que para um dado valor da correlação  $U$ , desaparece com o aumento da temperatura de forma contínua e que se torna mais intenso à medida que a temperatura diminui. Da pico também desaparece de forma contínua. São apresentados resultados para a densidade de estados em função da energia de correlação  $U$  e dos números de ocupação.

#### ON THE KONDO PEAK IN THE HUBBARD MODEL: SUM RULES AND EQUATION OF MOTION APPROACH

JOSÉ JESÚS RODRÍGUEZ NÚÑEZ, ENRIQUE VICTORIANO ANDA, MARCOS SERGIO FIGUEIRA  
UFF

We apply the method of moments or sum rules of Nolting (W. Nolting, *Z. Physik* **225**, 25 (1972)) to study the appearance of the Kondo peak in the Hubbard model. We use a novel technique which combines the equation of motion approach with the moment formalism. We postulate two antisymmetric poles for the two-particle Green function,  $\Gamma^{(2)}(\vec{k}, \omega)$ . Its weights and energy spectra are calculated self-consistently by means of sum rules (or moments) derived in this paper. The choice of antisymmetric poles for  $\Gamma^{(2)}(\vec{k}, \omega)$  allows us to use only three sum rules. The two poles for  $\Gamma^{(2)}(\vec{k}, \omega)$  produce a three pole structure for the one-particle Green function,  $G(\vec{k}, \omega)$ , since they are related by Dyson equation of motion. We present results for the self-consistent band structure and the density of states. We focus our attention to the Kondo peak as function of temperature,  $T$ , and interaction,  $U$ . We compare the results of the present calculation with recent theoretical calculations done by one of the authors (J. J. Rodríguez Núñez and M. Argollo de Menezes (to be submitted)) which is based on a two pole structure for the self-energy. The Kondo peak is a structure present in the Hubbard model in finite dimensions. Its presence has also been determined in infinity dimensions (A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth and M. J. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **66** 13 (1996).

#### BEYOND THE HUBBARD-I SOLUTION WITH A ONE-POLE AND A TWO-POLE SELF-ENERGY: MOMENT APPROACH

J. J. RODRÍGUEZ NÚÑEZ, M. ARGOLLO DE MENEZES  
UFF

We have postulated a single pole for the self-energy,  $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ , looking for the consequences on the one-particle Green function,  $G(\mathbf{k}, \omega)$  in the Hubbard model. We find that  $G(\mathbf{k}, \omega)$  satisfies the first two sum rules or moments of Nolting (W. Nolting, *Z. Physik* **225**, 25 (1972)) for any values of the two unknown  $\mathbf{k}$  parameters of  $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ . In order to find these two parameters we have used the third and four sum rules of Nolting.  $G(\mathbf{k}, \omega)$  turns out to be identical to the one of Nolting (*Z. Physik* **225**, 25 (1972)), which is beyond a Hubbard-I solution (T. Schneider, M.H. Pedersen and J. J. Rodríguez-Núñez, *Z. für Physik B* **100**, 263 (1996)). Furthermore, we have also postulated a two-pole Ansatz for  $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$  which is equivalent to a three-pole Ansatz for  $G(\mathbf{k}, \omega)$ . In the latter case, we have fixed two of the frequencies. This Green's function is also beyond the Hubbard-I solution. Fixing two of the frequencies allows us to use only two sum rules

(moments). We discuss the relevance of our calculations with respect to a possible Kondo peak for which we present numerical results for  $U/t = 4.0$  and  $\rho = 0.1$ . We compare our results with a different approach by one of the authors (J.J. Rodríguez Núñez, E. V. Anda and S. M. Figueira (to be submitted)). Here the authors use a two-pole ansatz for the two-particle Green function.

### Cálculo da susceptibilidade magnética da rede de Anderson usando a expansão em cumulantes

MARIO E. FOGLIO

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

MARCOS S. FIGUEIRA

*Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense, RJ*

Os elétrons localizados da rede de Anderson se movimentam devido a hibridização com os elétrons não correlacionados da banda de condução, e como consequência sua susceptibilidade magnética é fortemente modificada a baixas temperaturas. No presente trabalho consideramos o modelo de Anderson no limite de repulsão Coulombiana infinita entre os elétrons localizados. Usando médias cumulantes, é possível obter uma expansão diagramática livre de problemas de sítio excluído, e para a qual vale um teorema do tipo "linked clusters" (M. S. Figueira, M. E. Foglio e G. G. Martinez, Phys. Rev. B50, 17933 (1994)). Usamos essa técnica para calcular a susceptibilidade magnética  $\chi_f$  dos elétrons localizados em presença de uma hibridização local.

Em outro trabalho mostramos que a função de Green (FG) exata, no limite de dimensão infinita da rede de Anderson, pode ser expressa em função de um cumulante efetivo. Usando o modelo atômico como ponto de partida, calculamos aproximadamente este cumulante efetivo, que posteriormente será substituído na expressão exata da FG. Com essa aproximação obtivemos a susceptibilidade  $\chi_f$  e mostramos qual é a renormalização adequada para satisfazer a completude em presença do campo magnético. Apresentamos  $\chi_f$  e as densidades espectrais das FG de um elétron para vários valores relevantes dos parâmetros do sistema e mostramos como a susceptibilidade é do tipo Pauli (com valores altos) a baixas temperaturas e como se transforma em susceptibilidade do tipo Curie a altas temperaturas.

### A STONER MODEL APPROACH TO THE MAGNETISM OF TRANSITION METAL ALLOYS

I. G. DE OLIVEIRA, I. S. OLIVEIRA, A. P.

GUIMARÃES, X. A. DA SILVA

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas*

Using a closed parabolic density of states for the d-band, we deduce two algebraic equations relating the number of conduction electrons in the band, the magnetic moment, and the exchange and chemical potential (both in bandwidth units). Various magnetic features emerge from the analysis of these equations, for a half-filled band at  $T = 0$  K: 1) the magnetic response of the band to an effective magnetic field; 2) the spontaneous magnetization as a function of the exchange parameter in the mean field approximation (Stoner model) and also the magnetic moment as a function of the degree of filling of the band. The above problem is extended in two directions: a) shapes other than parabolic for the density of states, taking into account  $s-d$  hybridization are considered, and b) finite temperature effects on the magnetic specific heat (below and above the Curie temperature  $T_c$ ) and on the magnetic susceptibility above  $T_c$ . The results are correlated with the experimental plots of magnetic moments versus the average magnetic valence for several Fe and Co alloys [see chapter 1 of *Rare-Earth Iron Permanent Magnets*, Ed. J.M.D. Coey, Oxford, 1996]. The existence of systematics observed in magnetic transition alloys [A.R. Williams et al., *IEEE Trans. (USA)*, vol. MAG-19, n5, p.1983-8, 1983] offers an unique opportunity to test the explanatory power of the Stoner model applied to magnetic transition alloys.

### Álgebra de Grassmann e Modelos Fermiônicos Auto-Interagentes a Altas Temperaturas

IRAZIET DA CUNHA CHARRET, MARIA TERESA

THOMAZ, SÉRGIO MARTINS DE SOUZA

*UFF*

EDUARDO CORRÊA SILVA

*CBPF*

Desenvolvemos um método para re-escrever a expansão não-perturbativa da integral de caminho para a função de partição gran-canônica, no limite de altas temperaturas, de modelos fermiônicos auto-interagentes unidimensionais, como uma soma de co-fatores de uma matriz formada por quantidades comutantes. Essa formulação, ao contrário do tratamento em que se utiliza a transformação do tipo Hubbard-Stratonovich, não introduz nenhuma ambiguidade nos resultados. Inicialmente, realizamos os cálculos do termo em  $\beta$  desta expansão ao modelo de Hubbard unidimensional ( $d = 2(1 + 1)$ ) com interação entre primeiros vizinhos. Apesar desta proposta inicial apresentar bons resultados, a sua eficiência para cálculos de ordens superiores não era satisfatória. A dimensão máxima das matrizes, das quais necessitamos calcular o determinante, é igual a duas vezes o número de pontos na rede espacial vezes  $n$ , sendo  $n$  a potência da ordem  $\beta$  a ser calculada. Um dos problemas para o cálculo desses determinantes é o fato dessas matrizes não serem diagonais. Uma otimização dos cálculos é realizada através da diagonalização das

matrizes através de uma transformação de similaridade. Usando as propriedades básicas da álgebra de Grassmann mostramos, que os momentos de integrais gaussianas múltiplas de Grassmann são iguais a co-fatores da matriz da exponencial gaussiana. Aplicamos o novo método novamente ao Modelo de Hubbard unidimensional com condições de contorno espaciais periódicas. Obtivemos os coeficientes exatos da expansão em  $\beta$  do grande potencial termodinâmicos até ordem  $\beta^4$  para um anel com  $N$  sítios espaciais, onde  $N$  é arbitrário, e calculamos algumas quantidades termodinâmicas. Os resultados obtidos são exatos e analíticos em cada ordem  $\beta$  para qualquer número de elétrons no sistema. É importante ressaltar que o método apresentado para o cálculo dos coeficientes desta expansão se aplica a qualquer sistema fermiônico unidimensional auto-interagente, com condições periódicas de contorno, e, portanto, é uma ferramenta de grande utilidade para o estudo destes modelos

#### CLUSTER CALCULATIONS OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF DISORDERED Fe-V ALLOYS.

JOÃO CARLOS KRAUSE, JACOB SCHAF, MOACIR  
ÍNDIO DA COSTA JR  
*Instituto de Física - UFRGS*  
CLEDERSON PADUANI  
*Departamento de Física - UFSC*

The first-principles discrete variational method (DV), is employed to investigate the electronic structure and local magnetic properties of disordered Fe-V alloys. The spin polarized case is considered in the formalism of the LSD approximation, with the exchange-correlation term of von Barth-Hedin. The Fe-V alloy system is formed by a bcc structure with eight atoms in the unitary cell in solid solution at high temperatures. At the equiatomic composition is formed an ordered intermetallic compound at low temperatures. This phase diagram have been intensively studied in the last decades, mostly concerning the order-disorder transitions. Recently, the low temperature topology of the metastable phase diagram was established for this system. The critical temperatures for the order-disorder transformation was measured by Seki as a function of the concentration. The results showed a nearly symmetric parabolic behavior for this dependence. In this work the effect on the local magnetic properties and electronic structure of adding vanadium atoms in the immediate neighborhood of iron atoms at the center of molecular clusters is investigated. The partial density of states (PDOS), hyperfine field ( $H_c$ ), magnetic moment ( $\mu$ ) and isomer shift (IS) is obtained for this probe atom. The calculated values for  $H_c$  and  $\mu$  are -20 kG and  $-0.55 \mu_B$ , respectively, for the impurity vanadium atom in the bcc iron host, which are in good agreement with experimental results.

#### ON UNIVERSALITY OF VERWEY TRANSITIONS IN LOW-DOPED MAGNETITES

VALERY B. KOKSHENEV  
*Departamento de Física, ICEx, Universidade Federal de Minas Gerais*  
PAULO H. DOMINGUES, JULIO M. NETO  
*Departamento de Física dos Sólidos, IF, Universidade Federal do Rio de Janeiro*  
EUGENII S. SYRKIN  
*Theoretical Physics Department, Low Temperature Physics and Engineering Institute of the Ukrainian Academy of Science, Kharkov, Ukraine*

It is well established that the Verwey transition temperature  $T_0 = 120K$  in stoichiometric (and  $110K$  in non-stoichiometric) doped magnetites,  $Me_xFe_{3-x}O_4$  decreases linearly with the impurity concentration. The phase transition temperature in doped materials  $T_x$  can be presented in the generalized form as  $T_x = T_0(1 - x\Delta)$ . For the structure phase transitions in the isostructural doped layered ferroelastics  $Me_xK_{1-x}Sc(MoO_4)_2$  with  $Me = Li, Na, Rb, Cs$ , studied by dielectric response technics for  $0 < x < 0.20$ , one can show that the transition temperature data (see Fig.3 in A.A.Gurskas, V.B.Kokshenev and E.S.Syrkin, Sov.Phys.Solid State, v.27, 1250 (1985)) follow  $T_x$  estimated in the spirit of the virtual crystal approximation with  $\Delta = (m_{Me}/m_0 - 1)/2$ , where  $m_0$  and  $m_{Me}$  stand for masses of the regular  $K$  and substituted  $Me$  ions. Physically, dynamical instability of doped layered crystals is due to effective moderation of the interlayer interaction caused by heavy impurities. For the case of the *doped ferrites* one can propose for the Curie temperature  $T_x$  mean-field estimate with  $\Delta = 2(1 - \mu_{Me}/\mu_0)$ . Here  $\mu_0$  and  $\mu_{Me}$ , respectively, are magnetic moments of the regular and the substituted ions. This fits well the case of  $Cr$ -substitution in  $Ni$ -ferrites within  $0 < x < 0.50$  (see Fig.4 in V.K. Babbar *et.al.*, J. Appl.Phys., v.78, p.2585, 1995). The recent findings of the calorimetric study of  $Me_xFe_{3-x}O_4$  for  $Me = Ti, Zn$  with ( $0 < x < 0.04$ ) give clear evidence that the Verwey temperature in *low-doped magnetites* falls into the intrinsic-impurity-independent *universal curves* with  $\Delta$  equal, approximately, 10 and 8, respectively, for the cases  $T_0 = 120K$  and  $110K$  (see Fig.2 in A.Kozłowski *et.al.*, J. Magn.Magn.Mater., v.140-144, p.2083, 1995). These results have no yet explanation and challenge to date theories of metal-nonmetal transition as well as experiments on *doped magnetites* with  $x > 0.1$ , where the universality is not expected. Financial support of CNPq and FINEP is acknowledged.

## PROPRIEDADES DO MODELO KONDO DE DOIS CANAIS.

JOÃO VÍTOR B. FERREIRA, VALTER LUIZ LÍBERO,  
LUIZ NUNES DE OLIVEIRA

*Instituto de Física de São Carlos - IFSC/USP Grupo de Física Teórica - FFI*

O modelo de Kondo de uma impureza magnética acoplada a dois canais de condução, introduzido por Nozières e Blandin [P. Nozières e A. Blandin, *J. Phys. (Paris)* (41),193 (1980)], apresenta uma física muito rica. Quando os acoplamentos  $J_1$  e  $J_2$  (acoplamento de cada canal com a impureza de spin  $S = 1/2$ ) são iguais, as propriedades de baixa temperatura do modelo fogem das características dos líquidos de Fermi. Conjecturou-se que esse modelo serve para descrever o efeito Kondo quadrupolar em íons de Urânio [D. L. Cox, *Phys. Rev. Lett.* 59, 1240 (1987)] e outros sistemas com propriedades anômalas de baixa temperatura. As propriedades termodinâmicas do modelo isotrópico ( $J_1 = J_2$ ) já foram calculadas e deram margem à especulação de que o espectro do Hamiltoniano não seja o de um líquido de Fermi, em contraste com conclusões baseadas em um estudo (de limitada precisão numérica) pelo grupo de renormalização combinado com técnicas de invariância conforme [I. Affleck, A. W. W. Ludwig, H. B. Pang, e D. L. Cox, *Phys. Rev. B* 45, 7918 (1992)]. Essa discrepância convida a um estudo mais preciso pelo grupo de renormalização, que calcule algumas propriedades termodinâmicas, pela primeira vez, a densidade espectral da impureza em função da energia e da razão entre os acoplamentos  $J_1$  e  $J_2$ . Os únicos cálculos de propriedades dinâmicas se restringem ou ao limite de baixas energias ou a técnicas de cálculo baseadas em aproximações incontroláveis. Do ponto de vista do desenvolvimento do método, o cálculo deverá, ainda permitir que se entenda melhor o procedimento do grupo de renormalização nas vizinhanças de um ponto fixo sem características de líquido de Fermi. No presente estágio do trabalho estamos calculando o calor específico desse modelo e isto nos permite avaliar a eficiência dos aperfeiçoamentos desenvolvidos recentemente na técnica do grupo de renormalização numérico.

## DENSIDADE ESPECTRAL A BAIXAS ENERGIAS DO MODELO DE ANDERSON DE DUAS IMPUREZAS

CÍNTIA AGUIAR DE PAULA, LUIZ NUNES DE OLIVEIRA

*Instituto de Física de São Carlos - USP*

Este trabalho estende a fórmula de Langreth, que determina o limite de baixas frequências da densidade espectral do modelo de Anderson. A expressão de Langreth, derivada em 1966, aplica-se somente a

uma impureza isolada; aqui, nós derivamos o resultado exato correspondente para o modelo de duas impurezas. Nossa análise combina resultados rigorosos da Teoria do Grupo de Renormalização com expressões exatas extraídas da expansão diagramática da densidade espectral em potências do acoplamento  $V$  entre impurezas e a banda de condução. A expressão relaciona a densidade espectral a baixas energias com a defasagem dos elétrons de condução no nível de Fermi, defasagem esta recentemente calculada por Silva e colaboradores [*Phys. Rev. Lett.* 76, 275 (1996)]. Proposto por Alexander e Anderson em 1964 para descrever momentos magnéticos localizados, o modelo de Anderson de duas impurezas só recentemente começou a ser entendido quantitativamente. O estado fundamental desse modelo depende fortemente da competição entre a iteração RKKY  $I$  e a temperatura Kondo  $T_K$ , gerando três regimes característicos:  $I \ll k_B T_K$  (regime Kondo),  $-I \gg k_B T_K$  (ferromagnético) e  $I \gg k_B T_K$  (regime antiferromagnético). Estamos calculando a densidade espectral desse modelo em função da frequência por meio de uma extensão da técnica do grupo de renormalização numérico. Além da conservação da carga e do spin, o Hamiltoniano tem simetria de inversão, a qual permite classificarem-se em pares e ímpares os seus auto-estados. Podemos assim definir as densidades espectrais par e ímpar. Nossa extensão da expressão exata de Langreth, que se aplica tanto à densidade par como à ímpar, permitirá conferir a precisão do cálculo e auxiliará a interpretação dos resultados numéricos que procuramos obter. A apresentação incluirá tanto a derivação da fórmula exata como discussão de suas implicações físicas.

## DENSIDADE ESPECTRAL PARA O MODELO DE ANDERSON DE DUAS IMPUREZAS SEM CORRELAÇÃO ELETRÔNICA.

MARCELO FERREIRA DA SILVA, LUIZ NUNES DE OLIVEIRA

*Instituto de Física de São Carlos - IFSC/USP Grupo de Física Teórica - FFI*

Este trabalho calcula analítica e numericamente a densidade espectral para o modelo de Anderson de duas impurezas sem correlação eletrônica ( $U = 0$ ). Nossos resultados servem como passo inicial para se entender o modelo com a correlação eletrônica. O modelo estudado descreve a interação entre elétrons de um metal e impurezas magnéticas localizadas, e a simplificação ( $U = 0$ ) torna o Hamiltoniano do modelo quadrático, permitindo assim que se divida o mesmo em dois termos: um envolvendo apenas operadores pares (canal par) e outro envolvendo operadores ímpares

(canal ímpar). Além disso cada termo pode ser dividido em dois outros termos correspondendo às componentes alta e baixa do spin, respectivamente. Cada termo encontrado apresenta uma forma resultante que difere pouco da forma de um Hamiltoniano de nível ressonante. Nossos resultados abrangem tanto a diagonalização analítica do Hamiltoniano como a diagonalização numérica pelo método do Grupo de Renormalização, o interesse nesta última reside na comparação que pretendemos fazer entre os resultados de alta precisão assim obtidos com os que serão obtidos por diagonalização do Hamiltoniano de muitos corpos com ( $U \neq 0$ ). Nosso tratamento adapta o método do Grupo de Renormalização Numérico para o caso de duas impurezas. O método de tridiagonalização tradicional da banda de condução [K.G. Wilson, *Rev. Mod. Phys.* **47**, 773 (1975)] impõe simetria partícula-buraco; entretanto no nosso tratamento mantemos a dependência energética do acoplamento, mantendo assim a assimetria natural do modelo. Assim termos diagonais proporcionais a  $\eta_n$  ( $n = 0, 1, 2, \dots$ ) aparecerão na banda de condução sendo necessário um método alternativo, recentemente desenvolvido por Lima [Assimetria Partícula-Buraco no Modelo de Kondo de Duas Impurezas. Tese de Doutorado (IFSC-1997)], para sua tridiagonalização.

### ESTUDO SISTEMÁTICO DO GRADIENTE DE CAMPO ELÉTRICO NO NÚCLEO EM COMPOSTOS INTERMETÁLICOS COM IMPUREZAS

LUIS ALBERTO TERRAZOS JAVIER, HELENA MARIA PETRILLI, SONIA FROTA PESSÔA  
IFUSP

Nosso objetivo nesse trabalho é entender o comportamento do GCE em compostos intermetálicos de metal de transição que tem estrutura cristalina C16 tipo CuAl. Medidas experimentais de GCE nesses sistemas são frequentemente obtidos utilizando o Ta como átomo de prova (probe) e para que uma comparação mais exata entre resultados teóricos e experimentais seja possível, uma impureza de Ta deve ser incluída no sistema. A estrutura eletrônica e o GCE no núcleo para vários sítios em compostos intermetálicos com estrutura C16 foram recentemente obtidos [1] utilizando o método LMTO-ASA de espaço recíproco. No entanto nesta abordagem não permite a inclusão da impureza isolada de Ta, é difícil. Neste trabalho usamos o RS-LMTO-ASA [2], que por ser implementado no espaço direto permite facilmente a inclusão de impurezas. Inicialmente efetuamos cálculos de estrutura eletrônica e GCE para esses compostos na ausência de impureza obtendo boa concordância com resultados da literatura. A seguir

incluímos a impureza de Ta e calculamos a estrutura eletrônica da liga e o GCE no núcleo de Ta. Este procedimento permite uma comparação direta entre os resultados teóricos e experimentais, e é utilizado numa análise das tendências observadas para o GCE nesses compostos. [1] H. M. Petrilli, M. Marszalek and H. Saitovitch, *Z. Naturf.* **51a**, 537 (1996) [2] P. R. Peduto, S. Frota Pessôa and M. S. Methfessel, *Phys. Rev. B* **44** 13283 (1991) S. Frota Pessôa, *Phys. Rev.* **46**, 14570 (1992)

### Tranção Metal Isolante em Redes de Bethe

CARLOS ALBERTO CÉSAR BÜSSER  
Pontificia Universidade Católica do Rio de Janeiro  
ENRIQUE VICTORIANO ANDA  
Universidade Federal Fluminense  
GUILLERMO CHIAPPE  
Universidad de Buenos Aires

Propomos um novo formalismo para o estudo das propriedades eletrônicas dos sistemas fortemente correlacionados com interações intersítios, onde usamos como modelo mais representativo o Hamiltoniano de Hubbard. O sistema é dividido em aglomerados de átomos e o Hamiltoniano que descreve os aglomerados é considerado como um Hamiltoniano não perturbado. As interações entre aglomerados são tomadas como perturbações numa expansão diagramática em cumulantes. O objetivo desta proposta é estudar a física derivada do Hamiltoniano de Hubbard em função da dimensionalidade do sistema. Entretanto nesta primeira versão aplicamos o formalismo ao estudo de uma rede de Bethe com coordenação infinita. Foi possível a obtenção da densidade de estados do sistema em função do parâmetro  $U$  que controla a repulsão elétron-elétron no sítio. Para um preenchimento pela metade do sistema, foi estudado a transição metal-isolante (transição de Mott) e os resultados obtidos são qualitativamente idênticos aos conseguidos por outros métodos. Para pequenos valores de  $U < t$  a densidade de estados apresenta uma estrutura de três picos onde o pico central (no nível de Fermi) constitui uma ressonância de Abrikosov-Suhl. Este pico vai-se estreitando a medida que se aumenta o valor de  $U$  até desaparecer para um valor  $U_{c1}$ . De acordo com esta descrição o sistema é metálico para valores pequenos de  $U$  e sofre uma transição metal-isolante para  $U_c$ , de segunda ordem. Entretanto, a existência de um estado excitado do aglomerado muito próximo em energia do estado fundamental do aglomerado (que para o sistema completo resulta ser o fundamental para  $U_{c2} < U_{c1}$ ), permite assegurar que a transição é de primeira ordem. O formalismo está sendo utilizado para estudar sistemas de 1, 2 e 3 dimensões.

**ESTRUTURA ELETRÔNICA E  
PARÂMETROS HIPERFINOS DE  $\alpha$ -Fe E  
 $\alpha$ -FeCo**

MARIA DE FÁTIMA SATUF REZENDE, ABA I. C.  
PERSIANO

*Departamento de Física - UFMG*  
DIANA GUENZBURGER  
*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas*

**ESTUDO DO MODELO DE ANDERSON  
PERIÓDICO COM TERMOS DE  
EXCHANGE E DE HIBRIDIZAÇÃO ENTRE  
SÍTIOS VIZINHOS**

BEN HUR BERNHARD  
UDESC

ACIRETE S. DA ROSA SIMÕES, JOSÉ ROBERTO

IGLESIAS

UFRGS

BERNARD COOBLIN

*Université Paris-Sud - Orsay, França*

As ligas do sistema FeCo são de grande interesse devido a suas propriedades elétricas e magnéticas, em especial a alta saturação magnética  $B_s$ . Ligas desse sistema, tais como Permendur (com 2% de vanádio) e Vicalloy (com 14% de vanádio), são largamente empregadas comercialmente. O aprimoramento da caracterização microestrutural das fases presentes na estequiometria 50%Fe-50%Co, através de seus parâmetros hiperfinos, permite investigar como essas propriedades se comportam quando impurezas não magnéticas são adicionadas à liga. Impurezas 3d e 4d afetam a estrutura de bandas desse material, produzindo alterações significativas na resistividade elétrica e no campo hiperfino [1]. Neste trabalho investigamos a estrutura eletrônica da fase alfa ordenada e desordenada da liga equiatômica FeCo, bem como de alfa Fe (bcc). Empregamos o método variacional discreto (DVM), no modelo de aproximação da densidade local baseado na teoria do funcional da densidade [2], para cálculo da distribuição de densidades de estados eletrônicos e de desvios isoméricos. Em nosso cálculo utilizamos um aglomerado de 65 átomos distribuídos em camadas em torno do átomo de Fe, sob um potencial gerado por 690 átomos para descrição do restante do cristal, no modelo denominado "embedded cluster" [3]. Os resultados mostram que as densidades de estados dão uma descrição correta do momento magnético do Fe na liga. Também os desvios isoméricos calculados são concordantes com os obtidos experimentalmente por espectroscopia Mössbauer.

1. M.F.S. Rezende, A.M. Lacerda, H.D. Pfannes, R.A. Mansur, J.D. Ardisson, A.I.C. Persiano, *Hyp. Int.* 83, 231 (1994) 2. D. E. Ellis e G. S. Painter, *Phys. Rev. B* 2, 2887 (1970) 3. D. Guenzburger e D. E. Ellis, *Phys. Rev. B* 18, 12519 (1995)

O modelo de Anderson periódico consiste de uma banda de elétrons  $d$  hibridizada com estados  $f$  localizados em cada sítio atômico. A dupla ocupação destes estados  $f$  é desfavorecida pela presença de um termo local que representa a interação coulombiana repulsiva. Este hamiltoniano modelo é amplamente utilizado na descrição de algumas classes de sistemas fortemente correlacionados, como os férmions pesados e os isolantes de Kondo. Consideramos uma versão estendida do modelo, que inclui o exchange direto entre os spins dos elétrons  $f$  de sítios vizinhos e a hibridização entre sítios vizinhos. Dentro da expansão atômica utilizada, estes dois termos são tratados como perturbação, juntamente com o hopping. Em particular, investigamos o caso simétrico do modelo em diferentes geometrias de rede: cadeia linear, rede quadrada e rede cúbica. O ponto de partida é a diagonalização exata da parte atômica do hamiltoniano de Anderson, incluindo a repulsão coulombiana e a hibridização locais. Em segundo lugar, obtemos as funções de Green atômicas, que apresentam um certo número de pólos como singularidades. As grandezas básicas que podem ser obtidas diretamente dentro do formalismo adotado são as densidades de estados locais nos orbitais  $d$  e  $f$ . Estas densidades são constituídas de bandas situadas em torno das posições dos pólos atômicos, e cuja forma depende dos valores dos parâmetros do modelo, e também da geometria da rede, da temperatura e da concentração eletrônica. A partir das densidades de estados, calculamos a susceptibilidade magnética em função da temperatura e o potencial químico em função da concentração. A comparação com resultados recentes da literatura ressalta a eficiência do método.

## MAGNETISMO E MATERIAIS MAGNÉTICOS (Filmes Finos e Multicamadas Magnéticas)

### MAGNETISMO E MATERIAIS MAGNÉTICOS (Filmes Finos e Multicamadas Magnéticas) – 11/06/97

#### EXCHANGE COUPLING DEPENDENCE ON SPACER LAYER THICKNESS FOR SPUTTERED Fe/Cr/Fe SANDWICHES

MARCOS ANTONIO LUCENA, CARLOS CHESMAN, ANTONIO AZEVEDO, SERGIO MACHADO REZENDE, FLÁVIO MENEZES DE AGUIAR

*Departamento de Física, UFPE*

STUART PARKIN

*IBM Almaden Research Center, CA, USA*

#### Acoplamento de Troca entre Camadas de Fe bcc (001) Separadas por Ag, Au fcc(001) e Cr bcc (001)

ANTONIO TAVARES DA COSTA JR, ROBERTO BECHARA MUNIZ, JOSÉ D'ALBUQUERQUE E CASTRO  
*UFF*

Calculamos o acoplamento de troca entre camadas de Fe na estrutura bcc separadas por Ag e Au na estrutura fcc, na direção (001), como função da espessura do material espaçador (Ag ou Au). Os cálculos são feitos com base num modelo de ligações fortes com 9 orbitais por sítio, e os parâmetros são ajustados a um cálculo de primeiros princípios. O crescimento da rede fcc (Ag e Au) sobre a bcc (Fe) é possível devido à relação entre os parâmetros de rede do Fe e Ag/Au:  $a_0^{Ag/Au} = \sqrt{2}a_0^{Fe}$ . Isso permite que a rede fcc cresça sobre a bcc com uma rotação de  $45^\circ$  em torno da direção de crescimento. O acoplamento calculado para o sanduíche Fe/Ag/Fe exhibe claramente uma oscilação de período longo, embora haja uma componente de período curto superposta. Já no sistema Fe/Au/Fe nota-se claramente uma oscilação de período curto, sem nenhum vestígio de um período longo. Estes resultados estão em excelente acordo com os experimentos existentes, embora a amplitude do acoplamento calculado supondo-se interfaces perfeitas seja muito maior do que a obtida experimentalmente. Calculamos também o acoplamento de troca entre camadas de Fe bcc separadas por Cr bcc, na direção (001). Neste caso, o acoplamento é claramente dominado por uma componente de período curto, existindo contribuições de dois outros períodos bem menos importantes. Ao contrário do que se costuma afirmar, o acoplamento no sistema Fe/Cr/Fe a  $T = 0K$  não decai com  $N$  nem com  $N^2$ , onde  $N$  é a espessura da camada de Cr, mas sim com  $N^{\frac{3}{2}}$ . Nossos cálculos mostram ainda que interdifusão na interface Fe/Cr pode reduzir a amplitude do acoplamento, e mascarar as contribuições de período curto.

It has been shown that Fe/Cr/Fe(100) sandwiches, sputtered on MgO, exhibit a strong biquadratic exchange coupling ( $J_2$ ) at room temperature [1]. The origin of the biquadratic coupling is quite controversial and intrinsic and extrinsic mechanisms have been suggested. In particular it has been argued [2] that the ratio  $J_1/J_2$  should be constant at least in the first antiferromagnetic peak of the bilinear ( $J_1$ ) coupling. We report on the Brillouin light scattering, ferromagnetic resonance, and magneto-optical Kerr magnetometry measurements in Fe(40Å)/Cr(t)/Fe(40Å) trilayers for  $5\text{Å} < t < 35\text{Å}$ . By fitting the experimental data to theoretical calculations which take into account dipolar, bilinear and biquadratic exchange together with surface, in-plane uniaxial and cubic anisotropies, all relevant parameters can be reliably extracted. An analytical expression for the spin-wave frequency as a function of field and wavenumber is given that can be readily used to interpret Brillouin light scattering (BLS) and ferromagnetic resonance (FMR) data in trilayers. The adequacy of the approximations used to treat the dipolar interaction is confirmed by comparison with exact calculations applied to moderately thick trilayers systems in which the exchange coupling is negligible [3]. We have found that the ratio  $J_1/J_2$  has a strong dependence on the Cr layer thickness in disagreement with other reported results.

[1] A. Azevedo, C. Chesman, S.M. Rezende, F.M. de Aguiar, X. Bian and S.S.P. Parkin, Phys. Rev. Lett. 76, 4837 (1996).

[2] J.C. Slonczewski, J. Magn. Magn. Mater. 150, 13 (1995).

[3] S.M. Rezende, C. Chesman, M.A. Lucena, A. Azevedo, F.M. de Aguiar and S.S.P. Parkin, Phys. Rev. B (submitted).

CNPq, FINEP, CAPES, PADCT, FACEPE and Office of Naval Research (IBM)

**INTERFACE ROUGHNESS AND  
ELECTRONIC TRANSPORT IN  
MULTILAYERS AND GRANULAR  
MAGNETIC MATERIALS**

G. J. B. RODRÍGUEZ, M. G. M. MIRANDA, A. B.  
ANTUNES, M. N. BAIBICH  
*Instituto de Física, - UFRGS*

The electrical resistivity and magnetoresistance of multilayers and granular magnetic materials depend highly on the degree of order at the interfaces between the different constituent elements. This is more evident for the giant magnetoresistance (GMR) seen in these systems, which, following most of the current theories, is said to be intimately connected to the roughness of the interfaces. We have studied the electrical resistivity and giant magnetoresistance of a series of multilayer samples of general composition  $[Co(15\text{Å})/Ag(45\text{Å})]_{20}/Ag(45\text{Å})$  obtained by electron beam deposition at low rates (around  $1\text{Å/s}$ ) for different isothermal annealing temperatures ( $T_A = 249, 301, 324, 366$  and  $423^\circ C$ ). The samples were studied by standard high and low angle X-Ray diffraction to help characterization of the size and structure of the particles involved. The results shows that: a) the mean free path for electrons in both Co and Ag are affected by the heat treatment, showing a sudden change in values for anneals at or above  $301^\circ C$ ; b) a similar effect can be seen using a model for the electrical resistivity based on a formal solution of the Boltzmann equation, which provides good fits to the experimental results for anneals at or below  $301^\circ C$  (which corresponds to preservation of the multilayered structure, whereas anneals at or above  $324^\circ C$  led to breaking the layers; the poorer fits for the granular samples forced qualitative evaluation only); c) a similar effect is observed for the evolution of the size of each particle as seen from magnetization and Scanning Tunneling Microscopy studies.

**Magnetic Properties of single-crystal Fe films  
grown by Magnetron Sputtering on GaAs[100]  
and MgO[100]**

JOSÉ R. FERMIN, BIAO LI, ANTONIO AZEVEDO,  
FLAVIO MENEZES DE AGUIAR, SERGIO M. REZENDE  
*UFPE*

Ferromagnetic Resonance (FMR) and Surface Magneto Optic Kerr Effect (SMOKE) have been used to study magnetic properties of single Fe films. The samples were grown by DC Magnetron Sputtering onto GaAs(100) and MgO(100) substrates. Films were deposited with and without a Cr buffer layer varying the deposition temperature. The base pressure was around  $3 \times 10^{-7}$  mbar and the sputtering was carried out in an atmosphere of  $3 \times 10^{-3}$  mbar 99.999% pure Ar. The resulting sputtering rate is around  $0.02 \text{ Å/sec}$ . On both MgO and GaAs (100) substrates Fe grows in the [001]-direction, with the Fe[100]-axis parallel to the substra-

tes [100]-axis. The measurements were carried out at room temperature and enabled us to determine the in-plane angular dependance of the resonance field, line width and hysteresis loops. FMR and SMOKE measurements indicate that our samples are single crystals. The line widths of the resonance spectra are of the order of 30 Oe, comparable to that grown by MBE [1]. The expected 4-fold symmetry is observed in all samples. The data shows excellent agreement with the FMR theory which includes magnetocrystalline and uniaxial anisotropies. X-Ray Diffraction measurements will be done in order to confirm that our samples are really single-crystals. [1] G.A. Prinz, G. T. Rado and J. J. Krebs, J. Appl. Phys, 53(3), 2087, 1982 [2] S.M. Rezende, J.A.S. Moura, F.M. de Aguiar and W.H. Schreiner, Phys. RevB 49(21), 15105, 1994  
Financial support: LUZ(Venezuela),CNPq, CAPES, FINEP, PADCT e FACEPE

**EFEITO DA ESPESSURA NA  
MAGNETO-IMPEDÂNCIA EM FILMES DE**

$Fe_{73.5}Cu_1Nb_3Si_{13.5}B_9$  AMORFOS

ANDRÉ GÜNDEL, MARCOS CARARA, RUBEM L.  
SOMMER

*Universidade Federal de Santa Maria*  
C. L. CHIEN

*The Johns Hopkins University - Baltimore, Maryland*  
S. JIANG

*Argonne National Laboratory - Argonne, Illinois*

Nos últimos anos, impedâncias dependentes do campo magnético externo têm sido observados em fios, filmes [1] e fitas amorfas e, mais recentemente, em materiais cristalinos [2]. A grande magnitude do efeito chamado de magneto-impedância (MI), em conjunto com sua alta sensibilidade, torna os materiais que exibem o mesmo candidatos em potencial para aplicações em sensores de campo e cabeças de leitura magnética. Entretanto, muitos dispositivos requerem materiais na forma de filmes finos e, nestes, muitos detalhes do efeito MI precisam ser elucidados. A origem do efeito magneto-impedância é a dependência da permeabilidade com o campo magnético externo e sua influência na profundidade de penetração (skin depth). Desta forma, todos os mecanismos que influenciam os processos de magnetização dos materiais, refletidos na permeabilidade, contribuem com a MI. Neste trabalho são apresentados resultados de medidas de magneto-impedância em filmes finos de  $Fe_{73.5}Cu_1Nb_3Si_{13.5}B_9$  amorfos produzidos com diferentes espessuras ( $0.1-50 \mu m$ ) por magnetron sputtering e submetidos a diferentes tratamentos térmicos. Essa composição exibe propriedades magnéticas macias e alta magnetostricção ( $\lambda_s = 23 \times 10^{-6}$ ). Foram realizadas medidas de magneto-impedância em função da frequência da corrente de sonda (1 kHz-100 MHz) e da geometria de medida. São apresentados também resultados obtidos em tri-layers,

compostos por camadas de  $Fe_{73.5}Cu_1Nb_3Si_{13.5}B_9$  e  $Ag$ . Os resultados são interpretados em termos dos mecanismos que controlam a permeabilidade efetiva do material. [1] R. L. Sommer and C. L. Chien, Appl. Phys. Lett. 67, 3346 (1995) [2] M. Carara and R. L. Sommer, J. Appl. Phys. (in press)

### **POLARITONS EM FILMES MAGNÉTICOS COM GEOMETRIA CILÍNDRICA.**

ELONEID. F. NOBRE, R. N. COSTA FILHO, GIL. A.

FARIAS

UFC

NILSON. S. ALMEIDA

UFRN

Estudamos a propagação de polaritons em um cilindro coaxial onde obtivemos a relação de dispersão de modos superficiais e volumétricos. Atenção particular é dada à propagação dos modos superficiais, àqueles que são localizados junto às interfaces. No meio externo restringimos nossa atenção apenas aos modos reais, não radioativos, nos quais os campos eletromagnéticos decaem exponencialmente com a distância ao cilindro. O sistema considerado é um longo cilindro coaxial, com

raio interno e externo  $a$  e  $b$ , respectivamente. A região  $a \leq \rho \leq b$ , que contém o meio ativo, é caracterizada por um material cuja permeabilidade magnética apresenta anisotropia uniaxial. O eixo ótico do cristal é paralelo ao eixo principal do cilindro. A região  $0 \leq \rho \leq a$  é caracterizada por um meio cuja permeabilidade magnética e constante dielétrica são independentes da frequência. Dada à simetria do problema, trabalhamos em coordenadas cilíndricas para resolver as equações de Maxwell, obtendo, assim, os campos eletromagnéticos. Usando como condições de contorno a continuidade das componentes tangenciais dos campos elétrico e magnético nas interfaces do cilindro, obtivemos a relação de dispersão dos polaritons. Diferente da geometria plana e esférica, a geometria cilíndrica não apresenta soluções independentes para os modos transversos elétrico (TE) e transversos magnético (TM). Essas soluções estão sempre acopladas, exceto no modo  $n = 0$  onde não há influência da curvatura sobre os modos de propagação. Tomamos como modelo para as nossas aplicações o  $MnF_2$ . Os resultados obtidos mostram um desdobramento dos modos superficiais devido à existência das interfaces.

## MAGNETISMO E MATERIAIS MAGNÉTICOS (Materias Magnéticas Moles)

### MAGNETISMO E MATERIAIS MAGNÉTICOS (Sistemas Diluídos e Relaxação Magnética/Excitações Magnéticas) – 13/06/97

#### LOCAL MAGNETIC MOMENTS AND HYPERFINE FIELDS OF MÖSSBAUER IMPURITIES IN FERROMAGNETIC Gd, Tb AND Dy HOSTS.

ALEXANDRE LOPES DE OLIVEIRA, MARCUS VINICIUS TOVAR COSTA

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas ( CBPF )*

NILSON ANTUNES DE OLIVEIRA

*Universidade do Estado do Rio de Janeiro ( UERJ )*

AMÓS TROPER

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas ( CBPF ) and*

*Universidade do Estado do Rio de Janeiro ( UERJ )*

Using isomer shift and magnetic hyperfine field data of Mössbauer impurities  $^{119}\text{Sn}$ ,  $^{197}\text{Au}$ ,  $^{193}\text{Ir}$  and  $^{57}\text{Fe}$  diluted in the ferromagnetic rare earth metals Gd, Tb and Dy, we theoretically discuss the formation of local magnetic moments at these impurities and we calculate the magnetic hyperfine fields at these sites. In the case of  $^{119}\text{Sn}$  and  $^{197}\text{Au}$  nuclear probes we adopt a Daniel-Friedel model<sup>1</sup> whereas in the case of the transition Mössbauer impurities  $^{193}\text{Ir}$  and  $^{57}\text{Fe}$  we adopt an extended RKKY approach<sup>2</sup> using a two band model (s-d) for the hosts, the density of states being extracted from first principle calculations. Our self-consistent hyperfine field calculations are in good agreement with the available experimental data found in the literature<sup>3</sup>. Moreover the coupling between the local moment at the Mössbauer impurities and the rare earth host moments is always antiferromagnetic. In the  $^{119}\text{Sn}$ ,  $^{197}\text{Au}$ ,  $^{193}\text{Ir}$  and  $^{57}\text{Fe}$  cases the calculated local moments are very small, whereas for Fe impurity the local moment is of the order of  $1.0\mu_B$ .

<sup>1</sup>A. L de Oliveira, M. V. Tovar Costa, N. A. de Oliveira and A. Troper, to appear in *J. Appl. Phys.* **81**, 15 April ( 1997 ).

<sup>2</sup>C. E. Leal and A. Troper, *J. Appl. Phys.* **67** 5876 ( 1990 ).

<sup>3</sup>W. D. Brewer, S. Half, D. Jones, S. Frota-Pessoa, J. Kapoor, Yi Li, A. Metz and D. Riegel, *Phys. Rev. B* **51** 12595 ( 1995 ) and references therein.

#### TEORIA MICROSCÓPICA DE INTERAÇÃO E RELAXAÇÃO DE ONDAS DE SPIN EM FILMES FERROMAGNÉTICOS

R. N. COSTA FILHO, G. A. FARIAS

*UFC*

M. G. COTTAM

*UNIVERSITY OF WESTERN ONTARIO*

Um método de perturbação diagramática é utilizado para o estudo da dinâmica não linear de ondas de spin em filmes finos ferromagnéticos, incluindo efeitos de acoplamento de troca, que são de curto alcance, e as interações entre os dipolos magnéticos dos spins, que são de longo alcance. Da aproximação linear[1], sabemos que, o espectro de ondas de spin de um filme de espessura finita consiste de vários ramos que descrevem os modos localizados de superfície e os modos quantizados de volume. Quando efeitos de mais alta ordem são levados em consideração, obtemos uma descrição das interações entre estes modos onde os termos de relaxação dominantes são causados por processos de espalhamento de 3-magnons e 4-magnons, analogamente ao que ocorre em um ferromagneto infinito[2]. Porém, em um filme, os termos de interação envolvem magnons do mesmo ou de diferentes ramos discretos, e além disso a renormalização da energia dos magnons bem como seu damping possuem uma diferente dependência com a temperatura e o vetor de onda. Nossos resultados representam uma generalização de cálculos anteriores para ferromagnetos de Heisenberg semi-infinitos[3] pois incluem os termos de dipolo e tratamos com um filme finito. Usamos uma teoria microscópica com um Hamiltoniano, diferentemente de teorias anteriores para interações de dipolo-exchange de magnons, que geralmente usam uma teoria macroscópica ou de meio contínuo que utilizam as equações de Maxwell. Isto nos permite obter resultados que se aplicam a filmes finos e/ou para todos os vetores de onda.

[1] H. Benson e D.L.Mills, *Phys.Rev.* **178**, 839 (1969).

[2] Ver, e.g., F.Keffer, *Handbuch der Physik* **18**, 1 (1966).

[3] D.Kontos e M.G.Cottam, *J.Phys. C* **19**, 1189 (1986).

#### DEFECT INDUCED INVERTED MAGNETIZATION ON LINEAR ANTIFERROMAGNETIC CHAINS

A. L. DANTAS, N. S. ALMEIDA, A. S. CARRIÇO

*Departamento de Física, Centro de Ciências Exatas, Univ. Fed. do Rio Grande do Norte*

We discuss the effect of substitutional non magnetic impurities on the magnetic order of weakly coupled antiferromagnetic chains at elevated temperatures. Con-

trary to uniaxial high anisotropy materials, where the anisotropy originates in crystal field effects, in low anisotropy Mn based materials the anisotropy is mainly due to dipolar interactions. Therefore a non magnetic substitutional impurity produces two distinct effects: an extended anisotropy defect and exchange breaking. Below the temperature for which the chains orders, a non magnetic defect produces two semi-infinite modified chains, where the sublattices are inequivalent as a result of the extended anisotropy defect. The effect of an external field is stronger for the spins near the defect since the reduced coordination leads to softer spins. We calculated the magnetization as a function of temperature for a semi-infinite linear antiferromagnetic chain with uniaxial dipolar anisotropy, in the presence of an external field along the easy axis. At temperatures for which  $K_B T$  is comparable to the intrachain exchange coupling energy, the balance between the total magnetization of the sublattices can be modified by small applied fields, compared to the intra-chain exchange field. We find that for applied fields below a certain threshold the total magnetization is opposite to the applied field. This results from the fact that the spins near the defect are softer and aligned with the field. Furthermore these spins have a strong reduction of the uniaxial anisotropy, since the anisotropy defect decays rapidly away from the impurity. Therefore for low applied fields the balance between the sublattice magnetizations favor the appearance of inverted magnetization. We discuss the relation of these results with the recently observed ferromagnetic behavior on field cooling experiments on linear antiferromagnetic materials, with minute amounts of substitutional defects.

#### **SURFACE MAGNON POLARITONS AT AN ANTIFERROMAGNET/METAL INTERFACE, AND THEIR PREDICTED EFFECT ON FAR INFRARED THIN FILM SPECTRA**

THOMAS DUMÉLOU  
*UFRN*

We consider the surface polaritons at the interface of an antiferromagnet with a metal, in the absence of an external field, and predict the effect of such modes on the far infrared spectrum of an antiferromagnetic film deposited on a metal. Such a system may be used to represent many ferromagnet/antiferromagnet bilayer structures, since the ferromagnetic layers of such structures are frequently metallic and, furthermore, do not contribute to the far infrared magnon spectrum. The surface polaritons associated with this type of system are unusual for a number of reasons. Firstly, they extend down to zero wavevector, so that, in contrast to most surface polariton modes, they should be observable in simple oblique incidence reflectivity. This has an analogy in the Berreman effect used for mea-

suring longitudinal optical phonon frequencies of salts deposited on metal substrates. Secondly, modes can exist in both s- and p-polarisation, although, in practice, only p-polarisation modes are likely to be observed if the metallic layer is a 'normal' metal (as opposed to, say, a doped semiconductor, which may also be metallic in the far infrared). Thirdly, the modes show significant shifts from the simple surface polariton frequencies when the film becomes thin. Thus s-polarisation modes shift up to the longitudinal magnon frequency and p-polarisation modes shift down to the transverse magnon frequency. Fourthly, the p-polarisation modes show up strongly even for very thin films. Therefore, by choosing the correct geometry, one should be able to enhance considerably the far infrared spectral features associated with magnon modes in such films.

#### **Ondas de Spin em Sobrecamadas Metálicas Magnéticas**

ANTONIO TAVARES DA COSTA JR  
*FUNREI / UFF*  
MARCUS VINICIUS TOVAR COSTA  
*CBPF*  
ROBERTO BECHARA MUNIZ  
*UFF*

A tecnologia de crescimento de sistemas metálicos de baixa dimensionalidade atualmente existente permite que se obtenham filmes ultrafinos sobre substratos homogêneos. Uma quantidade importante que caracteriza sistemas magnéticos é a seção de choque de espalhamento inelástico de nêutrons. Esta está diretamente relacionada às excitações de ondas de spin desses sistemas. Com base num modelo de ligações-fortes multi-orbital com 9 orbitais por sítio, utilizando parâmetros ajustados a um cálculo de primeiros princípios, calculamos a relação de dispersão e o tempo de vida das excitações de ondas de spin em sistemas formados por uma sobrecamada magnética de Fe depositada em um substrato não-magnético. Um termo de anisotropia de íon único, tratado de forma parametrizada, foi incluído na sobrecamada. A existência de anisotropia provoca um "gap" no espectro de excitações magnéticas. A interação elétron-elétron é tratada na aproximação de fases aleatórias (RPA). O estado fundamental do sistema é obtido através de um cálculo autoconsistente na aproximação de Hartree-Fock (HF). A susceptibilidade transversa dinâmica  $\chi^{+-}$  é completamente determinada em termos dos propagadores monoelétrônicos (HF) do sistema. O formalismo empregado aqui é uma extensão multi-orbital daquele utilizado anteriormente por L.H.M. Barbosa et. al. (Tese de Mestrado, Depto de Física, UFF 1993). O tempo de vida das excitações de ondas de spin depende do tunelamento de buracos do metal não-magnético para a banda de spin majoritário da sobrecamada. A relação de dispersão pode depender fortemente da direção de pro-

pagação em algumas direções cristalinas de crescimento da sobrecamada. Isto se deve às mudanças na estrutura eletrônica para diferentes orientações. Simulamos o efeito de interdifusão entre a camada magnética e o substrato através de uma liga feita nesses dois planos, tratada na aproximação da matriz  $T$  média (ATA).

### Domain Analysis and Magnetic Relaxation in Thin Films

TATIANA G. RAPPOFORT

UFF

LUIZ C. SAMPAIO, MÁRCIO P. DE ALBUQUERQUE,

FLÁVIO MELLO

CBPF

We have simulated the formation of magnetic domains in very thin films with strong anisotropy perpendicular to the film plane. We have used Monte Carlo simulation with the single-spin-flip Metropolis dynamics based on two-dimensional classical Ising Model on a square lattice including the long-range interaction and a external magnetic field  $h$ . In our model the Hamiltonian takes the form:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j + \alpha \sum_{i,j} \frac{\sigma_i \sigma_j}{r_{ij}^3} - h \sum_i \sigma_i$$

where  $\sigma_i = +1$  or  $-1$ ,  $\alpha \equiv \frac{\mu^2}{J a^3}$  and  $h \equiv \frac{H \mu}{J}$ . Starting with all magnetic moments aligned without external magnetic field ( $h = 0$ ) and at a fixed temperature, the magnetic relaxation exhibits two distinct behaviors, depending upon the relation  $\alpha$  between the dipole-dipole and the exchange interactions. For  $\alpha < \alpha_c = 0.38$  the nucleation pattern at the beginning of the relaxation process is characterized by the nucleation of few domains, followed by a rapid growth of the magnetic domain size. For  $\alpha > \alpha_c$ , the process is associated with the nucleation of many domains at random positions in the film. In both cases the domain pattern evolves toward a null magnetization with a striped structure. In the presence of a magnetic field opposite to the initial magnetization, the domain nucleation present distinct behaviors depending upon the value of  $\alpha$  as in the previous case, but now  $\alpha_c$  is field dependent, i.e.,  $\alpha_c = \alpha_c(h)$ . However, the domain pattern grows like a fractal structure for intermediate values of field and grows through a symmetrical structure for high field limit. The program was developed in C language and links the images into a HTML file. We can follow all simulation sequences on-line through a Web browser on the Internet.

### Fe impurity in Pb host films

M. A. MORALES TORRES, E. BAGGIO-SAITOVICH

Centro Brasileiro De Pesquisas Fisicas

EDSON C. PASSAMANI

Universidade Federal do Espírito Santo

VICTOR PEÑA RODRIGUEZ

Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Lima-Perú

D. ELLIS

Northwestern University Evanston, USA

A classical problem in magnetism is the study of impurities in metallic matrices which depends on the impurity location in the lattice. However, there are several systems which are immiscible in equilibrium conditions and only using special preparation method is possible to address the above mentioned problem. Fe and Pb form one of these systems. Thus, we combine vapor quenching (VQ) technique at low temperature, and in situ Moessbauer spectroscopy (ME) in transmission geometry, in the temperature of 7-300 K, using a mCi  $^{57}\text{Co}:\text{Rh}$  source, to study the location of Fe in Pb matrix, as well as its stability with temperature.  $^{57}\text{Fe}$  ME at 7 K for as-prepared Fe(1%):Pb film has two components: one singlet with isomer shift (IS) of 0.5 mm/s, relative fraction of 70 % and a doublet with IS of 0.32 mm/s, relative fraction of 30 % and quadrupole splitting (QS) of 0.7 mm/s. In situ Mössbauer measurements at 7K with external magnetic field of 1.5T and 3.7T have been performed in as-prepared film and reveal that mainly the Fe related with the doublet has magnetic moment. First principle electronic structure Local Density cluster calculations for Fe at interstitial and substitutional sites in Pb matrix are in progress to help us to derive the hyperfine parameters for comparison with the experimental data.

### Surface Spin Waves in Metamagnets with Nonuniaxial Single-ion Anisotropy

D. H. A. L. ANSELMO, E. L. ALBUQUERQUE

UFRN

A microscopic theory is employed to investigate the spin wave spectra in metamagnetic materials that consist of ferromagnetically ordered layers, with the intralayer ferromagnetic exchange interactions being much stronger than the weak antiferromagnetic interaction between adjacent layers. The calculations are carried out for the exchange dominated regime within the framework of the Heisenberg model and taking into account the random phase approximation (RPA). We consider that the metamagnetic material can have both uniaxial and nonuniaxial single-ion anisotropy. We consider the presence of an external magnetic field  $H$  applied perpendicular to the layers. In the regime of low temperatures and for small values of  $H$  the metamagnet presents the antiferromagnetic (AFM) phase, while for large  $H$  (enough to overcome the interlayer antiferromagnetic coupling) the overall magnetic order is the ferromagnetic (FM) one. Here, the magnetic anisotropy is sufficiently large compared with the weak antiferromagnetic coupling, so that there is no spin-flop phase intermediate between the AFM and FM phases. To

examine the surface spin wave excitations, we consider a semi-infinite metamagnet that has a (001) surface and occupies the half space  $z \geq 0$ . We compare our results with those found for metamagnetic materials  $FeCl_2$  and  $FeBr_2$  in the absence of the nonuniaxial anisotropic field. As they differ from one to another in their crystal structure, this leads to important difference in the surface spin wave spectra. Besides, we found some interesting new aspects of the spectra due to the presence of the nonuniaxial component of the anisotropic field.

**THE CLUSTER MODEL FOR DILUTED  
MAGNETIC SYSTEMS: PROBABILITIES  
AND ENERGY LEVELS OF SMALL  
ANTIFERROMAGNETIC CLUSTERS**

MARCO ANTONIO BASTOS DA SILVA, HENADY  
MALARENKO JR, EWOUT TER HAAR, NEI  
FERNANDES OLIVEIRA JR, VALDIR BINDILATTI

IFUSP

The motivation of this work is the study of distant neighbor exchange constants in diluted magnetic semiconductors, such as the  $A_{1-x}^{II}Mn_xB^{VI}$  series. In such diluted magnetic systems, small antiferromagnetic (AF) clusters give rise to magnetization steps at low temperatures, from which the exchange constants can be determined. The identification of these constants, as  $J_1$ ,  $J_2$ , etc., requires the knowledge of the populations and energy levels of the several types of possible cluster configurations. The energy levels relate the exchange constants to the magnetic fields at which the steps occur, while the populations determine their heights. We worked out the statistics of clusters including 4th neighbor ions in the fcc lattice, assuming a random distribution. The probability that a given ion belongs to a particular cluster type is given by  $p(x) = nx^{m-1}(1-x)^q$ . Here:  $x$ , the concentration of magnetic ions, is the probability of occupation of a site;  $m$  is the number of magnetic ions in the cluster;  $n$  is the number of possibilities of that type of cluster; and  $q$  the number of neighboring sites which have to be unoccupied. The counting of possibilities and number of neighbors for each possible type of cluster was performed by a computer program developed by us. Besides, we worked out the energy level diagrams of several clusters, up to quartets, in parti-

cular for the spin  $5/2$   $Mn^{2+}$  ion. The magnetization curves of a sample are then simulated by considering the independent contributions of each type of cluster.

**ANISOTROPIA MAGNÉTICA DE ONDAS  
DE SPIN EM FILME FINO DE NÍQUEL**

DENIS REZENDE DE JESUS, FERNANDO PELEGRINI  
UFG

L. F. SCHELP, J. E. SCHMIDT  
UFRGS

Empregando a técnica de ressonância ferromagnética investigamos a anisotropia magnética e os modos de ressonância de ondas de spin em um filme fino de níquel, com espessura da ordem de  $1600\text{Å}$ , produzido por deposição de vapor em vácuo. As medidas de campo de ressonância ferromagnética foram realizadas com um espectrômetro BRUCKER ESP-300, operando com frequência de micro-ondas em banda-X e banda-Q, em função da orientação do campo magnético externo no plano do filme e variando da configuração paralela à perpendicular ao filme. As medidas realizadas com frequência de micro-ondas em banda-X mostram que o campo de ressonância varia de  $1600$  G, para a configuração paralela ao campo magnético externo, a  $8300$  G, para a configuração perpendicular. Com o campo externo perpendicular ao plano do filme são observados também dois modos de ressonância de ondas de spin, além do modo principal de ressonância ferromagnética. A separação entre os modos de ondas de spin observados apenas em banda-X, devido às limitações de campo magnético, é da ordem de  $300$  G. Com o campo magnético externo no plano do filme verifica-se ainda uma pequena variação angular do campo de ressonância. As medidas de ressonância ferromagnética são usadas para a dedução dos campos efetivos de anisotropia magnética e desmagnetização no plano e perpendicular ao filme, a constante de troca e a razão giromagnética. Investigamos também, considerando medidas de ressonância ferromagnética para diferentes temperaturas da amostra, no intervalo de  $80$  a  $300$  K, o comportamento da anisotropia magnética em função da temperatura.

## MAGNETISMO E MATERIAS MAGNÉTICOS (Sistemas Diluídos e Relaxação Magnética)

### MAGNETISMO E MATERIAS MAGNÉTICOS (Sistemas Diluídos e Relaxação Magnética)

– 12/06/97

#### SPIN DYNAMICS ABOVE THE ORDERING TEMPERATURE IN RNiBC.

M. A. C. DE MELO, J. C. MONDRAGON, D. R. SÁNCHEZ, M. B. FONTES, B. GIORDANENGO, E.

BAGGIO-SAITOVITCH

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - Rio de Janeiro - Brasil*

*isicas - Rio de Janeiro - Brasil*

H. WALF, W. KOPMANN, M. HILBERG, W.

WAGENER, H. -H. KLAUSS, F. J. LITTERST

*TU Braunschweig, Germany*

The structure of the intermetallic series RNiBC (R=Y, rare earth) consist of nonmagnetic Ni<sub>2</sub>B<sub>2</sub> sheets alternated by double RC-layers. A variety of magnetic structure are observed in these compounds. Different magnetic properties are mainly related to the difference in the interplane interactions, the intraplane interactions remain always ferromagnetic-like. Thus it is importance to get more information about the magnetic ordering behavior in this series of compounds. We used the Muon Spin Relaxation ( $\mu$ SR) technique to observe the spin fluctuations above the magnetic transitions in RNiBC (R = Tb, Gd, Ho, Er and Dy). For all samples the relaxation rates diverges for temperatures higher than the ordering temperature (10-50 degrees above the ordering temperature). The shape of the spectra reflects the evolution of a broad distribution of spin relaxation times. Experiments with longitudinal external magnetic field up to 0.4T show a freezing of the moments, which indicate a static behavior of this broad distribution of the spin relaxation times for all samples. These results clearly indicate an interesting but complex spin relaxation mechanism in the paramagnetic state. It is possible that this is the result of competition of RKKY interaction between the rare-earth layer and the in plane (RC) coupling which is supposed to be dominated by superexchange via C. Similar behavior was observed in the DyNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C, HoNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C and spin glass systems [R.Cywinski et al, ISIS Experimental Report and I.A.Campbell et al to appear in Hyp. Int.]. Complementary measurements for R=Y were made to determine the muon position.

#### LONG-RANGE ORDER AND METASTABLE BEHAVIOR IN THE DILUTED

ANTIFERROMAGNET Mn<sub>0.35</sub>Zn<sub>0.65</sub>F<sub>2</sub>

F. C. MONTENEGRO

*Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco 50670-901 Recife, Pernambuco*

D. P. BELANGER, Z. SLANIC

*Department of Physics, University of California Santa Cruz, California 95064, USA*

J. A. FERNANDES-BACA

*Oak Ridge National Laboratory Oak Ridge, Tennessee 37831*

The antiferromagnetic long-range order (AF LRO) has been investigated by neutron scattering technique in the highly diluted antiferromagnet Mn<sub>0.35</sub>Zn<sub>0.65</sub>F<sub>2</sub>. The measurements have been performed at the High Flux Isotope Reactor of the Oak Ridge National Laboratory, both in the absence of fields ( $H = 0$ ) and with an external magnetic field applied parallel to the easy axis of the compound. Mn<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>F<sub>2</sub> has been considered an experimental realization of the Random-Exchange Ising Model (REIM) at  $H = 0$ . The application of a uniform field collinear with the axis of spontaneous order induces a crossover from REIM to Random-Field Ising Model (RFIM) critical behavior. All experiments performed in this system under weak random fields and  $x > 0.4$  have in common AF LRO at low temperatures (T) and a critical phase boundary governed by the same  $\phi = 1.4$  REIM to RFIM crossover scaling exponent. However, for  $0.2 < x < 0.4$  it has been reported<sup>1</sup> that at low T the magnetic moments become randomly distributed, in a state of a time-varying spin glass. Magnetization measurements in the same sample investigated in the present work show<sup>2</sup> a de Almeida-Thouless line with  $\phi = 3.4$ . Here we present results which support the existence of AF LRO at  $H = 0$ , as expected for  $x$  above the percolation threshold ( $x_p = 0.24$ ). The antiferromagnetic order persists for small H, but the Bragg peaks start to show a noticeable irreversible behavior above a given field. An interpretation of our data will be given in comparison with the earlier results.

<sup>1</sup>A.N. Bazhan and S.V. Petrov, Sov. Phys. JETP 53, 337 (1981)

<sup>2</sup>F.C. Montenegro, A. Rosales-Rivera, J.C.O. de Jesus, E. Montarroyos and F.L.A. Machado, Phys Rev. B51, 5849 (1995)

**DIRECT MEASUREMENT OF DISTANT NEIGHBORS EXCHANGE CONSTANTS IN  $Zn_{1-x}Mn_xB$  ( $B=S, Se$  and  $Te$ )**

MARCO ANTONIO BASTOS DA SILVA, HENADY MALARENKO JR, EWOUT TER HAAR, NEI FERNANDES OLIVEIRA JR, VALDIR BINDILATTI  
IFUSP

The exchange constants between nearest neighbor pairs of  $Mn^{2+}$  ions,  $J_1$ , in this series of II-VI diluted magnetic semiconductors have been determined in the past. They are antiferromagnetic (AF) and have the values  $-16.1$  K,  $-12.2$  K and  $-9.0$  K, respectively for  $B = S, Se$  and  $Te$ . The further exchange constants,  $J_2, J_3$ , etc., are predicted to be all AF and each about one order of magnitude smaller than the previous. To study this distant neighbor exchange we have performed magnetization measurements on a series of low concentration ( $x$  around 1%) samples at  $T = 20$  mK and magnetic fields up to 9 tesla. The experimental traces showed the signature of two series of magnetization steps due to pairs. That enabled us to determine the next two strongest AF exchange constants in these materials. The results are:  $-0.42$  K and  $-0.04$  K for  $Zn_{1-x}Mn_xS$ ,  $-0.43$  K and  $-0.09$  K for  $Zn_{1-x}Mn_xSe$ , and  $-0.55$  K and  $-0.15$  K for  $Zn_{1-x}Mn_xTe$ . These results show that each exchange constant grows in strength with the anion going from the sulfide to the telluride, in the opposite sense of the variation of  $J_1$ . Contrary to the expectation, the statistical analysis of the magnetization traces shows that none of the observed constants correspond to  $J_2$ , but rather to more distant neighbors. The identification of these exchange constants will be discussed.

**RELAXAÇÃO MAGNÉTICA EM LIGAS NANOCRISTALINAS DE  $SmFeCo$**

DANIEL R. CORNEJO, FRANK P. MISSELL

*Instituto de Física, Univ. de São Paulo, São Paulo, Brazil*

Estudamos as características da relaxação magnética em ligas nanocristalinas de  $SmFeCo$  obtidas por "mechanical alloying", as quais apresentam comportamentos do tipo "exchange-spring magnet".

Partindo da equação constitutiva  $dH_i = \frac{1}{\chi_{irr}} dM_{irr} + S_0 d \ln(\dot{M}_{irr})$  onde  $H_i$  é o campo interno,  $M_{irr}$  e  $\chi_{irr}$  são as componentes irreversíveis da magnetização e da susceptibilidade, respectivamente,  $S_0 = \frac{S_0}{\chi_{irr}(1+\eta)}$  sendo  $S_0$  o coeficiente de viscosidade para fator desmagnetizante zero e  $\eta(H) = \frac{dM_{rev}}{dM_{irr}}$  leva em conta a dependência da componente reversível da magnetização com a componente irreversível, podemos escrever para campo  $H_a$  constante:

$$M(t) = M_0 - \frac{S_0}{1 + D\chi_{tot} + \eta D\chi_{irr}} \ln\left(1 + \frac{t}{t_0}\right) \quad (1)$$

ou para  $H_i$  constante:

$$M(\dot{M}_{irr}) = M_0 + S_0 \ln(\dot{M}_{irr}) \quad (2)$$

onde  $D$  é o fator desmagnetizante, e  $\dot{M}_{irr} \approx \chi_{irr} \dot{H}_a$ . Dois métodos experimentais foram utilizados para determinar a viscosidade  $S_0(H)$ . O primeiro foi a medida convencional da magnetização em função do tempo mantendo  $H_a = cte$  durante 600 segundos (o que corresponde à equação 1). No segundo método se obtiveram curvas de desmagnetização com diferentes taxas de varredura de campo, entre 5 e 450 O/s, aproximadamente. Neste caso aplica-se a equação 2 aos valores de  $M(\dot{H})$  para cada valor de campo  $H$ . Fizemos também as medidas de curvas de inversão necessárias para determinar a distribuição  $\eta(H)$ .

Nossos resultados mostram que  $\eta(H)$  é muito próximo de zero na região onde os processos irreversíveis são dominantes (ou seja  $H \approx H_c$ ). A comparação entre o  $\eta(H)$  experimental e a distribuição obtida mediante uma simulação com o modelo móvel de Preisach mostra um excelente acordo qualitativo. As duas distribuições  $S_0(H)$  obtidas são próximas. Observamos também claros desvios da relação linear 2 para altas taxas de varredura de campo. Estes desvios são consistentes com os observados na experiência convencional (equação 1) em tempos curtos.

Trabalho financiado por CAPES, FAPESP, CNPq e FINEP

**MAGNETISMO E MATERIAS MAGNÉTICOS (Filmes Finos e Multicamadas Magnéticas/Sistemas Granulares) - 13/06/97**

**EXCHANGE COUPLING IN MAGNETIC MULTILAYERS**

AUGUSTO CÉSAR DE CASTRO BARBOSA, ROBERTO BECHARA MUNIZ, JOSÉ D'ALBUQUERQUE E CASTRO

*Universidade Federal Fluminense*

MARCUS VINICIUS TOVAR COSTA

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas*

The coupling  $J$  between local moments in an itinerant electron system is investigated, both in the bulk and near the surface. The approach is based on an extension of the theory developed for studying the coupling in metallic multilayers [1]. Simple analytical expressions for  $J$  are derived from the change in thermodynamic potential due to local spin fluctuations. We find that the coupling  $J(d)$  between the magnetizations of two atomic planes is an oscillatory function of the distance  $d$  between the planes, and that the amplitude of the oscillations can either decay exponentially with  $d$  or as

$1/d^2$ . We show analitically that these two regimes can be explained in terms of the geometry of the up and down spin Fermi surfaces of the material. In addition, considering at the behaviour of  $J$  for large values of  $d$ , we were able to show that, in some circumstances, a simple prescription can be given, which determines both the period and amplitude of the oscillations. We also show that our expression  $J(d)$  is directly related to the effective exchange interactions obtained by Mathon [2], by looking at the long wave length limit of the spin wave dispersion relation. Thus, we were able to establish a simple relation between the energies of long and short wave length spin fluctuations. Results of numerical calculations give that the coupling near the surfaces is in general reduced with respect to the bulk value, as assumed by Scholl et al [3]. However, in some cases, such a reduction may not be seen experimentally because of a phase shift between the curves of  $J(d)$  for the surface plane and one in the bulk.

[1] J. d'Albuquerque e Castro, M. S. Ferreira and R. B. Muniz, Phys. Rev. B 49, R16062 (1994).

[2] J. Mathon, Phys. Rev. B 34, 1775, (1986).

[3] D. Scholl, M. Donath, D. Mauri, E. Kay, J. Mathon, R. B. Muniz and H. C. Siegmann, Phys. Rev. B 43, 13309, (1991).

### MAGNETIZAÇÃO E MAGNETORESISTÊNCIA EM LIGAS GRANULARES

EDSON FERNANDO FERRARI, FÁBIO CESAR  
SIQUEIRA DA SILVA, MARCELO KNOBEL  
UNICAMP

Em ligas metálicas compostas por grãos ferromagnéticos dispersos em uma matriz não-magnética, a magnetoresistência é atribuída ao espalhamento de elétrons dependente do spin que ocorre tanto no interior dos grãos quanto na interface entre os grãos e a matriz não-magnética. Ambos os mecanismos de espalhamento são representados por um fator adicional na expressão da magnetoresistência. Em um sistema de grãos superparamagnéticos, espera-se uma dependência quadrática entre a magnetoresistência e a magnetização. Contudo, foram observadas e explicadas de diversas maneiras numerosas observações de comportamento não-parabólico. Como os grãos têm uma distribuição de momentos magnéticos, a dependência quadrática usual entre a magnetoresistência e a magnetização é válida somente quando o campo magnético é fraco, porém apresenta um grande achatamento em comparação com a parábola esperada quando os grãos têm o mesmo momento magnético. Quando o campo é forte, o expoente parabólico é aumentado por um fator que é maior para distribuições de momentos magnéticos mais largas. A magnetização é dada por

$$M(H, T) = - \int_0^\infty \mu L\left(\frac{\mu H}{kT}\right) f(\mu) d\mu,$$

a magnetização de saturação é dada por

$$M_s = \int_0^\infty \mu f(\mu) d\mu = N \langle \mu \rangle$$

e a magnetoresistência é dada por

$$MR(H, T) = - \frac{A}{N^2} \left[ \int_0^\infty \left( \mu + \alpha \mu^{2/3} \right) L\left(\frac{\mu H}{kT}\right) f(\mu) d\mu \right]^2,$$

sendo  $f(\mu)$  a função de distribuição de momentos magnéticos e  $L\left(\frac{\mu H}{kT}\right)$  a função de Langevin. Para os valores extremos do campo magnético, a magnetoresistência normalizada tem a seguinte forma:

$$MR = \begin{cases} -g^2 \left(\frac{M}{M_s}\right)^2 & (\langle \mu \rangle H \ll 1), \\ -\left(\frac{M}{M_s}\right)^{2J} & (\langle \mu \rangle H \gg 1), \end{cases}$$

sendo  $f$  e  $g$  parâmetros definidos em termos de  $\alpha$  e da função de distribuição  $f(\mu)$ . Em geral, a parábola que se ajusta à curva de magnetoresistência quando o campo magnético é fraco é achatada e a magnetoresistência satura mais lentamente do que o faria se a curva fosse parabólica quando o campo é forte, pois  $g < 1$  e  $f > 1$ . Os ajustamentos feitos com a distribuição log-normal estão em boa concordância com as curvas experimentais obtidas em amostras de  $\text{Cu}_{90}\text{Co}_{10}$ .

### PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DE FILMES FINOS MULTICAMADAS DE FEZR IMPLANTADOS COM N

MAGALE ELISA BRÜCKMANN, JOÃO EDGAR  
SCHMIDT, LIVIO AMARAL  
Instituto de Física - UFRGS

A busca por materiais para pólos de cabeças de gravação que apresentem, p.e., alto momento, baixa coercividade, alta permeabilidade e baixa magnetostrição, tem despertado muito interesse na ciência e tecnologia. Ligas de FeN, bem como filmes de ferro nitretado, têm apresentado algumas dessas propriedades, tendo sido mostrado, também, melhora em algumas características devido à adição de um terceiro elemento, como p.e. Zr, Hf ou Ta. Em nosso trabalho procuramos verificar o comportamento frente a formação de fases e propriedades magnéticas de filmes finos multicamadas de Fe-Zr implantadas com N. Para tanto, foram preparadas, por evaporação sequencial através de um sistema de feixe duplo de elétrons, duas multicamadas de modulações 133Å e 270Å nas composições 50 e 57% átomos de Fe, as quais foram submetidas a posterior tratamento térmico (500°C/2h). Nas amostras como depositadas e tratadas termicamente foi construído um plateau (aproximadamente 30% de N) entre a superfície

e 120nm, através da implantação de íons  $N^+$  com energias de 20, 40 e 70 keV. As amostras foram analisadas através de raio-X, RBS, reação nuclear, CEMS e magnetometria. Devido às diferentes composições, as duas multicamadas apresentaram algumas diferenças quanto à formação de fases, mas em ambos os casos, as amostras tratadas termicamente e/ou implantadas, apresentaram basicamente um desdobramento quadrupolar típico de uma fase paramagnética amorfa ( $\Delta EQ = (0.28 \pm 0.02) \text{mm/s}$ ;  $IS = (-0.16 \pm 0.02) \text{mm/s}$ ). As medidas magnéticas revelaram uma significativa redução no HC (valor final típico da ordem de 1 Oe) em função da nitretação, tanto para as multicamadas como depositadas quanto para as tratadas termicamente, enquanto que as magnetizações de saturação não tiveram variações tão acentuadas. Para separar os efeitos de mistura relativamente a efeitos de ligação química com N devido à implantação, também foram analisadas amostras implantadas com Ar em doses equivalentes.

#### **SUPERLATTICE CROSSOVER EFFECT IN MULTILAYER Fe/Cr FILMS**

VICTOR C. DOS SANTOS, ANTONIO A. R. FERNANDES  
IME

One of the most exciting areas of magnetic film research is that of coupled magnetic multilayer systems. The excitement is over Fe/Cr superlattice systems with the property of magnetic magnetoresistance. The Fe layers are ferromagnetic, but coupling through the intervening Cr layers may be either ferromagnetic or antiferromagnetic, depending on the thickness of the magnetic layers. Magnetic behavior of multilayers depends, among other factors, on the total thickness of the magnetic layers, the relative thickness of the magnetic and non-magnetic layers, and the interface roughness. In this work we demonstrate the existence of a crossover of the in-plane angular dependence of the ferromagnetic resonance field as a superlattice effect in Fe/Cr multilayer films. The Fe/Cr superlattices were grown on MgO substrates, using dc magnetron sputtering. Ferromagnetic resonance measurements were performed at room temperature using a Varian X-band (9.5 GHz) electron spin spectrometer with a rectangular  $TE_{102}$  microwave cavity. Ferromagnetic resonance measurements on different Fe/Cr multilayer samples with the same thickness of the spacing Cr layers suggest that these multilayers have a different magnetic behavior depending on the thickness of the active Fe layers. Superlattice behavior is not observed when the thickness of the active layers is much larger than the thickness of the spacer layers. This fact should be taken into account in the design of future experiments. We thank Dr. E. E. Fullerton (Argonne Laboratory, USA) for sample preparation.

#### **RESSONÂNCIA FERROMAGNÉTICA EM FILMES FINOS DE Fe/FeO<sub>x</sub>**

VERA L. D. M. CURA, VICTOR C. DOS SANTOS, ROSANGELA M. P. ALVES, ANTONIO A. R. FERNANDES  
IME

Nos últimos anos ampliou-se consideravelmente o interesse científico por filmes finos magnéticos, não apenas por sua importância para a pesquisa científica fundamental, mas também pela diversidade de suas aplicações tecnológicas. Entre as técnicas experimentais utilizadas no estudo das propriedades magnéticas destes filmes, a ressonância ferromagnética tem sido uma das mais promissoras. Sabe-se que as propriedades magnéticas destes filmes são fortemente modificadas pelas condições de superfície, entre as quais a oxidação, a rugosidade etc. Neste trabalho, medidas da variação angular do campo de ressonância foram realizadas em amostras de filmes finos metálicos magnéticos sistematicamente oxidadas, com o objetivo de se obter uma metodologia para avaliação da espessura da camada superficial de óxido nestes filmes. Amostras de filmes de ferro de 2000 Å foram produzidas por evaporação resistiva sobre substrato de vidro opticamente polido, em câmara de vácuo trabalhando a  $10^{-6}$  Torr com uma taxa de deposição de  $1 \text{Å/s}$ , monitorada por cristal de quartzo. As amostras foram posteriormente oxidadas em atmosfera de  $O_2$  à pressão parcial de  $10^{-2}$  Torr, a uma temperatura de 373 K, por 5, 10, 20, e 40 minutos, in situ. As medidas de ressonância ferromagnética foram realizadas em banda X (9.5 GHz) à temperatura ambiente, com o campo magnético externo aplicado inicialmente no plano do filme e variando até a normal (geometria fora do plano). Os resultados experimentais mostraram que existe uma forte correlação entre a oxidação da superfície dos filmes e a variação angular do campo de ressonância.

#### **FIELD EFFECTS ON RARE EARTH THIN FILMS**

V. D. DE MELLO, N. S. ALMEIDA, A. S. CARRIÇO  
*Departamento de Física, Centro de Ciências Exatas, Univ. Fed. do Rio Grande do Norte*

We report on a new phase of helimagnetic and conical rare earth films induced by external field along the c-axis. A thin film with normal along the c-axis is a layered magnetic structure where magnetic moments in planes perpendicular to the c-axis are parallel. This structure is represented by a chain of spins, each associated with the moments in a given plane. The equilibrium magnetic profile is determined numerically using a self-consistent effective field approach. Surface and applied field effects are incorporated by allowing the pertinent local modifications in the effective field. Thin films display a non uniform magnetic structure that results from

the lower coordination near the surface region. In the absence of external fields there are oscillations in the c-axis components of moments near the surface as well as small distortions in the helix. These modifications on the conical structure are larger for low c-axis anisotropy materials. The effect of external field is to enhance the oscillations near the surface, which progressively increase in amplitude and extend deeper into the middle of the film as the external field increases. Before saturation the distorted conical structure collapses into a phase which is characterized by small amplitude oscillations of the c-axis angle, with the periodicity of the helix. The moments lie in a plane containing the c-axis and one hexagonal anisotropy easy axis. This phase is not present in the bulk and is induced by the low coordination of surface spins. In the bulk the oscillations would necessarily be uniform. We show that such a magnetic pattern is not a minimum of the total magnetic energy. The threshold field increases when the c-axis anisotropy increases. Low anisotropy materials display the new phase in a wider range of applied fields. The results are applied for Dy, Er and Ho thin films.

#### Estudo de Propriedades Elétricas e Magnéticas de Filmes Granulares de Fe em uma Matriz de $Al_2O_3$ .

FABRICIO DE OLIVEIRA CASARIN, MARCO AURÉLIO SILVEIRA BOFF, WLADIMIR H. FLORES, CYRO KETZER SAUL, JOÃO EDGAR SCHIMIDT, SÉRGIO RIBEIRO TEIXEIRA  
*Instituto de Física - UFRGS*

Nós temos estudado as propriedades eletrônicas e magnéticas de filmes finos granulares [Fe(60%) /  $Al_2O_3$  (40%)] depositadas por coevaporação com feixe de elétrons, sobre bolachas de Si [111] previamente oxidadas. A coevaporação foi efetuada em vácuo melhor que  $10^{-7}$  mbar e com os substratos mantidos em temperatura ambiente. Os filmes assim obtidos foram analisados por RBS (Rutherford Backscattering Spectroscopy) com energia de 1.6 MeV, o qual confirmou a presença dos elementos, e permitiu quantificar os respectivos percentuais. A análise também foi efetuada com XRD (X-Ray Diffractometry), a qual evidenciou a fase amorfa do  $Al_2O_3$  e a evolução estrutural dos grãos de Fe. As amostras foram estudadas, como depositadas, e tratadas termicamente nas temperaturas de 200 e 400°C durante uma hora, em vácuo melhor que  $2 \times 10^{-6}$  mbar. Posteriormente essas amostras foram caracterizadas utilizando técnicas I-V, medidas de magnetização e de magnetoresistência. As medidas I-V demonstraram, em algumas das amostras, funcionalidade não ôhmica, possivelmente devido ao tunelamento eletrônico intergrãos. Nos testes I-V com faixas de tensão mais elevadas foi observada a transição de uma funcionalidade não ôhmica para uma funcionalidade ôhmica, a qual pode ser interpretada como uma percolação dos grãos

de Fe na matriz de  $Al_2O_3$  ou como a ruptura da rigidez dielétrica do filme. As medidas de magnetização, com campo máximo de 10 kOe, evidenciaram um comportamento superparamagnético que variava de acordo com o tratamento térmico, como seria esperado. Já as medidas de magnetoresistência foram efetuadas utilizando um campo máximo de 5 kOe, e evidenciaram uma variação de magnetoresistência da ordem de 1.7% para amostras sem tratamento térmico.

#### The Magnetic Behavior of the $Co_xFe_{1-x}/Ag$ Films.

WLADIMIR HERNANDEZ FLORES, SÉRGIO RIBEIRO TEIXEIRA, JOÃO BATISTA MARIMON DA CUNHA, JULIAN PENKOV GESHEV  
*Instituto de Física - UFRGS*  
MARIA DO CARMO MARTINS ALVES  
*LNLS - Laboratório Nacional de Luz Síncrotron*  
AGNES TRAVERSE  
*LURE - Université Paris-Sud*  
PAUL J. SCHILLING  
*Center for Advanced Microstructures and Devices*

The observation of the giant magnetoresistance (GMR) effect in granular films, where the magnetic material is formed by small precipitates embedded in a nonmagnetic matrix, has stimulated new interest because of its potential technological applications, and also because it is a new field for fundamental scientific research. Recently, Hylton et al. proposed the preparation of discontinuous multilayers by annealing of sputtered multilayers, in order to minimize the effects of crystal and shape anisotropy. Using this procedure on  $[(Co_xFe_{1-x})(15\text{\AA})/Ag(50\text{\AA})]_{10}$ , with ( $x=0, 0.3, 0.7$  and 1), we started from a multilayer structure with thin magnetic layers, and forthwith breakup the layers through successive annealings (200-600 °C / 10 minutes), to obtain a regular granular magnetic network, embedded in a nonmagnetic matrix. The ferromagnetic layers formed a network consisting of connected ferromagnetic grains of small size. Hence, a multi domain magnetic state within each layer was expected. The objective here, is to achieve a complete insulation of the individual magnetic grains through successive annealing with a certain ordered layer structure. The GMR results are correlated with the measured hysteresis loop. The saturation fields for the magnetoresistance (MR) coincided with the saturation fields for the magnetization. The breaking of the ferromagnetic order between layers is not instantaneous, only at temperature ( $T_A$ ) > 400 °C a contribution of small and nonaligned ferromagnetic granules, with random distribution of size and moments in the plane, appears. Thus, the magnetic coercivity ( $H_c$ ) increases. The decrease of the  $H_c$  at  $T_A=600$  °C is attributed to a breakup of the layers, proportioning the formation of small disconnected granules, which behave as super paramagnetic particles.

The MR for samples at  $T_A < 400$  °C displays features of anisotropic MR. For  $T_A \geq 400$  °C only negative MR for both directions is present.

### **CARACTERIZAÇÃO ESTRUTURAL E MAGNÉTICA DE FILMES FINOS DE CoCr COM ANISOTROPIA PERPENDICULAR**

ELIANE F. CHINAGLIA, IVETTE C. OPPENHEIM  
*Instituto de Física, Universidade de São Paulo*

Filmes Finos de CoCr foram depositados por evaporação por canhão de elétrons, sobre uma superfície amorfa e sobre uma subcamada de Ti. A superfície amorfa foi obtida recobrimo um substrato de Si com uma camada de Carbono. A temperatura do substrato foi mantida a 120°C, 200°C e 280°C. A composição variou de 0 a 27% de Cr no filme e a espessura manteve-se em torno de 100nm. A espessura da subcamada de Ti foi de 40nm. A composição e a espessura destes filmes foram obtidas utilizando Espectroscopia de Retroespalhamento Rutherford. A análise cristalográfica foi realizada por Difração de Raios-X. As propriedades magnéticas foram obtidas utilizando o Magnetômetro de Amostra Vibrante. Os filmes de Ti e de CoCr apresentaram texturização e coerência cristalina máxima na direção 0002 quando depositados a 120°C. Observamos que a inclusão da subcamada de Ti favorece o crescimento epitaxial do CoCr em relação aos filmes depositados diretamente sobre C/Si. O valor da magnetização de saturação ( $M_S$ ) decai linearmente com o aumento de Cr no filme, independentemente da temperatura de deposição e da inclusão da subcamada de Ti. Os valores de  $M_S$  para os filmes mostraram-se maiores que os obtidos para ligas "bulk" de mesma composição nominal, indicando a existência de estados de separação composicional no filme. Valores máximos de campo coercivo ( $H_C$ ) foram obtidos para amostras com percentual de Cr em torno de 15 a 18%. A dependência angular de  $H_C$  em relação ao campo aplicado mostrou uma forte dependência com a composição do filme, indicando que a microestrutura e a estrutura de domínios é basicamente definida por este parâmetro. A análise das componentes da magnetização mostrou que a amostra com composição  $Co_{79.4}Cr_{20.6}$ , depositada a 120°C, apresenta o comportamento que mais se aproxima do esperado para um filme que possua um alto campo de anisotropia perpendicular.

Suporte Financeiro: CNPq, FAPESP

### **ESTUDO DO RUÍDO EM FILMES FINOS MAGNÉTICOS DE CoCr COM ANISOTROPIA LONGITUDINAL**

ROBERTO M. FERNANDES, ELIANE F. CHINAGLIA,  
IVETTE C. OPPENHEIM, FRANK P. MISSEL  
*Instituto de Física, Universidade de São Paulo*

Foram fabricados filmes finos magnéticos de ligas de CoCr sobre uma subcamada de Cr em substratos de Si recobertos com C pelo processo de evaporação por canhão de elétrons. Estudamos relações existentes entre características estruturais e magnéticas desses filmes, usando análise por Espectroscopia de Retroespalhamento Rutherford, difração de raios-X e magnetometria de amostra vibrante. A temperatura de 250°C para deposição dos filmes foi escolhida por favorecer o crescimento da textura cristalográfica (1120) do CoCr. Os resultados de difração de raios-X indicam que o aparecimento dessa textura ocorrerá se, além de uma boa combinação entre os parâmetros de rede da superfície da subcamada de Cr e do filme magnético de CoCr, houver condições de evaporação estáveis durante o processo de deposição. Experimentalmente, verificamos que a magnetização de saturação decresce linearmente com o aumento de Cr na liga. Observamos que filmes de CoCr de mesma composição podem apresentar diferentes valores da magnetização de saturação. Isso pode ser explicado considerando-se inhomogeneidades locais de composição diferentes para filmes de mesma composição média. O campo coercivo também foi analisado em função da variação do percentual de Cr. Seu comportamento pode ser explicado em termos da variação da intensidade da interação intergranular devido ao aumento e redução do Cr nos contornos do grão. Altos percentuais de Cr no filme (acima de 30%) fazem com que o sistema de CoCr tenha características de sistema de partículas não interagentes. A avaliação das interações intergranulares foi estudada com curvas de remanência. Através dessas curvas foi possível estabelecer uma relação entre as interações intergranulares e a quadratura coerciva. O aumento da quadratura coerciva está associada à redução da largura a meia altura da derivada da curva de remanência.

Suporte Financeiro: CNPQ, FAPESP

### **Nanocristalização de fitas amorfas de $Fe_{88}Zr_7B_1Cu_6$ através de aquecimento Joule**

FÁBIO C. S. DA SILVA, MARCELO KNOBEL  
*UNICAMP*

Certas ligas magnéticas amorfas, produzidas por resfriamento rápido da fase líquida, quando submetidas a tratamentos térmicos específicos, apresentam melhoria em suas propriedades magnéticas de interesse para aplicações técnicas. Entretanto, para tratamentos térmicos convencionais, esta melhoria muitas vezes é obtida às custas de perdas nas suas propriedades mecânicas, pois o material cristaliza, ou nanocristaliza. Tipicamente, a amostra tratada convencionalmente fica quebradiça e de difícil manuseio. Na década de 80 foi introduzido por Jagielinsky<sup>[1]</sup> o método não convencional de aquecimento por efeito Joule que permitia tratamentos térmicos curtos (0.05 a 100 s) e com alta taxa de aquecimento e resfriamento (da ordem de  $10^2$  K/s).

A grande vantagem deste método sobre os convencionais é que ele permite uma melhoria nas propriedades magnéticas da liga sem comprometer seriamente suas características mecânicas. Usaremos esta técnica para estudar a nanocristalização de uma fita amorfa de composição nominal  $\text{Fe}_{86}\text{Zr}_7\text{B}_1\text{Cu}_6$ . Serão mostradas medidas de permeabilidade inicial e resistividade da amostra ao longo do tempo durante o tratamento térmico com o intuito de estimar a temperatura da amostra e seguir a cinética de transformação. Os resultados são explicados por um modelo que leva em consideração a energia de formação dos grãos cristalinos nanométricos na matriz amorfa durante o tratamento e os diversos mecanismos de perda de calor<sup>[2]</sup>. Serão discutidos os possíveis efeitos causados pela distribuição volumétrica destes nanocristais nas propriedades magnéticas.

[1]: T. Jagielinsky, IEEE Trans. Magn. 19, No. 5, p.1925, 1984.

[2]: P. Allia, P. Tiberto, M. Baricco and F. Vinai, Rev. Sci. Instrum. 64 (4), p. 1053, April 1993.

#### EFEITOS DE INTERFACE E MODOS DE RESSONÂNCIA EM MULTICAMADAS DE Co/Pd POR FMR

JOSÉ ALEXANDRE ROMANO, EDSON CORRÊA DA SILVA

UNICAMP

JOÃO EDGAR SCHMIDT  
UFRGS

Multicamadas ultrafinas de Co/Pd, com diferentes relações de espessuras e depositadas em substrato de Si (111) por e-beam evaporation, foram estudadas por ressonância ferromagnética (FMR). Medidas de raio-X indicaram que todas as amostras são policristalinas com texturização (111). Os espectros mostraram também a presença de dois modos de ressonância, sendo que a origem de um deles, de acordo com a literatura, não é ainda bem entendida. No presente trabalho estudamos intensamente as amostras por FMR com o intuito de esclarecer a origem deste modo e também o papel das interfaces na anisotropia magnética desses materiais. Também foi estudado o comportamento dos dois modos de ressonância em função da temperatura, num intervalo de 100 a 500 K, e determinamos a variação do campo de anisotropia efetiva de cada um dos modos em função da temperatura. Um dos modos manteve-se estável até a temperatura de 400 K e as anisotropias de volume e de superfície relativas a este estão condizentes com os valores de  $K_V$  e  $K_S$  encontrados na literatura para multicamadas de Co/Pd. Já a anisotropia efetiva do outro modo teve uma variação com a temperatura de acordo com a relatada na literatura para determinadas composições de ligas Co-Pd, o que indica ser este causado possivelmente por uma liga formada nas interfaces das multicamadas.

#### CLUSTER CALCULATIONS OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF Fe-Co MULTILAYERS

FERNANDO FRANÇA

Departamento de Física - Universidade do Estado de Santa Catarina

CLEDERSON PADUANI

Departamento de Física - Universidade Federal de Santa Catarina

The first-principles discrete variational method is employed to study the electronic structure of Fe-Co thin films. The von Barth-Hedin term is adopted for the exchange-Correlation potential. From the calculation are obtained local properties for both Fe and Co atoms, as the magnetic moment, the magnetic hyperfine field, the ionization as well as the partial density of states. The calculations are performed in molecular cluster which are embedded in the long-ranged Coulomb potential of the crystal, consisting of about atoms. The local properties are investigated for both bulk and interface iron atoms. The influence of the local symmetry as well as of the neighborhood arrangement is also studied. The atomic basis adopted are obtained from the converged populations of the central atom of clusters representing the pure metal. The partial density of states, the magnetic moment, the charge transfer and the Fermi contact term is obtained from the central atom of each cluster. Fe/Co multilayer thin films with various Fe layer and Co layer thickness have been deposited by sputtering techniques. The bcc single phase was obtained for films with smaller thickness of Co than 2 nm. A mixture of bcc and hcp phases was obtained for films with larger thickness of Co and Fe than 5 nm. The films with bcc phase have (110) planes parallel to the film surface. The lattice constant of films is smaller than for bulk Fe and decrease linearly to about 2.81 Å with increasing Co layer thickness. The films are ferromagnetic with an easy magnetization direction in the film plane. The magnetization of multilayer films in comparison with that of Fe-Co alloy films with similar compositions is smaller for films with a thicker Fe than Co layer, and larger for films with a thinner Fe than Co layer. The large magnetization of Fe-Co films is attributed to the large magnetization of bcc-Co in comparison with that of bulk hcp Co.

#### CALOR ESPECÍFICO DE FITAS DE Cu-Co WALLACE DE CASTRO NUNES, ÂNGELO MÁRCIO DE SOUZA GOMES, WALTER SYDNEY DUTRA FOLLY, MIGUEL ALEXANDRE NOVAK

UFRJ

MARCELO NOBEL

Unicamp

Apresentaremos medidas de Calor específico de fitas Co-Cu, preparadas por resfriamento rápido, com cam-

pos de 3kOe e nulo aplicados, a baixas temperaturas. Sistemas magnéticos granulares, consistem de partículas nanocristalinas magnéticas embebidas por uma matriz metálica não magnética, tem sido estudadas intensamente devido a interessantes comportamentos magnéticos e mecânicos. Uma das maiores causas é a ocorrência de magnetoresistência gigante nestes materiais. As propriedades de magnetotransporte e suas origens físicas nas ligas granulares de Co-Cu tem sido estudadas analisando a cinética de decomposição empregando técnicas tais como medidas de resistência elétrica e calorimetria por escaneamento diferencial a temperatura ambiente e acima desta. Em nosso trabalho utilizamos como fonte de análise medidas de calor específico a baixas temperaturas, obtido pelo método semi-adiabático. As medidas do calor específico permite obter a densidade de estados eletrônicos no nível de Fermi e as contribuições devido ao campo magnético aplicado. Os modelos que atualmente explicam a magnetoresistência as descrevem como sendo devido à interações fracas e de longo alcance entre as partículas de Co. Estas interações devem dar uma contribuição ao calor específico a baixas temperaturas. De fato observamos um excesso de calor específico em relação ao comportamento metálico esperado abaixo de 5K. Surpreendentemente a contribuição do termo linear independe de um campo H aplicado até 3kOe, campo que é suficiente para saturar parcialmente a magnetização e a magnetoresistência. Discutiremos as implicações deste nosso resultado.

**ESTUDO TEÓRICO DO  
COMPORTAMENTO MAGNÉTICO DE  
SANDUÍCHES DE Fe/Cr/Fe(001) E  
SUPER-REDES DE Fe/Cr(001) : PAPEL DA  
RUGOSIDADE NA INTERFACE Fe-Cr E DA  
COMPRESSÃO DA REDE DO Cr.**

ÂNGELA BURLAMAQUI KLAUTAU, SONIA  
FROTA-PESSÔA, SERGIO LEGOAS

*Instituto de Física da Universidade de São Paulo - IFUSP*

ROBERTO BECHARA MUNIZ

*Instituto de Física da Universidade Federal Fluminense*

O estado fundamental magnético do Cr puro bcc é uma onda de spin não comensurável com a rede cristalina (quase um antiferromagneto) com momento magnético local aproximadamente igual a  $0.6 \mu_B$ . No entanto, medidas experimentais [1] mostram que camadas de Cr, com espessura menor que aproximadamente 30 planos atômicos, justapostos entre camadas de Fe(100), são não magnéticas. Cálculos teóricos [2] indicam que antiferromagnetismo do Cr é bastante sensível a pequenas variações do parâmetro de rede. Por outro lado, cálculos parametrizados [3] sugerem que a rugosidade pode ser importante na supressão do momento. Para entender o comportamento observado experimentalmente para as camadas de Cr em Fe bcc, neste traba-

lho nós apresentamos um estudo teórico de propriedades magnéticas de sanduíches Fe/(Cr)<sub>m</sub>/Fe(001) com interfaces Fe-Cr perfeitas e super-redes Fe/(Cr)<sub>m</sub>(001) com interfaces de Fe-Cr perfeitas ou rugosas. Utilizamos o método RS-LMTO-ASA ("Real Space - Linear Muffin-Tin Orbital - Atomic Sphere Approximation"), que é baseado no formalismo LMTO-ASA e no método de recorrência, que realiza cálculos de estrutura eletrônica autoconsistentes e de primeiros princípios no espaço direto de sistemas envolvendo um grande número de átomos não equivalentes. Analisamos o efeito da compressão da rede do Cr, devido à presença das camadas de Fe, e da rugosidade nas interfaces Fe-Cr no desaparecimento do momento magnético local do Cr, nos vários sistemas Fe/(Cr)<sub>m</sub>(001). Comparamos nossos resultados com as medidas experimentais existentes.

1. J. Meersschaut, et. al. - Phys. Rev. Lett. 75, 1638 (1995).

2. A.B. Klautau, S. Frota-Pessôa e R.B. Muniz; Anais do XIX Encontro de Física da Matéria Condensada (1996).

3. D. Stoeffler and F. Gautier, Phys. Rev. B 44, 10389 (1991).

**TRANSIÇÕES DE FASE EM TRICAMADAS  
MAGNÉTICAS COM ACOPLAMENTOS  
BILINEAR E BIQUADRÁTICO**

CARLOS CHESMAN, MARCOS ANTONIO LUCENA,  
ANTONIO AZEVEDO, FLÁVIO MENEZES DE AGUIAR,  
SERGIO MACHADO REZENDE

*Departamento de Física, UFPE-PE*

STUART PARKIN

*IBM, Almaden Research Center, CA-USA*

Neste trabalho é apresentado um estudo dos diagramas de fases magnéticas em tricamadas do tipo Fe(40Å)/Cr(t)/Fe(40Å), onde  $5\text{Å} < t < 35\text{Å}$ , sobre MgO(001). Dependendo dos valores dos parâmetros que contribuem para a energia livre, este sistema pode apresentar diferentes tipos de fases magnéticas: antiferromagnéticas, "spin-flop", 90-graus, saturada, etc. Na energia livre, os termos que contribuem são: Zeeman, anisotropia magnetocristalina e os acoplamentos. A análise apresentada neste trabalho vale quando o acoplamento bilinear é moderado. Para o caso de campo magnético externo aplicado na direção fácil e quando a razão biquadrático/bilinear é menor que 1, basta a medida de magnetização para determinar os acoplamentos. Neste caso as curvas de magnetização apresentam dois campos de transição. O primeiro é a transição entre as fases antiferromagnética e a fase 90-graus. O segundo campo de transição corresponde à transição da fase de 90-graus para a fase saturada. Estas duas transições dependem apenas dos valores dos acoplamentos. Se a razão biquadrático/bilinear for maior que 1, apenas uma transição de fase é possível,

a transição da fase de 90-graus para a fase saturada. Independente do acoplamento bilinear ser antiferromagnético ou ferromagnético, podemos ter curvas de magnetização similares. Amostras que apresentaram tal comportamento estão na região do segundo pico antiferromagnético. Utilizando-se medidas de ressonância ferromagnética e espalhamento de luz Brillouin podemos determinar que tipo de acoplamento bilinear a amostra apresenta. Como a intensidade dos acoplamentos é pequena nesta região de espessura do cromo, não podemos determinar com precisão tais valores, pois estes encontram-se dentro do erro experimental.

### RESSONÂNCIA FERROMAGNÉTICA DE ONDAS DE SPIN EM MULTICAMADAS DE Co/SiO<sub>2</sub>

FERNANDO PELEGRINI

UFG

L. F. SCHELP, J. E. SCHMIDT

UFRGS

As propriedades magnéticas de sistemas de multicamadas magnéticas são influenciadas por vários efeitos, tais como: anisotropia magnetocristalina (de volume), anisotropia de superfície e acoplamento intercadas. A presença de anisotropia de superfície influencia a condição de ressonância dos spins da superfície produzindo condições de contorno que podem levar à formação de ondas de spin. Neste trabalho, empregando um espectrômetro BRUKER ESP-300 operando com micro-ondas na banda-X de frequência, investigamos os modos de ressonância ferromagnética de ondas de spin observadas em filmes finos compostos por camadas de Co separadas por camadas de SiO<sub>2</sub>, produzidos sobre substrato de silício oxidado, por deposição de vapor em vácuo. Para um filme composto por 10 bicamadas de Co (30 Å) / SiO<sub>2</sub> (45 Å), com o campo magnético externo perpendicular ao plano do filme, são observados três modos de ressonância, além do modo principal. A separação entre esses modos é da ordem de 1100 Gauss e à medida que o campo magnético externo é afastado da normal ao filme, as intensidades relativas dos mesmos decrescem, não sendo mais observados para ângulos superiores a 10°. Dos dados fornecidos pelos espectros de ressonância ferromagnética são deduzidos a constante de troca  $A$ , o campo de anisotropia efetivo  $H_{k\text{eff}}$  e a razão giromagnética  $\gamma$ . Modos de ressonância de ondas de spin bem menos evidentes, devido inclusive às limitações de campo magnético externo, são também observados em filme composto por 13 bicamadas de Co (30Å)/SiO<sub>2</sub>(20Å).

### ANISOTROPIA MAGNÉTICA NO PLANO DE FILMES FINOS DE Co/SiO<sub>2</sub>

DOMINGOS RODRIGUES SANTANA, FERNANDO PELEGRINI

UFG

L. F. SCHELP, J. E. SCHMIDT

UFRGS

Entre as várias técnicas empregadas no estudo das propriedades magnéticas de filmes finos e ultra-finos, a ressonância ferromagnética é particularmente adequada para a investigação da anisotropia magnética. A anisotropia magnética efetiva resulta de contribuições de volume, que reflete efeitos magneto-cristalinos e magneto-elásticos, e interface. Neste trabalho, para investigar a anisotropia magnética no plano de filmes finos de Co/SiO<sub>2</sub>, medimos com um espectrômetro BRUKER ESP-300 o campo de ressonância ferromagnética em função da orientação do campo magnético no plano do filme, em bandas X e Q de frequência de micro-ondas. As amostras investigadas, produzidas por deposição de vapor em vácuo, apresentam estrutura da forma Co/SiO<sub>2</sub> com camadas de Co de 50, 200 e 600 Å, e da forma Co/SiO<sub>2</sub>/Co/SiO<sub>2</sub>, com diferentes espessuras das camadas de Co e das camadas separadoras de SiO<sub>2</sub>. A variação angular do campo de ressonância, no plano do filme, é da ordem de 50G para um filme monocamada com estrutura Si/Co(50Å)/SiO<sub>2</sub>(100Å) e de 100G para um filme bicamada com estrutura Si/Co(30Å)/SiO<sub>2</sub>(60Å)/Co(200Å)/SiO<sub>2</sub>(100Å). As medidas de ressonância permitem determinar os campos efetivos de desmagnetização e anisotropia no plano do filme. A natureza desta anisotropia é discutida considerando o processo de preparação dos filmes.

### MAGNETORESISTÊNCIA GIGANTE EM FITAS DE CuCo

CEZAR S. MARTINS, FRANK P. MISSELL

IFUSP

Em trabalhos anteriores foi observado[1,2,3] a Magnetoresistência Gigante (GMR) em amostras heterogêneas contendo precipitados ferromagnéticos em uma matriz não magnética. No presente trabalho são apresentados resultados referente ao estudo da GMR em fitas de CuCo preparadas por "melt spun" e tratadas termicamente em uma atmosfera inerte, durante 15min. Durante o processo de solidificação rápida temos a formação de precipitados de cobalto em uma matriz de cobre. O tratamento térmico produz uma nucleação e crescimento destes precipitados. A resistência é máxima quando existe um alinhamento aleatório dos momentos magnéticos, ou seja na ausência de um campo magnético externo e é mínima quando todos os momentos estão alinhados na direção do campo segundo a teoria de espalhamento dependente de spin. As medidas de GMR foram obtidas utilizando o método das quatro pontas e uma ponte resistiva. A temperatura foi variada de 4.2K a 300K e o campo magnético até 5T. As curvas de magnetização foram obtidas em um magnetômetro de amostra vibrante(VSM) e utilizando um

SQUID. O maior valor obtido foi 16% em  $T=4.2K$ , para esta amostra a temperatura de tratamento térmico foi de 500 C. Em temperatura ambiente temos um comportamento superparamagnético e em baixas temperaturas apresenta um comportamento ferromagnético.

#### Referências

- [1] J. Q. Xiao, J. S. Jiang, and C.L. Chien, Phys. Rev. Lett. 68, 3749 (1992).  
 [2] A. E. Berkowitz, J.R. Mitchell, M. J. Carey, A. P. Young, S. Zhang, F. E. Spada, F. T. Parker, A. Hutten, and G. Thomas, Phys. Rev. Lett. 68, 3745 (1992).  
 [3] J. Wecker, K. Samwer, and L. Schultz, Appl. Phys. Lett. 62, 1985 (1993).

Apoio CNPq, FAPESP, FINEP

### SUSCETIBILIDADE MAGNÉTICA EM NANOESTRUTURAS EPITAXIAS Fe/Cu CRESCIDAS SOBRE $CaF_2/Si(111)$

A. J. A. DE OLIVEIRA, W. A. ORTIZ

*Grupo de Supercondutividade e Magnetismo - DF - UFSCar*

N. MATTOSO, W. H. SCHREINER, D. H. MOSCA

*Laboratório de Materiais - DF - UFPr.*

S. R. TEIXEIRA

*Laboratório de Filmes Finos - IF - UFRGS*

Nas últimas décadas o estudo do magnetismo em materiais ferromagnéticos metálicos-semicondutores, tem mostrado interessantes diferenças entre as propriedades físicas de sistemas feitos em filmes finos quando comparados com as observadas em "bulk". Contudo,

são raros na literatura os resultados de suscetibilidade magnética DC ( $\chi_{DC}$ ) e AC ( $\chi_{AC}$ ) em função da temperatura nesses sistemas. No presente trabalho apresentamos resultados de suscetibilidade magnética DC ( $\chi_{DC}$ ) e AC ( $\chi_{AC}$ ) em função da temperatura (5 - 300 K) e do campo magnético aplicado, de nanoestruturas epitaxiais tipo "sanduíche" Fe(300Å)/Cu(300Å)/Fe(300Å) e super-redes magnéticas do tipo [ Fe(110) 15Å / Cu(111) 15Å ] x10. As amostras foram crescidas sobre filmes monocristalinos de  $CaF_2$  previamente evaporados (Balzers UMS 500P) sobre wafers comerciais de Si(111). Nas super-redes Fe/Cu foi utilizado um buffer de Fe de 50Å de espessura. As medidas de suscetibilidade magnética foram feitas em um magnetômetro SQUID produzido pela Quantum Design, modelo MPMS-5S. Os resultados obtidos mostram que as amostras de apresentam um comportamento que tem uma forte dependência com a temperatura. Medidas feitas em baixos campos magnéticos (100 Oe) pode-se observar transições do tipo antiferromagnética - ferromagnética, indicando uma possível mudança no tipo de acoplamento magnético entre as camadas de Fe. Os resultados de suscetibilidade magnética AC mostram também essas transições, principalmente na componente de  $\chi_{AC}$  associada a perdas ( $\chi''$ ). Medidas em função do campo magnético DC em diversas temperaturas apresentam transições diamagnética-paramagnética, indicando a formação de outras fases magnéticas nestes materiais.

## DESENVOLVIMENTO, CARACTERIZAÇÃO E PROPRIEDADES DE MATERIAIS (Materiais Amorfos, Mono e Policristalinos)

Palestra Convidada – 11/06/97

### High Resolution Neutron Powder Diffraction at a Medium Flux Research Reactor

WILLIAM B. YELON

*University of Missouri Research Reactor*

Conventional neutron powder diffractometers achieve high resolution through the use of narrow Soller slit collimators before the monochromator, and between sample and detector. Intensity is enhanced through the use of multiple detectors. This solution is costly and limited. An alternative approach eliminates the Soller collimators and uses a bent perfect crystal monochromator, taking advantage of the correlations between angle and wavelength such a system provides. This, coupled with position sensitive detectors, leads to large increases in data acquisition rates for small samples, with no sacrifice in resolution, and is ideally suited to medium flux reactors. The system has been developed at the University of Missouri Research Reactor (MURR), a small source, and high quality data are collected in as little as 1-2 hours on small (1gm) samples. This presentation will compare the two methods and illustrate the world class scientific research programs in magnetic materials, superconductors and other areas which have developed because of the availability of such a resource. Implementation of this type of system at the IPEN in Sao Paulo would give (at modest cost) the possibility of carrying out state-of-the-art neutron diffraction research in Brazil. A collaboration between MURR and IPEN is proposed to provide the necessary technology.

## DESENVOLVIMENTO, CARACTERIZAÇÃO E PROPRIEDADES DE MATERIAIS (Materiais Amorfos, Mono e Policristalinos) – 11/06/97

### Aplicação do Modelo de Nucleação Adiabática em Vidros Metálicos e Calcogênicos

VICTOR DE BARROS BRASIL, ERICH MEYER

*Universidade Federal do Rio de Janeiro*

O Modelo de Nucleação Adiabática (MNA) tem sido aplicado com sucesso em metais líquidos puros, polímeros, vidros óxidos, vidros calcogênicos, vidros metálicos e vidros derivados de gels. Neste trabalho os resultados para vidros metálicos e calcogênicos são revistos. Todos os vidros calcogênicos mostram uma temperatura de transição vítrea ( $T_g$ ) acima do limite de estabilidade, indicado pelo MNA. Assim deve ser, porque de outra maneira, quando resfriados, estes vidros (líquidos super-resfriados) cristalizar-se-iam por meio de nucleação generalizada próximo do limite de estabilidade e  $T_g$  não poderia ser observada. Ainda podemos deduzir que cerâmicas, que não formam vidros, têm uma (normalmente desconhecida)  $T_g$  que está abaixo do limite de estabilidade. Isto explica porque estes materiais cristalizam-se acima ou no limite de estabilidade. Os vidros metálicos revelam um comportamento similar,

entretanto em média, a  $T_g$  normal (de baixa velocidade de resfriamento), está pouco acima, próxima do limite de estabilidade e em alguns casos ligeiramente abaixo. Isto mostra que os vidros metálicos, em média, são menos estáveis estruturalmente e com algumas exceções, têm que ser obtidos por intermédio de técnicas de resfriamento rápido. Sabe-se que  $T_g$  é uma função crescente da velocidade de resfriamento. Contudo podemos ainda sugerir que mais vidros calcogênicos sejam encontrados, empregando-se também técnicas de resfriamento rápido.

### A KINETIC STUDY OF THE WATER QUANTITY ON THE SOLVENTLESS TEOS HYDROLYSIS UNDER ULTRASOUND STIMULATION

DARIO ANTONIO DONATTI, DIMAS ROBERTO VOLLET

*UNESP/IGCE - Depto. de Física - Campus de Rio Claro*

The acid hydrolysis under ultrasound stimulation of solventless tetraethoxysilane (TEOS)-water mixtures was studied at 40°C, by means of a heat flux calorimetric method, as a function of the initial water/TEOS molar ratio ( $r$ ) ranging from 2 to 10. The method is based on the time record of the exothermic heat peak of hydrolysis, arising after an induction time under ultrasound stimulation, which is a measure of the reaction rate. The hydrolyzed quantity was found to be approximately independent of the water/TEOS molar ratio, even for  $r < 4$ . Polycondensation reaction should be taking

place in order to supply water to allow almost complete hydrolysis for  $r < 4$ . The overall process has reasonable been described by a previous dissolution and reaction modeling. The dissolution rate constants associated to the ultrasound ( $k_o$ ) and the alcohol producing dissolution ( $k_d$ ) have been obtained as a function of  $r$  by fitting the modeling under the condition of constant value for the hydrolysis rate constant ( $k_H$ ).  $k_o$  increases with  $r$  which can be explained by postulating that ultrasound provokes a major number of subdivisions in the water phase as the water quantity is increased. The product  $rk_d$  was found to be approximately a constant value which means that  $rk_d$  behaves as a pseudo-order rate constant. The alcohol producing dissolution process is rather dependent of the alcohol yielded in the hydrolysis reaction instead of the initial water quantity present in the mixture.

#### Photoacoustic Spectroscopy of Zeolitic Materials Doped with Mn and Cu.

DANIEL DE MIRANDA SILVEIRA, EDSON CÔRREA DA SILVA

*Instituto de Física Gleb Wataghin - Unicamp*

JOSÉ MARTÍN YÁÑEZ-LIMÓN

*Cinvestav-Qro. del IPN, México*

HELOISE OLIVEIRA PASTORE

*Instituto de Química - Unicamp*

In this work we characterize Cu and Mn substituted zeolites by photoacoustic spectroscopy. These systems can be used either as catalytic in the decomposition of nitrogenium oxides with excess of oxygen (Cu) or as molecular sieves, with geometric selectivity in organic reactions (Mn). Their preparation involves several factors that affect the structure of the zeolite and so its final properties, among them are the TPA (concentration of Tetrapropylammonium), the ion concentration and the pH. The absorption spectra show that the TPA increase enlarges the uv band (around 250-300 nm), in samples doped with Mn or Cu. The spectra of Mn-doped systems are enlarged for higher ion concentration samples (8 ions/unit cell), but in this case the bands get mixed and their visual resolution is lost. We observed in all samples a band centered around 525 nm which is characteristic of the  $Mn^{3+}$ .

In the case of Cu substituted samples, two bands can be observed, at 250 and 720 nm. These band characteristics (intensity, width) are strongly dependent on the preparation conditions. The effect of the TPA is directly related with an increase of the uv band, while the pH affects the band centered around 720 nm: for pH values lower than 10, this band is almost completely attenuated. Nevertheless the plot of the intensity ratio of these two bands ( $I_{250}/I_{750}$ ) as a function of the Cu-ion molar fraction shows a decreasing trend, in opposition to the increasing trend observed in the behavior of the ratio of the diffraction intensities at  $2\theta = 23^\circ$  and  $24^\circ$

( $I_{23}/I_{24}$ ). This behavior suggests that increasing Cu-ion concentration results in a structure with a more pronounced peak at  $23^\circ$  and with a stronger absorption at 750 nm. EPR measurements are being carried out to obtain further information on the ion status.

#### PHOTOACOUSTIC AND STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF SOL-GEL GLASSES DOPED WITH Cu and Fe

JOSÉ MARTÍN YÁÑEZ-LIMÓN

*Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas, Brasil and CINVESTAV- Qro. del IPN México.*

FRANCISCO PÉREZ ROBLEZ, YURI VOROVIEV, JESÚS GONZÁLEZ-HERNÁNDEZ

*CINVESTAV- Qro. del IPN México.*

EDSON . CORREA . DA SILVA

*Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas, Brasil*

In this work are studied by photoacoustic spectroscopy and X-ray diffraction, glasses prepared by the sol-gel method doped with Cu and Fe. These method can be used for coating substrates and as coloring method. The doped process is made adding nitrates of the corresponding ion metals during gelation of the system. For the characterization of the system, the gelation product is thermally treated in air conditions at temperatures from 100 to 600 °C, for two metal-ion concentrations 10 and 30 % wt. The photoacoustic absorption spectrums, show a pronounced evolution in the position and form of the bands for the samples treated among 100 and 300 °C, above this temperature the evolution is more slow. For Fe doped samples treated at 100 °C, show the characteristic band of  $Fe^{3+}$  associated with the transition  ${}^6\Gamma_1 - - - {}^4\Gamma_5$  in an octahedral environment, for highest temperatures the aparition of oxides compounds modify drastically the form and position of the band around 400 nm. In the case of Cu are present two bands, a band centered about 750 nm don't show appreciable changes, this is associated with  $Cu^{2+}$  in an octahedral environment corresponding to the transition  ${}^2E_g - - - {}^2T_g$ . The other band centered about 400 nm show a strong evolution with the thermal treatment. The X-ray diffraction spectrums show the presence of nitrates in samples doped with Cu and treated thermally at 100°C, for T=300 °C, they show the presence of oxides and the nitrates dissappear in both Fe and Cu cases. In accordance with the Mie scattering theory the bands for smallest wavelengths has a strong absorption contribution due to the formation of oxides particles. Additionally EPR measurements are being carried out to obtain further information about the ion conditions.

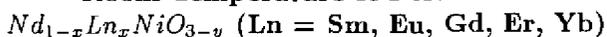
**MAGNETORESISTÊNCIA GIGANTE EM**CARLOS HENRIQUE COHENCA, RENATO DE  
FIGUEIREDO JARDIM*Instituto de Física, Universidade de São Paulo, C.P.  
66318, CEP 05315-970*

ALEX H. LACERDA

*National High Magnetic Field Laboratory, Pulse Facility,  
Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM 87545,  
USA*

Amostras policristalinas de  $Pr_{1-x}Ba_xMnO_3$ ; ( $0.0 \leq x \leq 0.5$ ) foram produzidas a partir de dois procedimentos diferentes de preparação: (1) mistura do óxido de Pr e carbonatos de Mn e Ba (MO); e (2) através de precursores sol-gel (SG). Estas foram tratadas ao ar, em diversas temperaturas e caracterizadas por medidas de difração de raios-X, metalografia óptica, resistividade elétrica como função da temperatura  $\rho(T)$  e magnetoresistência  $R(T,H)$ . Resultados de difração de raios-X revelaram que todas as amostras apresentam estrutura do tipo perovskita e uma fase adicional rica em Ba nas amostras MO. A análise metalográfica confirmou este último resultado e mostrou uma topologia uniforme e tamanho médio de grãos  $< 1\mu m$  na amostra SG. Medidas de  $\rho(T)$  revelaram que a magnitude de  $\rho$  cresce com o decréscimo da temperatura até atingir dois valores máximos,  $T_{c1}$  e  $T_{c2}$ , ( $T_{c1} > T_{c2}$ ). O máximo de  $\rho(T)$  em  $T_{c1}$  possivelmente está relacionado com uma transição estrutural do sistema enquanto  $T_{c2}$  é a temperatura onde ocorre ordenamento do tipo ferromagnético. Acima de  $T_{c1}$ ,  $\rho(T)$  possui comportamento semicondutor com  $\Delta E \sim 0.14$  eV. Abaixo de  $T_{c2}$ ,  $\rho$  decresce com o decréscimo da temperatura. Medidas de  $R(T,H)$  ( $0 \leq H \leq 18$  T) mostraram que  $T_{c2}$  desloca-se para temperaturas mais altas com o aumento do campo. Foi também observado que  $R(T,H)$  cresce com  $\sim H^2$  nas vizinhanças da temperatura  $T_{c2}$ . Estas medidas mostraram efeitos de magnetoresistência gigante de até  $\sim 2000$  % para campos de 18 T.

Trabalho financiado pela FAPESP (Processo No. 96/08416-4), CNPQ (Processo No. 304647/90-0), NSF (USA) e DOE (USA).

**Tuning of Metal-Insulator Transition Close To Room Temperature of Perovskites**MÁRCIA T. ESCOTE, RENATO F. JARDIM  
*Instituto de Física, Universidade de São Paulo*

We report on synthesis and general physical properties of the solid solutions  $Nd_{1-x}Ln_xNiO_3$  ( $Ln = Sm, Eu, Gd, Er, Yb$ ). All the samples were prepared through a sol-gel precursor and they were subjected to heat treatments at high temperatures  $T \leq 800$  °C and under oxygen pressures as high as 50 atm. From the results of x-ray powder diffraction, we have found that studied the crystallize in the  $GdFeO_3$ -type orthorhombica-

lly distorted perovskite structure (Pbnm space group). Structural analysis of  $Nd_{1-x}Sm_xNiO_3$  ( $0 \leq x \leq 1$ ) compounds revealed that all samples either tolerance factor ( $t$ ) and the Ni-O-Ni bond angle decrease with increasing Sm content. The latter is correlated with temperature in which the Metal-insulator MI transition develops in these compounds. Characterization of these materials through measurements of electrical resistivity revealed that all samples display the MI transition in a large range of temperature ( $200K \leq T \leq 450K$ ). These results have enabled us to mapped out the MI transition as a function of either the composition and the average ionic radius of  $Nd_{1-x}Ln_x$  in these series. We also found that it is possible to tune the temperature where the MI transition occurs from 200 K to 400 K and have produced several samples with  $T_{MI}$  close to room temperature  $\sim 300$  K. For these samples we have estimated the Ni-O-Ni bond angle  $\Theta$  to be between  $\sim 152^\circ$  and  $154^\circ$  and the tolerance factor  $0.960 \leq t \leq 0.963$ . Finally, we argue that these compounds are very promising for manufacturing pressure sensors to be used at room temperature.

**ESTUDO DE VIDROS DOPADOS COM TELÚRIO E COBRE**L. R. P. KASSAB, E. S. FERREIRA, E. KOWATA, P.  
J. B. MARCOS, P. G. OLIVEIRA, S. H. TATUMI  
*Faculdade de Tecnologia de São Paulo - UNESP*  
S. WATANABE*Instituto de Física da USP*

Foram produzidas amostras de vidro à base de Boro, Lítio e Chumbo dopadas com Telúrio e Cobre. Tais amostras foram elaboradas a  $1000^\circ C$ , em um forno projetado e construído na FATEC-SP. Através das medidas de absorção óptica ( Espectrômetro Carl Zeiss DMR 21), determinamos os intervalos de transmissão na região espectral situada desde o ultravioleta (UV) até o infravermelho (IR). O maior intervalo de transmissão no IR próximo obtido a partir de 880nm ocorreu para a amostra dopada com Telúrio e Cobre em iguais concentrações. Para a região do visível, observamos transmissão máxima de 67% para o pico situado em 420nm e a largura correspondente a meia altura de aproximadamente 200nm. Com a concentração de Telúrio duplicada notamos redução do intervalo de transmissão no IR próximo, que iniciou-se em 1060nm. Isto ocorreu devido à concentração de  $Cu^{2+}$  observada através das medidas de Ressonância Paramagnética Eletrônica ( Espectrômetro Bruker ), onde o campo magnético externo foi variado de  $10^{-1}T$  a  $7.10^{-1}$  T. Notamos também redução da transmissão máxima no visível para 46% para o pico situado em 430nm e largura correspondente a meia altura de aproximadamente 90nm. As amostras dopadas somente com Cobre apresentaram atenuação do intervalo de transmissão no IR próximo, quando

comparadas com as anteriores. Tal atenuação dependeu da concentração de Cobre utilizada. O mesmo verificamos para a transmissão na região do visível pois, quando a concentração de Cobre foi duplicada a referida transmissão foi reduzida em 25%.

(Projeto financiado pela FAPESP)

### THERMOLUMINESCENCE AND OPTICAL ABSORPTION STUDIES ON ARAGONITES AND CALCITES FROM SPAIN AND BRAZIL\*

DEBASHISH SENGUPTA

*Institute of Physics, University of São Paulo and Indian Institute of Technology, Kharagpur, India*

SONIA H. TATUMI, JUAN CARLOS R. MITTANI,

SHIGUEO WATANABE, MASAO MATSUOKA

*Institute of Physics, University of São Paulo*

Carbonate rocks form about 25% of the earth's stratigraphy, contain about 50% of the world's oil, act as host rocks for important mineral deposits and has other commercial uses. Detail studies specially to obtain a reliable geochronology is of immense economic and academic significance. Thermoluminescence (TL) dating has proved to be advantageous in this regard mainly for dating of Quaternary carbonate deposits associated with common sedimentary rocks, fossil deposits and stalactite and stalagmite deposits from caves. Aragonites and calcites are the most common and widespread minerals associated with such deposits. It has been observed that aragonite transforms into calcite when heated at about 400°C at atmospheric pressure. We have carried out detailed studies on aragonites and calcites from geological deposits in Spain and Brazil to understand their TL emission and optical absorption properties. The results obtained indicate that the presence of impurities like Mn and Pb act as activators for TL emission. Optical absorption studies indicate that the naturally occurring samples exhibit a different behaviour as compared to those associated with fossil deposits subsequent to gamma irradiations. The absorbance in the latter changes quite drastically at wave numbers beyond  $25 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$ . The aragonites and calcites exhibit intermediate or second order kinetics and are not suitable for dating beyond the Quaternary. In general calcites are found to more suitable for dating as compared to aragonites though they may not always provide the primary crystallisation. The results obtained from the present study along with the feasibility of dating the fossil deposits from Araripe Hills, state of Ceara in northeastern Brazil will be presented, and their implications discussed.

\* Work Supported by FAPESP

### Estudo da influência da temperatura nas propriedades não-lineares de cristais de LAP

A. N. NAKAGAITO, L. MISOGUTI, L. B. O. A. DE

MORAES, A. C. HERNANDES, V. S. BAGNATO

*IFSC/USP*

Conversão de frequência é uma técnica importante e popular para estender a faixa de comprimentos de onda utilizáveis em lasers de laboratório. Apesar do considerável esforço nos últimos vinte anos, somente alguns materiais como  $\text{LiNbO}_3$ , KDP e seus isomorfos,  $\text{LiIO}_3$ , e mais recentemente KTP, borato de bário e uréia são comumente disponíveis. Cada um deles tem certas utilidades em particular mas todos apresentam limitações em propriedades não-lineares ou de "phase-matching". Apesar de sua modesta não-linearidade, membros do grupo do KDP são os mais usados para conversão de frequência devido ao baixo custo e relativa facilidade com que materiais opticamente homogêneos de grande volume podem ser crescidos. Certos cristais orgânicos apresentam propriedades não-lineares e em adição ao grupo acima, a L-arginina fosfatada mostra-se bastante promissor. Facilmente crescidos a partir de solução aquosa, podem substituir o KDP onde se mostram mais eficientes na maioria da faixa de frequência utilizável. Possuem alto limiar de dano, ótima qualidade óptica além de serem menos higroscópicos que o KDP. Estudos preliminares em algumas propriedades ópticas do material demonstraram que para temperaturas tão baixas quanto 40 C, ocorre mudança no cristal fazendo com que sua superfície perca propriedades não-lineares. Torna-se muito importante um estudo sistemático no sentido de se buscar maneiras de inibi-lo para que seja possível a confecção de dispositivos a partir deste material. Medidas de refletividade na superfície mostraram que ocorre a redução da anisotropia em função do aumento de temperatura. Análises adicionais estão sendo realizadas para se determinar a natureza destas mudanças.

### A NEW AND SUITABLE FABRICATION TECHNIQUE FOR LARGE SCALE MELTING OF CHALCOGENIDES GLASSES WITH NEGLIGIBLE OH AND SH CONTAMINATION

J. A. MEDEIROS NETO, N. ARANHA

*Instituto de Física Gleb Wataghin-DEQ-UNICAMP*

The optical properties of praseodymium-doped low-phono energy glasses have recently attracted considerable attention for their potential application as a 1.3-micron  $\text{Pr}^{+3}$ -doped optical amplifier. Chalcogenides glasses based on Ga:La:S are amongst the lowest phonon energy glass which are suitable for this application, with quantum efficiencies exceeding 50%. The conventional way of melting chalcogenides glasses is by batching the stoichiometric glass composition in a graphite crucible

placed inside a fused silica tube, which is sealed after evacuating to a pressure of about  $10^{-5}$  torr and heated to a temperature between 1100 C to 1200 C. For  $70Ga_2S_3-30La_2S_3$  system, the highest stability temperature of the molten is limited at 1000 C because a partial reaction of the sulphide and any oxide inside the ampoule causes the evolution of sulphur dioxide and causes the sealed ampoule to explode. In this work we present a new fabrication technique to melting these glasses making use of a horizontal tube furnace with silica liner. Melting is done under flowing argon condition and to avoid any loss of sulfur during the melting a graphite crucible containing pure sulphur was inserted away from the melting zone and kept at temperature sufficiently low to create a vapor which is carried across to the melting zone by the argon flow. This technique showed extremely efficient to reduction of all hydrogen impurities and glasses with high optical quality was obtained

#### SINGLE CRYSTAL FIBER GROWTH OF $SrTiO_3:V$ USING THE LASER-HEATED PEDESTAL GROWTH METHOD

D. REYES ARDILA, J. P. ANDREETA  
Universidade de São Paulo - São Carlos

In spite of the fact that in the last few years have appeared a number of works on the properties of reduced and doped strontium titanate, the effect of the different dopants on the properties of the strontium titanate crystal have by no means fully completed.  $SrTi_{1-x}V_xO_3$ ,  $X \leq 0.02$ , is one example where vanadium should be an ideal dopant for preparing semiconducting strontium titanate and form a new material to study several physical properties in it. Low quantities of vanadium in strontium titanate ceramics enhance its conductivity in samples with the highest density and larger grains, according to a recent study, while the effect of high quantities of the same dopant in the same material has not been studied yet, both in ceramics as single crystal. Bulk strontium titanate single crystal is conventionally prepared by the Verneuil technique and obtained with oxygen deficiency and a great quantity of crystalline defects. Other bulk single crystal methods have no considerably minimized this undesirable quality. Pure and stoichiometric strontium titanate single crystal fibers can be prepared by the laser-heated (LHPG) pedestal growth method, one that is containerless and permits fast growth rates, following a special ceramic processing route. The preparation of single crystal fibers is interesting because its format is very adequated in telecommunications technology when a material has special physical properties. In this report, first experiments of single crystal fiber preparation using the laser-heated pedestal growth (LHPG) method to obtain and study  $SrTiO_3:V$ , with low levels of vanadium doping, are described and discussed.

#### Estudo Estrutural de Vidros Fosfato Semicondutores

DRÁULIO BARROS DE ARAÚJO, REGINALDO SOUZA DE FIGUEIREDO, MIGUEL ANTÔNIO BORGES DE ARAÚJO  
UFCE

Vidros óxidos com elementos de transição em mais de dois estados de oxidação apresentam comportamento semicondutor. As propriedades destes materiais dependem da composição química e das estruturas locais dos íons. Nestes vidros, os íons formadores de rede (NWF) estão ligados covalentemente aos oxigênios, enquanto que íons deformadores de rede (NWM) estão ionicamente ligados aos oxigênios em sítios intersticiais. Devido a grande multiplicidade de estados estruturais, a estrutura local em torno dos íons é assunto controverso. Aqui são estudados vidros fosfatos com fórmula química dada por:  $xFe_2O_3 - (0.4 - x)MnO_2 - 0.6P_2O_5$  onde  $x$  varia entre 0 e 0.4. A estrutura local dos íons de  $Fe$  e seus estados de oxidação são determinados através das espectroscopias Mössbauer e Infravermelho. Os parâmetros Mössbauer de deslocamento Isomérico ( $\delta$ ) e desdobramento quadrupolar ( $\Delta$ ) indicam que o  $Fe$  apresenta-se como íons férricos ( $Fe^{+3}$ ) e ferrosos ( $Fe^{+2}$ ). As distribuições de interação quadrupolar (Desdobramento Quadrupolar) são bastante largas indicando um alto grau de não uniformidade dos sítios de  $Fe$ , notadamente do íon ferroso. Observa-se também através dos espectros Mössbauer que a presença dos íons de  $Mn$  não altera o comportamento estrutural do  $Fe$ . Através da variação do deslocamento isomérico com a temperatura (efeito Doppler de segunda ordem), determina-se o valor da temperatura de Debye ( $\Theta_D$ ) para ambos  $Fe^{+3}$  e  $Fe^{+2}$  com o objetivo de inferir sobre suas estruturas locais, visto que íons NWF e NWM possuem constantes de força intramolecular e intermolecular diferentes, conseqüentemente diferentes  $\Theta_D$ . Os valores obtidos para os parâmetros Mössbauer, deslocamento isomérico e desdobramento quadrupolar, e ainda os valores de  $\Theta_D$ , indicam que ambos os íons ferrosos e férricos ocupam sítios de simetria média octaédrica, isto é, deformadores de rede. Estes resultados são confirmados pela espectroscopia infravermelho

#### STUDY OF PRECARBONIZATION PROCESS OF GLASSY POLYMERIC CARBON

MARCELLO GONÇALVES RODRIGUES, ROBERT LEE ZIMMERMAN  
F.F.C.L.R.P. - USP

Glassy Polymeric Carbon (GCP) is been studied as biomaterial for dual purpose, prosthesis and drug delivery capsule, due to its mechanical properties and excellent biocompatibility. Studies on the possibility of sequestering drugs like Li, used in nervous disturbing, are been

carried out and compatibility test done did not present rejection or infection. One obtain GPC by heating of liquid resol (C6H8O2) to 2800C in inert gas, before of an early precarbonization to 300C which converts this liquid resol into a fully cured phenolic resin (C7H6O). At heating temperature treatment (HTT) between 500 and 575C, the material presents conductivity and for around HTT 700C is porous (density 1.4) and permeable, with hardness approaching that of diamond. Increasing the temperature up to 2800C its porous became closed do not presenting links, then the GCP retains its mechanical and electrical properties and its permeability, became it completely impermeable. The precarbonization process and its products are been characterized and studied by measurements of hardness and loss of mass, both in function of HTT and the slope of heating. The increasing of paramagnetic centers in function of HTT, observed in EPR analysis, points to a relationship between the loss of mass (hydrogen) and the HTT of the process. Annealing techniques in the precarbonization process are been tested to determinate the best time of curing to produce samples without disruption caused by loss of mass, important factor to production of accuracy wares. (1) G. M. Jenkins, D. Ila and H. Maleki, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, Vol. 394 (181), 1995; (2) G. M. Jenkins and K. Kawamura, *Polymeric Carbon*, Cambridge University Press, 1976.

### PROPRIEDADES TERMOMECÂNICAS E ESTRUTURAIS DE GERMÂNIO AMORFO HIDROGENADO

MAURÍCIO MORAIS DE LIMA JR, FRANCISCO DAS CHAGAS MARQUES

*Unicamp - Instituto de Física - Departamento de Física Aplicada*

O germânio amorfo hidrogenado (a-Ge:H) é um material com grande potencial para utilização em dispositivos eletrônicos tais como células solares. Isto se deve ao fato de possuir uma banda proibida de 1.1eV o que o torna um ótimo candidato a fazer ligas com o a-Si:H que possui um gap de 1.7eV e com isto obter um material com banda proibida intermediária, o que possibilitaria um melhor aproveitamento do espectro solar. Na fabricação de dispositivos é importante o conhecimento das propriedades mecânicas do material a ser utilizado uma vez que um bom casamento entre estes parâmetros e os do substrato é essencial. Neste trabalho estudamos o coeficiente de dilatação térmica, "stirring modulus" (módulo de "Young" sobre 1 - a razão de Poisson) e "stress". Para o cálculo destes parâmetros desenvolvemos um sistema capaz de medir a curvatura de amostras com pequenos raios de curvatura (+ de 50m) em função da temperatura. Este sistema consiste basicamente da medidada deflexão de dois feixes de laser de HeNe que incidem sobre a amostra que se encontra dentro de um forno. Como o sistema é automatizado

obtemos uma curva contínua da curvatura em função da temperatura. A partir desta informação obtemos o "stirring modulus" e coeficiente de dilatação térmica. Fizemos um estudo destas propriedades em função do conteúdo de hidrogênio no a-Ge:H. Como resultados obtivemos uma dependência do "stress" com a concentração de hidrogênio ligado ao Ge, quanto maior a concentração de hidrogênio ligado, maior o "stress" do tipo compressivo. Além disto encontramos para o "stirring modulus" valores inferiores aqueles reportados para o germânio cristalino e o coeficiente de dilatação térmica, superior. Isto se deve a maior desordem da estrutura amorfa e varia com a com a concentração de hidrogênio. (Apoio: FAPESP, CNPq e PADCT)

### ESTUDO POR XPS E ESPALHAMENTO RAMAN DE VIDROS DO SISTEMA

TeO<sub>2</sub>-Li<sub>2</sub>O-TiO<sub>2</sub>

R. F. CUEVAS, S. C. DE CASTRO, C. L. CESAR, L.

C. BARBOSA

IFGW/UNICAMP

O. L. ALVES

IQ/UNICAMP

Vidros do sistema (90-x)TeO<sub>2</sub>-xLiO<sub>2</sub>-10TiO<sub>2</sub> com x=5,15 e 25 mol % foram preparados pelo método de fusão em cadinho de alumina em forno de resistência Super Kanthal á temperatura 900 ° C durante 30 minutos com posterior recozimento á temperatura de 380 ° C durante 2 horas, a seguir os vidros sofreram processo de corte, polimento e moagem na forma de pó para as caracterizações. Nestes vidros realizaram-se medidas por XPS (X-Ray Photoelectron Spectroscopy) e medidas de Espalhamento Raman. Para o caso específico das medidas de XPS, foram medidas as linhas O1s, Ti 2p, Te 4d e estimadas as razões atômicas Te/Ti, O/Te. Por causa da sobreposição com a intensa linha do Te 4d, não foi observado sinal do Li. A razão Te/Ti, porém reflete a mudança na composição dos vidros. A linha do O1s, para todas as amostras medidas é complexa, apresentando um ombro na região de maior energia de ligação. Contudo, contrariamente ao que se observa para vidros silicatos[1], não há uma dependência com a concentração de Li. A evidência encontrada neste trabalho é que esse ombro esteja associado a hidróxidos contaminantes, como reportado na literatura recente sobre vidros teluretos[2]. Não parece existir, como no caso dos vidros silicatos a separação entre oxigênio ligado e não ligado. Das medidas de espalhamento Raman encontrou-se que, quando os íons de Li penetram na rede vítrea, estes quebram as bipirâmides trigonais do tipo TeO<sub>4</sub> em pirâmides trigonais do tipo TeO<sub>3</sub>, conforme aumenta a concentração destes íons modificadores de rede sem produzir oxigênios não ligados. Portanto, diferente de seus congêneres vidros silicatos, vidros teluretos dopados com íons alcalinos como Li, não apresentam oxigênios não ligados na rede vítrea.

[1] R. Bruckner, H. Chun and H. Goretzki, *Glastechn. Ber.* 51, 1-7 (1978).

[2] Y. Himei, T. Nanba and Y. Miura; *Proc. XVII International Congress on Glass*, Chinese Ceramic Society, vol 2, 250-255(1995).

FAPESP, CNPq, PADCT e Telebras

### ESTUDO DA FUNÇÃO DIELÉTRICA COMPLEXA E ESPECTROSCOPIA INFRAVERMELHO DE $LiNbO_3$ EM VIDROS E CERÂMICAS DE NIÓBIO

EMERSON FERREIRA DE ALMEIDA, JOSE AIRTON CAVALCANTE DE PAIVA, ANTONIO SERGIO BEZERRA SOMBRA

*Laboratorio de Optica nao Linear e Ciencia dos Materiais (LONLCM) Departamento de Fisica Universidade Federal do Ceara (UFC)*

Recentemente tem sido reportados na literatura muitos estudos de materiais amorfos contendo microcristais ferroeletricos como uma nova possibilidade de material optico nao-linear. Um destes candidatos e o  $LiNbO_3$ , que sendo um material ferroeletrico (temperatura de Curie em torno de  $1210^\circ C$ ) com alta eficiencia para geracao de segundo harmonico, tem sido usado largamente em dispositivos optoeletronicos como guias de onda planar, e dispositivos eletromecanicos SAW entre outras aplicacoes. O uso deste material em dispositivos ultrasonicos como ressoadores, em aplicacoes de filtros eletromecanicos, ou como transdutores em linhas de atraso ultrasonicas sao reportados na literatura. O procedimento de preparacao e o estudo das propriedades dieletricas, piezoeletricas e elasticas de vidros e ceramicas a base de Niobio sao desta forma de grande interesse. Neste trabalho vidros e ceramicas da serie  $[xNb_2O_5 (0.5-x)P_2O_5 0.5Li_2O]$  foram preparados e estudados utilizando-se espectroscopia infravermelho (EI) e metodos de espectroscopia de impedancia complexa. Microcristais de  $LiNbO_3$  foram observados nas amostras com alta dopagem de niobio. O estudo da funcao dieletrica complexa das ceramicas de  $LiNbO_3$  revelou um modo de ressonancia acustico, bastante largo, em torno de 3MHz. Esta ressonancia esta associada ao modo de espessura do nosso ressoador acustico de  $LiNbO_3$ . Alinhamento eletrico foi realizado a  $300^\circ C$  por 6 horas sob a aplicacao de um potencial de 1KV. Grandes mudancas foram observadas apos o alinhamento. O estudo das propriedades de ceramicas ferroeletricas se reveste de grande interesse em vistas a possiveis applicoes em dispositivos ultrasonicos como linhas de atraso e transdutores.

### VIDROS DE BORATO DOPADOS COM TELÚRIO E MANGANÊS

S. H. TATUMI, E. S. FERREIRA, E. KOWATA, P. J. B. MARCOS, G. P. ROCHA, L. R. P. KASSAB  
*Faculdade de Tecnologia de São Paulo - UNESP*  
S. WATANABE

*Instituto de Física da USP*

Confeccionamos amostras vítreas de Borato dopadas com Manganês e Telúrio. Estas amostras são produzidas a  $1000^\circ C$  e depois sofrem um tratamento térmico a uma temperatura de  $400^\circ C$  durante 24 horas. Não foi observada higroscopia nas amostras devido a matriz utilizada. Fizemos medidas de EPR (Espectrômetro Bruker), a temperatura ambiente, com o campo variando de  $10^{-1} T$  a  $7.10^{-1} T$  e constatamos a presença de um sinal significativo com valor-g = 2,0103 para a amostra com Manganês e Telúrio em diferentes concentrações. Os seis sinais decorrentes da interação hiperfina do íon  $Mn^{2+}$  não foram observados; concluímos assim que o Manganês usado como dopante nas amostras não está com a valência  $Mn^{2+}$ . O sinal com o valor-g acima mencionado não foi alterado quando a amostra foi dopada somente com Manganês, indicando que sua presença é necessária para o aparecimento do referido sinal. Vários centros paramagnéticos podem ocorrer em vidros ou cristais de Borato [1]. Os mais conhecidos são  $BO_3^{2-}$ ,  $O^-$ ,  $BOHC$ , o centro  $E'$ ,  $BEC$ ,  $B^{2+}$ , etc. O sinal encontrado através das medidas de EPR tem um valor-g próximo ao do centro  $BO_3^{2-}$  ( $g_1 = 2,0091$ ;  $g_2 = 2,128$  e  $g_3 = 2,0143$ ). O spin desemparelhado encontrado em uma arranjo triangular composto por três átomos de Oxigênio e um átomo de Boro de uma estrutura não cúbica é o responsável pelo centro  $BO_3^{2-}$ . As análises indicam que talvez a presença do Manganês facilite a quebra da estrutura cúbica encontrada em boratos. (Projeto financiado pela Fapesp)

[1] G. Vignaud et al, *Journal of Non-Crystalline Solids*, 86 (1986) 6-12

### EFEITOS DOS IONS $Ti^{3+}$ SOBRE AS PROPRIEDADES OPTICAS LINEARES E NÃO LINEARES DO SISTEMA VÍTREO $PbO-TiO_2-TeO_2$

P. G. PAGLIUSO, R. F. CUEVAS, C. L. CESAR, L. C. BARBOSA, G. E. BARBERIS  
*IFGW/UNICAMP*

Vidros do sistema  $PbO-TiO_2-TeO_2$  apresentam propriedades não lineares não ressonantes muito alta. O papel dos íons  $Ti^{3+}$  neste sistema vítreo é desconhecido até o presente momento. A influência dos íons  $Ti^{3+}$  e  $Pb^{2+}$  nas propriedades lineares e não lineares deste sistema vítreo foram medidas por Elipsometria, Espectroscopia Raman e EPR, respec composição  $(90-x)TeO_2-xPbO-10TiO_2$  com  $x=5, 10, 15, 20$  e  $25$  mol % foram sintetizados pelo método da fusão em cadinho de alumina de alta pureza á temperatura de  $900^\circ C$ , durante 20 minutos. A seguir o vidro na forma líquida foi vazado em molde

de aço inoxidável e levado para tratamento térmico de recozimento á 380° C durante 2 horas. Amostras na forma de pó foram produzidas pela técnica de moagem. Encontrou-se das medidas da Elipsometria que, tanto o índice de refração linear quanto o não linear medidos no comprimento de onda do laser He-Ne, apresentaram comportamento independente da concentração dos íons  $Pb^{2+}$  na matriz vítrea. Pela técnica EPR, encontrou-se que os íons de  $Ti^{3+}$  são os mais efetivos na transformação de  $PbO$  para  $PbO_2$  além do fato de que a concentração dos mesmos aumenta com o aumento de  $PbO$  na rede vítrea e que pela técnica de espalhamento Raman verificou-se que o  $PbO$  é o elemento que produz a transformação de fase estrutural do  $TeO_4$  (bipirâmide trigonal) para  $TeO_3$  (pirâmide trigonal) na estrutura da rede vítrea. Desta maneira, os índices de refração linear e não linear foram independentes da concentração de  $PbO$ . Esperava-se que os íons  $Pb^{2+}$  aumentassem sempre os valores dos índices de refração linear e não linear. Por sua vez a transformação de fase de óxido-redução, no computo final, tendem a homogenizar o aumento destas duas propriedades, produzindo vidros que apresentam sempre a mesmas propriedades ópticas lineares e não lineares, de grande importância no campo de dispositivos ópticos ativos para a óptica não linear. FAPESP, CNPq, PADCT e Telebras

#### CATALISADORES DE $V_2O_5/TiO_2$ OBTIDOS PELO PROCESSO SOL-GEL: PREPARAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO

CRISTIANE BARBIERI RODELLA, ROBERTO WEIDER ASSIS FRANCO, LUIS ANTONIO DE OLIVEIRA NUNES, CLAUDIO JOSÉ MAGON, JOSÉ PEDRO DONOSO GONZALES, ARIIVALDO DE OLIVEIRA

FLORENTINO

USP - São Carlos

MARGARIDA JURI SAEKI

UNESP - Bauru

Sistemas  $V_2O_5/TiO_2$  são catalisadores ativos para várias reações de oxidação. Dentre elas destacam-se as reações de oxidação seletiva de hidrocarbonetos leves para olefinas e de álcoois alifáticos para aldeídos. Estes catalisadores têm sido testados em reações para conversão de CO e  $NO_x$  dos produtos da combustão automotiva e industrial. A atividade catalítica e a seletividade destes sistemas dependem da quantidade das espécies  $V^{4+}$  e  $V^{5+}$  na superfície da titânia. Esta razão, por sua vez, depende do método de preparação e da interação fase ativa e suporte. Vários métodos de síntese tem sido propostos para a obtenção de sistemas  $V_2O_5/TiO_2$ . Embora sejam efetivos para a dispersão, as propriedades texturais ficam limitadas pelas características do suporte. Uma alternativa para

aumentar a extensão da região efetiva e modificar as propriedades do suporte seria a utilização do processo Sol-Gel. Sendo assim, no presente trabalho, utilizou-se o processo Sol-Gel, seguido de secagem convencional (xerogel) e em condições supercríticas (aerogel) para obtenção de catalisadores  $V_2O_5/TiO_2$ , com propriedades físico-químicas interessantes à catálise de oxidação. As características texturais foram determinadas por adsorção de  $N_2$  a 77K. A morfologia do material foi verificada por MEV. A estrutura foi analisada por DRX e a identificação dos grupos superficiais foi determinada por Infravermelho e RPE. Obteve-se sólidos com áreas superficiais de  $120\text{ m}^2\text{g}^{-1}$  e porosidade de até  $300\text{ cm}^3\text{g}^{-1}$  para os aerogéis. Três espécies de vanádio foram identificadas nos catalisadores: grupos superficiais vanadis monoméricos, grupos vanadatos poliméricos e cristaltos de  $V_2O_5$ . O suporte é formado por  $TiO_2$  nas formas anatásio e rutilo com predominância da primeira forma nos aerogéis. A análise de microscopia mostrou granulometria ligeiramente esférica e boa dispersão do vanádio sobre a titânia. Os espectros de RPE foram obtidos a 7, 77 e 297 K. São observadas linhas correspondentes ao vanádio ( $V^{4+}$ ) em radicais vanadis ( $VO^{2+}$ ) isolados e magneticamente interagentes. O primeiro grupo apresenta um conjunto de linhas devido a interação hiperfin vanadis. A intensidade desta linha aumenta linearmente com a concentração de vanádio, e também com a área superficial do catalisador xerogel.

#### DISCUSSÃO DA APLICABILIDADE EM VIDROS DE TRÊS MODELOS DE VISCOSIDADE

BILL JORGE DA COSTA

Instituto de Tecnologia do Paraná

BERNHARD JOACHIM MOKROSS

Universidade de São Paulo

YOUNÈS MESSADDEQ

Universidade Estadual de São Paulo

Os modelos de viscosidade que apresentaram maior sucesso para reproduzir os resultados experimentais são os de Vogel-Fulcher, Cohen-Grest e de Avramov. Os dois primeiros se resumem em adicionar correções ao modelo de Arrhenius, nem sempre possíveis de interpretação física adequada. Por outro lado, o modelo de Avramov, baseado na hipótese da existência de uma distribuição de probabilidade de encontrar uma barreira de energia de ativação apresenta resultados surpreendentemente exatos para uma grande variedade de vidros óxidos. Além do mais, sendo um modelo que permite interpretação física, torna-se de grande utilidade nos trabalhos que visam a otimização das propriedades destes materiais. Nosso objetivo é verificar a extensão da aplicabilidade deste modelo para vidros de fluore-

tos, particularmente os fluorozirconatos. Resultados preliminares indicam ótimo ajuste para a viscosidade a baixas temperaturas, sendo que para temperaturas elevadas existem algumas discrepâncias. Estes resultados são discutidos frente aos obtidos mediante o modelo de Cohen-Grest (que pode ser reduzido para o modelo de Vogel-Fulcher). Da interpretação física dos valores obtidos para as constantes da expressão de Avramov é possível concluir sobre as qualidades do vidro em estudo. Outra família de vidros para os quais a aplicabilidade do modelo de Avramov é de interesse dos vidros à base de fluoreto de índio, recentemente desenvolvidos.

#### Formation and Spectroscopic Properties of Low Silica Calcium Aluminate Glasses Doped with Neodymium Dioxide.

JURACÍ APARECIDO SAMPAIO, SÉRGIO GAMA  
*Instituto de Física Gleb Wataghin, DFESCM-GPCM,  
 UNICAMP-Universidade Estadual de Campinas*  
 MAURO LUCIANO BAESSO, ANTONIO CARLOS  
 BENTO

*Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá*

ACÁCIO APARECIDO ANDRADE, TOMAZ CATUNDA  
*Instituto de Física de São Carlos, Grupo de Espectroscopia  
 de Sólidos, USP-Universidade de São Paulo*

Low silica calcium aluminate glasses are transparent in the infrared (IR) spectral range up to 6  $\mu\text{m}$ . These glasses are interesting because of their excellent qualities, good chemical durability, high transformation temperatures, and because they can be obtained without using the traditional network former. The introduction of small amounts of silica and magnesium oxide (or barium oxide) in binary calcium aluminate glasses improves the glass formation without a significant loss in the

IR transmission. The addition of rare earth oxides to glasses induces structural changes, modifying their physical properties. These rare earth doped glasses are interesting for many optical applications, including active medium for glass lasers. It is desirable, therefore, to introduce large amounts of rare earth and investigate the changes in the glass structure and properties. The great limitations of working close to the limit of the phase diagram, as in the case of low silica calcium aluminate glasses, is that the introduction of a small amount of rare earth in the glass composition introduces devitrification and, therefore, significant changes in the glass properties. In this work low silica calcium aluminate glasses (41.5 wt.%  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , 47.4 wt.%  $\text{CaO}$ , 7 wt.%  $\text{SiO}_2$ , 4.1 wt.%  $\text{MgO}$ ) were prepared with different concentration of neodymium dioxide from 0.5 wt.% to 5 wt.% under vacuum melting conditions. They presented good optical quality with low level of scattering and no evidence of devitrification was observed. Since this glass composition stands close to the edge of the phase diagram, our interest is to investigate the glass formation and spectroscopic properties when neodymium concentration is increased. The glasses obtained were studied by X-ray diffraction, thermal analysis and UV-VIS and IR spectroscopy in order to determine their properties, namely, optical absorption coefficient, glass transition temperature and crystallization temperature. Furthermore, the refractive index results will be presented.

### Palestra Convidada – 11/06/97

#### HARD X-RAYS SYNCHROTRON RADIATION IMAGING: NEW FEATURES AND RESULTS

J. BARUCHEL

*European Synchrotron Radiation Facility - Grenoble - France*

Several hard X-rays imaging techniques greatly benefit from the improved possibilities associated with the characteristics (high intensity, small angular size of the source, high energy photons present in the beam) of third generation synchrotron radiation facilities. Examples recorded on the 'long' (145m) ID19 'imaging' beamline of the ESRF illustrate these features. The evolution with aging of bone microarchitecture was investigated, by computed microtomography. This allowed not only to obtain three dimensional images but also to extract histomorphometric parameters quantifying this structure in terms of shape and connectivity. The novel and promising field of phase contrast imaging results from the high lateral coherence length of the x-ray photons at the ESRF. This leads to the use of a very simple propagation technique to image objects with negligible absorption for hard x-rays but appreciable variations in optical path length. Examples are two or three-dimensional (tomographic) images of biological (plants, soft tissues,...) or artificial materials (crystals, alloys or ceramics with inclusions, holes, cracks,...). Diffraction topography allowed, through the short exposure times (fraction of a second) and/or the high spatial ('weak beam' technique) or angular (section topographs) resolution to investigate many topics in materials science. These include the characterization dislocations in Si layers of SIMOX samples, the nucleation of a magnetic phase at the

level of triple point, the magnetoacoustic effect investigation, the creation of defects in crystals under an electric field or the reversal of polarization in implanted ferroelectric materials. The combination of diffraction topography and phase contrast imaging produced a breakthrough in the understanding of the defects observed in quasicrystals, which can now be interpreted as a combination of holes, precipitates of approximant phases and phason and phonon strains within the quasicrystalline matrix.

---

## DESENVOLVIMENTO, CARACTERIZAÇÃO E PROPRIEDADES DE MATERIAIS (Filmes Espessos e Finos)

### DESENVOLVIMENTO, CARACTERIZAÇÃO E PROPRIEDADES DE MATERIAIS (Filmes Finos e Metais) – 11/06/97

#### FILME FINO DE $\text{CeO}_2\text{-TiO}_2$ OBTIDO VIA PROCESSO SOL-GEL, UTILIZANDO UMA MISTURA DE SOLVENTES

EDVALDO ALVES DE SOUZA JUNIOR, MARCELO ANDRADE MACÊDO  
UFS

O filme fino de  $\text{CeO}_2\text{-TiO}_2$  é um bom armazenador de íons ( $\text{H}^+$  ou  $\text{Li}^+$ ) devido ao fato de existirem na sua estrutura morfológica lacunas suficientemente grandes. A formação desta estrutura hospedeira depende fortemente da rota de preparação do filme fino, principalmente no que diz respeito ao solvente utilizado. Uma das rotas de preparação do filme fino  $\text{CeO}_2\text{-TiO}_2$  é a dissolução de um sal de cério e de um alcóxido de titânio num solvente orgânico. Neste trabalho foi utilizado uma mistura de solventes orgânicos, o isopropanol (I) e o etanol (E), numa razão volumétrica de  $E/I = 4$ . Esta mistura foi utilizada considerando os seguintes aspectos: o isopropanol agiu como um estabilizante do sol, pois a sua oxidação, devido a redução do cério, originou a formação de acetona e o etanol serviu para aumentar a concentração do sal de cério. Este sol permaneceu estável por mais de 2 meses e a concentração obtida foi de 0,2 M. Um vidro recoberto por um filme fino condutor eletrônico foi mergulhado neste sol numa velocidade de 10 cm/min, e em seguida, o filme fino crescido neste substrato foi seco a  $100^\circ\text{C}$  por 15 min e densificado a  $500^\circ\text{C}$  por 5 min. Este processo foi repetido até se obter filmes com espessuras que dessem uma boa resposta perante a inserção de íons. O filme fino foi caracterizado via técnica eletroquímica de voltametria cíclica, numa velocidade de varredura de 44 mV/s, num eletrólito contendo íons  $\text{Li}^+$ . Os resultados indicaram que o filme fino apresentou estabilidade acima de 1500 ciclos com uma carga inserida (CI) de  $14 \text{ mC/cm}^2$ . Estes resultados são considerados bons, mas a CI é ainda baixa, deste modo, serão feitos outros filmes finos a partir de sois com diferentes razões volumétricas de E/I, visando um aumento CI.

#### PROPRIEDADES ESTRUTURAIS DAS LIGAS DE $\alpha\text{-GeC}_x\text{:H}$

JOHNNY VILCARROMERO, FRANCISCO DAS CHAGAS MARQUES

*Instituto de Física, Gleb Wataghin Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP 13081-970, Campinas, SP, Brasil*

Recentemente, o desenvolvimento e estudo das ligas baseadas no germânio tem recebido mais atenção, principalmente após o sucesso obtido na otimização das propriedades opto-eletrônicas de filmes de  $\alpha\text{-Ge:H}$ . Com excessão das ligas de  $\alpha\text{-SiGe:H}$ , que tem recebido muita atenção, há pouco estudo sobre as outras ligas baseadas no germânio amorfo. Neste trabalho, apresentamos um estudo das propriedades estruturais de filmes finos de carbeto de germânio amorfo hidrogenado ( $\alpha\text{-GeC}_x\text{:H}$ ) preparados pela técnica de rf co-sputtering. Para a preparação deste filmes, usamos alvos compostos por um disco de grafite com pedaços de germânio colocados sobre ele, para a obtenção de filmes com concentrações de carbono variando desde zero até altos teores. Os filmes foram preparados em atmosfera de argônio e hidrogênio. No estudo das propriedades estruturais foram utilizados a espectroscopia de transmissão no infravermelho, micro-raman, difração de raios X e espectroscopia de fotoelétrons (XPS). Os espectros de infravermelho mostram bandas de absorção na região de  $2800\text{-}3000 \text{ cm}^{-1}$ , de  $1200\text{-}1500 \text{ cm}^{-1}$  e de  $1800\text{-}2000 \text{ cm}^{-1}$  associados aos modos  $\text{C-H}_n$  stretching e bending e  $\text{Ge-H}$  stretching respectivamente. Na região de  $400\text{-}700 \text{ cm}^{-1}$  associadas ao  $\text{Ge-C}$  stretching  $\text{Ge-H}$  wagging. Com o objetivo de identificar os modos vibracionais associados às ligações com o hidrogênio, foram preparadas amostras com deutério no lugar do hidrogênio (efeito isotópico). Os espectros de micro-raman mostram bandas em 80 e  $280 \text{ cm}^{-1}$  associadas aos modos LO e TO-like do germânio, e um dubleto na faixa de 1200 e  $1700 \text{ cm}^{-1}$  associados aos modos D e G do carbono em estado grafítico. O espectros de XPS apresentam chemical shift da banda em 28 eV, associada ao orbital 3d do germânio, e em 280 eV associada ao orbital 1s do carbono, devido à incorporação de carbono.  
(Apoio : CNPq, FAPESP e PADCT)

#### SÍNTESE DE COMPOSTOS DAS FASES $\gamma$ E $\zeta$ DO SISTEMA $\text{Cd-Ag}$ POR MECHANICAL ALLOYING

JOÃO CARDOSO DE LIMA, DANIELA MENEGON TRICHÊS, VITOR HUGO FERREIRA DOS SANTOS, TARCISO ANTÔNIO GRANDI

*Universidade Federal de Santa Catarina*

Na década de 60, foi descoberto que Mechanical Alloying podia ser usada para dispersar partículas de óxidos em ligas a base de ferro e níquel para aumentar a dureza dessas ligas. Mais recentemente, foi descoberto que este método pode ser usado para sintetizar verdadeiras ligas partindo de uma mistura de pós dos elementos químicos. Embora um grande número de publicações tenham aparecido nos últimos anos sobre a amorfização de ligas na forma de pós por MA, um número muito pequeno de artigos têm lidado com a formação de compostos intermetálicos e número ainda menor com a síntese de soluções sólidas supersaturadas. Do ponto de vista energético, é bem conhecido que as temperaturas envolvidas no processo MA são relativamente baixas, o que reduz consideravelmente a cinética da reação produzindo materiais metaestáveis ou amorfos. Têm sido sugerido na literatura que as várias reações do estado sólido que ocorrem no processo MA estão relacionadas as altas densidades de defeitos que surgem durante a moagem, o que conseqüentemente deixa o produto final também com vários tipos de defeitos e tensões, o que causa distorções na rede cristalina dando medidas dos parâmetros de rede falsas, mesmo com a composição química correta. Nos artigos lidando com compostos intermetálicos, os vários pesquisadores têm calculados as propriedades cristalográficas, tais como tipo de célula unitária, parâmetros de rede, etc. e, comparado-os com dados existentes para os mesmos compostos fabricados em condições energeticamente estáveis. Neste trabalho, nós mostramos que a garantia para que esta comparação possa ser bem sucedida é uma relaxação térmica que deve ser feita no composto produzido por MA visando ter um composto energeticamente estável. As técnicas de difração de raios-x e de calorimetria diferencial de varredura foram usadas para seguir a formação da liga *Cd - Ag*. O método de Rietveld foi usado para refinar as estruturas cristalinas e simular os padrões de difração de raios-x das fases  $\gamma$  e  $\zeta$ .

#### ANÁLISE DOS ESTÁGIOS DE ENVELHECIMENTO NA LIGA Cu-5%Al COM ADIÇÕES DE PRATA

ANTONIO TALLARICO ADORNO, MARCO ROBERTO GUERREIRO

*Departamento de Físico-Química, Instituto de Química-UNESP, Araraquara-SP.*

A solubilidade do Al no Cu, até em torno de 8% em massa é completa, segundo o diagrama de equilíbrio, não sendo possível obter endurecimento por envelhecimento em ligas nesse intervalo de composições. Sabe-se que pequenas adições de prata à liga Cu-Al melhoram sua resistência à corrosão sob tensão, aumentam sua dureza e introduzem modificações em sua micro-estrutura e na cinética da decomposição eutetóide. Elas também interferem na resistividade elétrica e algumas inflexões nas curvas de resistividade elétrica com a temperatura

foram atribuídas à dissolução e coalescência de precipitados ricos em prata. Neste trabalho, medidas de variação da microdureza com a temperatura e o tempo de envelhecimento, obtidas em ligas de Cu-5%Al com adições de 2, 4, 6, 8 e 10% Ag em massa, indicaram que é possível obter endurecimento por envelhecimento nessas ligas e que são observados dois estágios nas curvas isotérmicas de variação da microdureza com o tempo de envelhecimento, um estágio inicial onde ocorre um aumento considerável da dureza e um segundo estágio, com uma queda na dureza para tempos de envelhecimento mais longos. O processo de envelhecimento foi acompanhado por microscopia eletrônica de varredura e análise por separação de energia de raios X (EDX), e os resultados obtidos indicaram que o primeiro estágio, de aumento da dureza, está relacionado com a precipitação de uma fase rica em prata nos contornos dos grãos da matriz, enquanto o estágio final de diminuição da dureza está relacionado a uma precipitação no interior dos grãos, que leva a uma segregação de Ag e Al.

#### EFEITOS DA DEFORMAÇÃO, TAXA DE DEFORMAÇÃO E TEMPO ENTRE PASSES NA TEMPERATURA DE NÃO RECRISTALIZAÇÃO DE UM AÇO MÉDIO CARBONO MICROLIGADO AO VANÁDIO.

REGINA CÉLIA DE SOUSA

*Universidade Federal do Maranhão*

OSCAR BALANCIN

*Universidade Federal de São Carlos*

O conhecimento do comportamento da temperatura de não recristalização,  $T_{nr}$ , isto é, a temperatura a partir da qual não ocorre mais a recristalização estática total entre passes, é de extrema importância para a montagem de programas de laminação ou forjamento controlado de aços microligados. Neste trabalho, estuda-se o comportamento da recristalização estática entre passes, durante deformações múltiplas sob resfriamento contínuo, através da determinação da  $T_{nr}$ . O material utilizado foi um aço médio carbono microligado ao vanádio. Tratamentos térmicos indicam que a completa solubilização das partículas de precipitados, presentes neste aço, ocorre em torno de 1150°C. Os ensaios mecânicos foram feitos utilizando-se várias combinações de deformação, taxa de deformação e tempo entre passes simulando seqüências de 20 passes. Sendo que a temperatura de encharque de 1150°C foi mantida constante em todos os ensaios. Plotando-se os valores da tensão média equivalente, TME, em função do inverso da temperatura absoluta de cada passe determina-se a  $T_{nr}$ . Os resultados indicam que a temperatura de não recristalização é sensível aos parâmetros de processamento. Para tempos entre passes menores que aproximadamente 30s o vanádio em solução é o responsável pelo retardamento da recristalização, enquanto que

para tempos maiores que 30s a precipitação de nitretos de vanádio é a responsável pela diminuição da extensão da recristalização. No intervalo de tempo onde o efeito de arraste de soluto retarda a recristalização, aumentando-se a deformação e a taxa de deformação a  $T_{nr}$  aumenta. Isso ocorre devido ao crescimento no volume de "clusters", o qual diminui a fração de átomos de vanádio em solução.

**Estudo das Oscilações de Corrente e Resistência do Eletrólito na Interface Metal/Solução Durante a Eletrodissolução de Metais.**

AUREA BEATRIZ C. GERALDO, OSCAR R. MATTOS  
*Laboratório de Corrosão "Prof. Manoel de Castro",  
PEMM/COPPE/UFRJ*

FRANÇOIS HUET, BERNARD TRIBOLLET  
*Laboratoire des Physique des Liquides et Electrochimie -  
UPR15-CNRS - Paris - França*

Nesse trabalho as oscilações de corrente que surgem no início do patamar de transporte de massa no sistema  $Fe/H_2SO_4$  1M em distintas viscosidades foram estudadas e seus resultados foram comparados com os do sistema  $Cu/H_2SO_4$  1M + xM  $Cl^-$ . As medidas foram obtidas a partir de uma célula eletroquímica clássica utilizando como eletrodo de trabalho um EDR em distintas velocidades de rotação. As oscilações de corrente foram registradas simultaneamente com as de re-

sistência do eletrólito a partir de técnica já estabelecida na literatura. Ambos tipos de flutuações apresentaram semelhantes evolução temporal e magnitude de frequência; a análise de seus PSD (power spectrum density), mostrou uma amplitude máxima, onde o valor da frequência correspondente aumentava com o aumento da rotação do eletrodo principalmente no caso do ferro, e um ramo descendente cuja inclinação pode estar relacionada a parâmetros de transporte de massa. Esses resultados, juntamente com a análise das curvas de polarização potencioestática em regime quasi-estacionário, sugerem que, além do processo de eletrodissolução, o fenômeno oscilatório é influenciado pelo transporte de massa, principalmente no caso do ferro. As medidas de resistência média do eletrólito ( $\bar{R}_e$ ) em função do potencial aplicado também foram obtidas durante as oscilações e mostraram resultados distintos em ambos sistemas. Esse fato pode estar relacionado com os distintos mecanismos de dissolução e natureza do filme formado na interface metal/eletrólito dos sistemas em questão. Nesse sentido, verifica-se que a morfologia do perfil da superfície do ferro apresenta formação de padrões morfológicos que se repetem em toda a área observada, o que não ocorre no caso do cobre, onde sua superfície apresenta um aspecto poroso durante todo o processo de dissolução.

## DESENVOLVIMENTO, CARACTERIZAÇÃO E PROPRIEDADES DE MATERIAIS (Propriedades: Ópticas e Elétricas)

### DESENVOLVIMENTO, CARACTERIZAÇÃO E PROPRIEDADES DE MATERIAIS (Propriedades: Ópticas e Elétricas/Defeitos) – 12/06/97

#### MECANISMOS DE DIFUSÃO NO $\text{BaLiF}_3$ DOPADO COM METAIS DIVALENTES

MÁRIO ERNESTO GIROLDO VALERIO, JOSÉ

FERNANDES DE LIMA

*Depto. de Física - UFS*

ROBERT A. JACKSON

*Chemical Department - University of Keele*

No presente trabalho estamos investigando, através de técnicas de simulação computacional, os possíveis mecanismos responsáveis pelo transporte iônico no  $\text{BaLiF}_3$  tanto na ausência quanto na presença de impurezas catiônicas divalentes. O  $\text{BaLiF}_3$  é uma fluorperovskita cúbica invertida com os cátions ocupando posições trocadas em relação as perovskitas normais. As simulações computacionais empregadas neste trabalho se baseiam na estratégia de Mott-Littleton incluída no programa GULP. Foram consideradas apenas interações entre pares de íons divididas em dois termos: o termo coulombiano de longo alcance e um termo associado as interações de curto alcance da forma de um potencial de Buckingham. Os parâmetros das interações de curto alcance foram obtidos em trabalhos anteriores[1]. Os mecanismos de migração considerados foram o mecanismo de vacância, o mecanismo intersticial e o mecanismo intersticiante para os íons Li e F apenas, tendo em vista que a subrede do Ba é bastante estável[1]. Para cada um dos mecanismos, calculamos as energias de ativação do processo através do seguinte procedimento: configuramos o sistema de forma que a posição dos íons envolvidos no mecanismo de migração reproduzisse a configuração de ponto-de-sela do processo; esta configuração foi relaxada obtendo a energia do topo da barreira de potencial; esta energia, por sua vez, foi subtraída da configuração mais estável do defeito em questão obtendo assim a energia de ativação do mecanismo. Os resultados obtidos indicam que a principal contribuição à condutividade iônica deve advir da migração do  $\text{F}^-$  via mecanismo de vacância. Porém, com a criação de  $\text{Li}^+$  intersticiais por efeito termico ou por efeito de dopagem, a contribuição do  $\text{Li}^+$  deve crescer de importância tendo em vista a baixa energia de ativação obtida para o mecanismo intersticiante não-colinear do  $\text{Li}^+$ . (Apoio

CNPq)

[1] R A Jackson, M E G Valerio and J F de Lima, J. Phys.: Cond. Matter 8 (1996), 10931-7

### ESPALHAMENTO RAMAN POLARIZADO EM CRISTAIS DE L-TREONINA NO INTERVALO DE TEMPERATURA ENTRE 20 K E 300 K.

BENEDITO LOPES DA SILVA

*Fundação Universidade Federal de Rondônia*

PAULO DE TARSO CAVALCANTE FREIRE, JOSUÉ MENDES FILHO, ILDE GUEDES, MARCOS ANTONIO ARAÚJO SILVA, FRANCISCO ERIVAN DE ABREU MELO

*Universidade Federal do Ceará*

A l-treonina é um dos vinte aminoácidos fundamentais constituintes de todas as proteínas. No estado sólido ela se cristaliza no grupo espacial  $D_2^4$  na estrutura ortorrômbica com quatro moléculas por célula unitária. O interesse no seu estudo reside no fato de que materiais biológicos têm se revelado nos últimos anos ótimos materiais para serem usados em óptica não-linear. Neste trabalho apresentamos um estudo completo dos modos normais de vibração da l-treonina através de um estudo de espalhamento Raman polarizado com a temperatura para o intervalo de temperatura entre 20 K e 300 K. A análise dos espectros das quatro representações irredutíveis do grupo fator  $D_2$  baseada num estudo de teoria de grupos permitiu a completa identificação dos modos normais de vibração. Particularmente interessante é o resultado de que a estrutura é estável neste grande intervalo de temperatura, bem como o fato de que as moléculas se mantêm coesas em uma estrutura cristalina graças a formação de pontes de hidrogênio com o  $\text{NH}_3$ , o  $\text{CO}_2$  e o  $\text{SO}_3$ . Esta estabilidade pode ser comprovada pela análise dos espectros de baixas frequências. Para frequências menores do que  $300 \text{ cm}^{-1}$  observamos os modos externos da l-treonina, que são devidos às vibrações da rede. Por serem mais sensíveis à eventuais mudanças na estrutura cristalina do material quando há variação de algum parâmetro externo como a temperatura, uma minuciosa investigação desta região foi realizada. Observamos, porém, que há uma perfeita concordância no número de picos nas temperaturas de 20 K e 300 K, afora os picos bastante fracos que são vistos no espectro de baixa temperatura e que não são mais observados no espectro de alta temperatura. A observação dos espectros nas regiões entre  $300 \text{ cm}^{-1}$  e  $1500 \text{ cm}^{-1}$ , onde estão as vibrações do tipo deformação, e entre  $2800 \text{ cm}^{-1}$  e  $3300 \text{ cm}^{-1}$ , onde estão as vibrações do tipo estiramento do  $\text{NH}_3$ ,  $\text{CO}_2$ ,

etc, também não mostraram nenhuma mudança qualitativa.

### RELAXAÇÃO DIELÉTRICA E CONDUCTIVIDADE ELÉTRICA(AC/DC) DE VIDROS MOLIBDATOS

RINALDO E SILVA DE OLIVEIRA

UNIVERSIDADE ESTADUAL DO CEARÁ(UECE)

CESAR AUGUSTO CAMPOS

UNIVERSIDADE DE FORTALEZA (UNIFOR)

JOSE AIRTON CAVALCANTE DE PAIVA, MIGUEL

ANTONIO BORGES DE ARAUJO ANTONIO SERGIO

BEZERRA SOMBRA

LABORATORIO DE OPTICA NAO LINEAR E

CIENCIA DOS MATERIAIS (LONLCM)

DEPARTAMENTO DE FISICA UNIVERSIDADE

FEDERAL DO CEARÁ (UFC)

Vidros contendo ions rapidos tem sido investigados para aplicacoes em eletroquimica. Em dispositivos eletroquimicos como baterias do estado solido, os vidros podem ser usados de maneira bastante flexivel. Numerosos estudos foram realizados em vidros contendo litio, devido ao interesse em desenvolver baterias com alta densidade de energia. Como vidros fosfatos contendo litio se mostraram um sistema bastante promissor em conducao rapida, seria pois de grande interesse estudar a condutividade eletrica e propriedades estruturais destes vidros adicionando-se outro formador de vidro como o oxido de molibdenio. A proposta do presente trabalho e estudar o efeito do oxido de molibdenio nas propriedades estruturais do sistema. Informacoes sobre a estrutura do sistema sao importantes no entendimento de suas propriedades eletricas. Trabalhos reportados na literatura em vidros fosfatos de ferro, mostram que a condutividade DC e extremamente dependente da populacao relativa de FE(II) e FE(III) presente nas amostras. No presente trabalho estudamos a serie de vidros molibdenio-fosfatos  $0.4LLi_2O \times MoO_3 (0.6-x)P_2O_5$  y  $Fe_2O_3$  com x variando de 0 a 0.6 e y=0.03. Utilizamos diversas tecnicas no estudo das propriedades estruturais e de transporte dos vidros molibdatos. Os resultados da espectroscopia infravermelho (IR), indicam que nas amostras vitreas, os modos caracteristicos dos complexos de fosforo estao presentes. Com a introducao de  $MoO_3$  verificamos a provavel existencia de estruturas do tipo  $MoO_2$ . Verificamos tambem a formacao de  $Li_2MoO_4$ , fato confirmado, pela difracao de raios x (XR). Os resultados da espectroscopia Mossbauer (MS) revela que os ions FE(II) e FE(III) encontram-se em simetria media octaedrica. Nas medidas de condutividade observamos o aumento da condutividade DC e diminuicao da energia de ativacao com o aumento da concentracao de Molibdenio. A condutividade AC a temperatura ambiente e  $f=100kHz$  aumentou com a concentracao de Molibdenio. Nas medidas de condutividade AC com a frequencia, a temperatura constante nas amostras, ve-

rificamos que a condutividade AC cresce linearmente com a frequencia. Os resultados da condutividade AC como funcao de temperatura e frequencia foram estudados utilizando-se o modelo do duplo poco assimetrico. A utilizacao deste modelo teorico apresentou otima concordancia com os resultados experimentais.

### PROPRIEDADES ELETROFÍSICAS DO TRIÓXIDO DE TUNGSTÊNIO

ANTÔNIO GOMES DE SOUZA FILHO, VALDER

NOGUEIRA FREIRE

Universidade Federal do Ceará

JOSÉ FRANCISCO JULIÃO

Universidade de Fortaleza

UÍLAME UMBELINO GOMES

Universidade Federal do Rio Grande do Norte

O trióxido de Tungstênio ( $WO_3$ ) tem múltiplas aplicações tecnológicas. Na forma de filmes finos ele tem sido usado extensivamente em dispositivos eletrocromicos, conversão de energia solar e em sensores de gás. Estes filmes são obtidos por sol-gel, spray pirólise, evaporação térmica, rf sputtering, anodização, por exemplo. Em forma de cerâmica sinterizada, o  $WO_3$  vem despertando o interesse científico e tecnológico pela sua importância na fabricação de sensores de gás, para proteção ambiental, particularmente com o uso de dopantes, a exemplo de outros óxidos metálicos, tais como  $SnO_2$ ,  $TiO_2$  e  $Fe_2O_3$ . A influência da dose de raios- $\gamma$  e temperatura nas propriedades eletrofísicas da cerâmica ( $WO_3$ ) estável e meta-estável foi estudada por L. E. Soshnikov S. I. Urbanovich, e N. F. Kurolovichh [Phys. Solid State 37, (1995) 1674]. No entanto, estes autores descrevem o comportamento da constante dielétrica na temperatura ambiente apenas para a frequência de 1 Hz. Nosso interesse no estudo do  $WO_3$  sinterizado visa melhor compreender seu comportamento dielétrico e fotocatalítico para possíveis aplicações em capacitores cerâmicos e em fotocatalizadores para despoluição de águas residuárias. Apresentamos nesta comunicação resultados do trabalho de caracterização elétrica e microestrutural realizado em amostras de ( $WO_3$ ) sinterizado, obtidas a partir da calcinação ao ar do paratungstato de amônia  $(NH_4)[H_2W_{12}O_{42}]4H_2O$ . Uma série de pastilhas foi sinterizada ao ar em diferentes temperaturas, sendo que algumas amostras foram submetidas a uma posterior redução na presença de  $H_2$ . Todas as amostras foram caracterizadas por difração de raios-X e por medidas de impedância elétrica. Dos difratogramas de raios-X identificamos o  $WO_3$  em duas fases: monoclinica e triclinica. Obtemos que a constante dielétrica diminui à medida que a frequência do sinal utilizado aumenta, de forma semelhante ao  $TiO_2$ , resultado que está conforme a literatura. Após o processo de redução, quatro fases do tungstênio bronze são predominantes no material. As medidas de resistividade elétrica mostram que

essas novas fases contínuas leva o material a possuir propriedades semicondutoras.

Apoio: CNPq e FUNCAP

### Estudo da condutividade elétrica e da mobilidade dos íons flúor em $KY_3F_{10}$

A. P. AYALA, M. A. S. OLIVEIRA, R. L. MOREIRA  
 Depto. de Física, ICEX, UFMG, C.P. 702, 30161-970 Belo Horizonte (MG) Brasil

J. -Y. GESLAND

Université du Maine - Cristallogénese, 72017 - Le Mans  
 CEDEX - France

A condutividade iônica de materiais com estrutura fluorita (sistema protótipo:  $CaF_2$ ) tem sido amplamente estudada. Esta estrutura é caracterizada por uma alta mobilidade dos íons flúor devido à presença de defeitos de Frenkel a altas temperaturas. O  $KY_3F_{10}$  também tem esta estrutura ( $a = 11.525 \text{ \AA}$ ,  $Z = 8$ ), mas possui dois sítios para o flúor ( $F^1$  e  $F^2$ ) os quais são cristalograficamente não equivalentes. Além disso, as vacâncias de  $F^1$  e  $F^2$  são caracterizadas por entalpias de formação e migração distintas e portanto têm diferentes contribuições ao processo de condução. Medidas prévias de espectroscopia Raman e ressonância magnética nuclear (NMR) mostram discrepâncias nos valores das energias de ativação dos portadores de carga. A constante dielétrica e as condutividades elétricas ac e dc foram medidas em monocristais de  $KY_3F_{10}$ , em função da temperatura (de 100 a 700 K) e frequência (de 5 Hz a 13 MHz). Nesta faixa de temperaturas o composto não mostra transições de fase e a condutividade pode ser descrita como uma soma de processos termicamente ativados. Para cada um deles a energia de ativação é calculada e comparada com as de outras fluoritas e com os obtidos por outras técnicas no mesmo composto. A partir destes estudos é possível associar os distintos processos a diferentes caminhos de condução, devidos à presença de íons flúor estrutural e dinamicamente não equivalentes.

Financiamento: CNPq, FINEP e FAPEMIG

### COMPORTAMENTO DIELÉTRICO DO FERROELÉTRICO RELAXOR PLZT 9/65/35 DOPADO COM $MnO_2$

EVERALDO NASSAR MOREIRA, JOSÉ ANTONIO EIRAS

Universidade Federal de São Carlos

Titanato-zirconato de chumbo modificado com lantânio (PLZT) com razão Zr/Ti 65/35 com concentração de lantânio entre 7 a 10% são relaxores ferroelétricos. Segundo Isupov, a transição de fase difusa (TFD) no PLZT pode ser atribuída à existência de micro regiões polares dispersas em uma matriz paraelétrica. Por outro lado, recentemente outras hipóteses tem sido levantadas para explicar a TFD, entre estas, a formação

de campos aleatórios dentro da rede. No entanto, a questão relativa à relaxação dielétrica dos relaxores permanece como alvo de muita discussão. Entre as propostas mais discutidas para a descrição do fenômeno da relaxação, encontram-se a feita por Viehland. Nesta, a relaxação dielétrica pode ser modelada pela relação de Vogel-Fulcher, como em materiais tipo vidro de spins. Contudo, a descrição da relaxação através da hipótese do movimento viscoso de paredes de domínios tem mostrado ser muito viável, permitindo um maior entendimento do fenômeno. Assim, o nosso objetivo nesta investigação sobre o comportamento dielétrico dos relaxores foi o de estudar a influência da adição de  $MnO_2$  (0 a 3% molar) nas propriedades dielétricas do relaxor PLZT 9/65/35. Assim, foram sintetizadas pelo método convencional de mistura de óxidos, as amostras cerâmicas nas composições desejadas. Utilizando a técnica de espectroscopia de impedância, obtivemos a dependência da permissividade dielétrica com diferentes frequências, em função da temperatura. Os resultados mostram que o aumento da concentração de Mn na rede do PLZT inibe a relaxação da permissividade dielétrica relativa e aumenta a temperatura da máxima permissividade.

## DESENVOLVIMENTO, CARACTERIZAÇÃO E PROPRIEDADES DE MATERIAIS (Propriedades: Ópticas e Elétricas, Acústicas e Térmicas – 12/06/97

Síntese e Caracterização do Sistema  $TeO_2$ -ZnO- $Na_2O$  para Dispositivos Ópticos

ANA PAULA BISPO, LUIZ CARLOS BARBOSA,

NORBERTO ARANHA

IFGW - UNICAMP

OSWALDO LUIZ ALVES

IQ - UNICAMP

Vidros à base de óxido de telúrio têm se mostrado muito promissores no campo das comunicações ópticas devido à apresentarem altos índices de refração linear e não linear. Neste trabalho foi sintetizado e caracterizado o sistema  $TeO_2$ -ZnO- $Na_2O$ , visando a posterior fabricação de fibras ópticas. Amostras deste sistema com quantidades variáveis de seus constituintes sofreram processo de fusão em cadinhos de alumina de alta pureza, em fornos super-Kanthal a temperatura de 800 °C durante 2 horas. Após este procedimento, amostras em formato de lâminas e pó foram caracterizadas utilizando-se difração de raios-x, espectroscopia UV-Vis-IR e Ramam, dilatométrica por técnicas de DTA

e TMA. Utilizando-se o método do ângulo de Brewster, foram medidos seus índices de refração  $n$  na linha do laser He-Ne. Os valores de índice de refração encontrados foram extremamente altos, ficando entre 1.8 e 2.0. A transmitância na região de 1.5 microns ficou em torno de 70% como mostraram os espectros de UV-Vis e IR de lâmina. Através da técnica de DTA vimos que as curvas de temperatura do sistema não apresentam picos de cristalização, tendo aspecto liso. Estes dados confirmaram que o sistema estudado apresenta os requisitos necessários para a fabricação de dispositivos ópticos. Também serão mostradas técnicas utilizadas para tentar eliminar a hidroxila presente na amostra, como borbulhamento de gases durante a fusão do vidro ou a adição de alguns elementos específicos para tal fim na composição do sistema. Algumas considerações serão feitas sobre a estrutura do sistema, baseadas nos dados obtidos na espectroscopia Raman e infravermelho de pó.

#### ESTUDOS DE CONDUTIVIDADE ELÉTRICA EM COMPOSTOS DE $BaTiO_3$

FÁBIO HENRIQUE SILVA SALES, JOSÉ ALZAMIR PEREIRA DA COSTA, WILSON ACCHAR, THOMAS DUMÉLOW  
UFRN

O Titanato de Bário ( $BaTiO_3$ ) é um óxido cerâmico muito utilizado nas últimas décadas pela indústria tecnológica de eletro-eletrônica. Suas propriedades elétricas constituem um dos principais motivos desta procura, despertando o interesse, até hoje, de vários grupos de pesquisadores. A adição de certos óxidos (aditivos), em pequenas quantidades, fazem com que o  $BaTiO_3$  sinterize de maneira mais otimizada, melhorando assim suas propriedades específicas, das quais destacamos a condutividade elétrica [1]. Pesquisas científicas [2] revelaram que o  $SiO_2$  otimiza o processo de fabricação do material. Este é frequentemente adicionado ao  $BaTiO_3$ , pois tem a propriedade de diminuir a temperatura de sinterização, tornando este processo mais econômico; por outro lado, o  $Bi_2O_3$  não influencia na condutividade elétrica do material, mas aumenta a densificação. Ele também tem a propriedade de otimizar o processo de sinterização; já o  $Sb_2O_3$  tem como principal objetivo, aumentar a condutividade elétrica do material enquanto que o  $Nb_2O_5$  tanto densifica quanto aumenta a condutividade elétrica do material; os aditivos  $MgZrO_3$  e  $PbTiO_3$  quando adicionados ao  $BaTiO_3$  tendem a diminuir a variação da constante dielétrica com a temperatura; o  $MnO_2$  age como intensificador das propriedades elétricas do material. Neste trabalho, apresentaremos resultados experimentais obtidos em amostras de  $BaTiO_3$  sinterizadas e dopadas com aditivos ( $Al_2O_3$ ,  $SiO_2$  e  $CeO_2$ ). Mostraremos toda metodologia utilizada na preparação das amostras, nas quais utilizamos o método "quatro pontos" para obter-

mos as medidas de resistividade elétrica em função da variação de temperatura.

[1] H. F. CHENG, J. Appl. Phys. 66 (3), 1 august 1989.

[2] SAMPAIO, L. O. C. Observações sobre a Tecnologia dos Capacitores Cerâmicos de Multicamadas. Resumo da Monografia de Aperfeiçoamento. IF-UFRJ. 1990.

(Apoio CAPES e Centro de Ciências exatas da UFRN)

#### A FUNÇÃO DE QUASE-EQUILÍBRIO NA CONDUTIVIDADE E LUMINESCÊNCIA ESTIMULADA TERMICAMENTE

WALTER ELIAS FERIA AYTA, CHINTA MANI SUNTA, JOSÉ FERNANDO DINIZ CHUBACI, SHIGUEO WATANABE

Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Nos modelos convencionais da termoluminescência assume-se que os portadores excitados termicamente durante o processo de emissão são relaxados instantaneamente para os centros de recombinação ou as vacâncias de armadilhas. Estes modelos são satisfatórios na interpretação de alguns dos resultados experimentais mas teoricamente os portadores tem um tempo de vida finita no estado não localizado (banda de valência ou de condução) e em consequência existe um acréscimo dos portadores neste estado, isto pode ser observado na aparição dos picos da condutividade elétrica simultaneamente com as curvas de emissão termoluminescente. O fato da condutividade aparecer na forma de um pico similar ao pico da termoluminescência significa que o acréscimo da concentração dos portadores livres na banda não localizada varia rapidamente com a temperatura  $T$  durante o aquecimento. O significado da suposição de quase-equilíbrio nos modelos analíticos da termoluminescência, é que a concentração dos portadores livres permanece constante e é desprezível em comparação com a concentração dos portadores armadilhados durante a emissão termoluminescente. A nova função  $Q(T)$  chamada de função de quase-equilíbrio é introduzida para mostrar as condições paramétricas sob o qual acontece o quase-equilíbrio. O valor de  $Q(T)$  é igual a 1 quando a concentração dos portadores na banda não localizada esta em relaxamento total  $R_t$  dos portadores livres, onde o  $R_t$  é a soma das taxas de recombinação  $R_r$  e rearmadilhamento dos portadores nas armadilhas vacantes  $R_c$ . O quase-equilíbrio acontece quando  $Q(T) \sim 1$  e são mostrados as condições paramétricas referente ao intervalo da temperatura sob o qual  $Q(T)$  se desvia significativamente de 1. Os parâmetros considerados são a seção transversal de captura das armadilhas e centros de recombinação, densidade dos estados na banda não localizada e a densidade das armadilhas.

### PROPRIEDADES ÓPTICAS LINEARES E NÃO-LINEARES DE CRISTAIS DE L-LISINA

JOSÉ JOATAN RODRIGUES JR, LINO MISOGUTI,  
 LIANA BUENO O. A. DE MORAES, DANIEL VARELA  
 DE MAGALHÃES, SÉRGIO CARLOS ZILIO, VANDERLEI  
 SALVADOR BAGNATO  
 IFSC, USP - São Carlos  
 FREDERICO DIAS NUNES  
 Depart. de Eng. Eletr. e Sist., CT, UFPe

Neste trabalho caracterizamos cristais orgânicos de L-Lisina Monocloridrato ( $C_6H_{14}N_2O_2.HCl$ ) sob o ponto de vista de suas propriedades ópticas. Este trabalho faz parte de uma pesquisa maior, na qual estamos estudando uma série de cristais orgânicos como a L-Alanina, a L-Treonina, a L-Arginina Fosfatada (LAP), etc; que tem propriedades não lineares relevantes, portanto, com potencial para aplicação em dispositivos ópticos que se valem desses efeitos não-lineares. Os cristais orgânicos de L-Lisina são crescidos em soluções aquosas, são ópticamente biaxiais e têm simetria monoclinica do grupo espacial  $P2_1$ . Determinamos com precisão os três índices de refração ( $n_x, n_y, n_z$ ) como função do comprimento de onda e da temperatura, ou seja, os elipsóides de índices de refração. Medimos os espectros de transmitância polarizados ao longo dos três eixos ópticos, o que determina a janela de transparência do material, neste caso tipicamente entre 250-1400 nm. Como observamos também uma geração de segundo harmônico (GSH) eficiente, determinamos então as direções de casamento de fase (loci) para esse processo, correspondente à conversão de 1064 para 532 nm. Outra propriedade importante que a L-Lisina apresenta, dado a sua simetria cristalina, é o efeito eletro-óptico. Através de medidas interferométricas tipo Mach-Zehnder ou Michelson, determinamos os seus coeficientes eletro-ópticos e piezoelétricos principais. (Apoio financeiro FAPESP, CAPES e CNPq)

### DEPENDÊNCIA DA POLARIZAÇÃO NA PARTE REAL DO ÍNDICE DE REFRAÇÃO DETERMINADA POR INTERFEROMETRIA DE RAIOS-X

ORESTES KAWA, CESAR CUSATIS  
 UFPR

O objetivo deste trabalho foi medir a dependência da parte real do índice de refração em função da orientação da amostra monocristalina em relação à direção de polarização do feixe incidente utilizando-se a interferometria de raios-x.

Sabe-se que o efeito, na região dos raios-x, é máximo próximo das bordas de absorção dos átomos da amostra. Nessas regiões os efeitos de dicroísmo e birrefringência já foram detectados e medidos por vários métodos mas, especialmente a última, com pouca pre-

cisão [Bonse, U. & Henning, A., Nucl. Instr. & Meth., A246 (1986)].

Os critérios utilizados para a escolha das amostras foram baseados nas simetrias estruturais e nas fontes de raios-x disponíveis. O interferômetro de raios-x utilizado é do tipo LLL, cortado em silício sem discordâncias, montado sobre uma mesa goniométrica com precisão de 5 segundos de arco. A estabilidade da fase obtida foi da ordem de 0.1% num período de 24 horas. As medidas são feitas detectando-se a variação do caminho óptico quando a amostra, colocada em um dos dois feixes que interferem, é girada em torno de um eixo perpendicular ao plano da amostra. Nas medidas feitas inicialmente com amostras de quartzo, corte x, com precisão de 6 partes em 10000 e radiação  $Cu K_\alpha$ , ou seja, longe de qualquer borda de absorção, não foi detectada qualquer variação do caminho óptico em função do ângulo de giro da amostra.

Foram realizadas medidas em amostras de niobato de lítio com radiação de freimanto (bremstrahlung) de tubo de W e perto da borda do nióbio. Estes resultados serão discutidos.

### Determinação da Dependência do Índice de Refração Não-Linear e do Coeficiente de Extinção Não-Linear do $BaLiF_3 : Ni^{2+}$ com a Concentração por meio da técnica de Varredura-Z

RICARDO ELGUL SAMAD, NILSON DIAS VIEIRA JUNIOR, SÔNIA LÍCIA BALDOCHI, SPERO PENHA MORATO

IPEN - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares

Cristais de  $BaLiF_3 : Ni^{2+}$  são potencialmente meio laser ativos, absorvendo eficientemente na região de emissão de lasers de Nd:YAG e emitindo em  $1,5 \mu m$ . O estudo de suas propriedades não-lineares é importante, pois, quando o meio laser encontra-se sob operação na cavidade, está sujeito a altas intensidades de radiação eletromagnética. Estas altas intensidades induzem efeitos ópticos não-lineares, dentre os quais, a alteração do índice de refração do meio. Esta alteração do índice de refração introduz uma lente na posição da amostra, que altera a cavidade. É importante o conhecimento desta alteração para que possa ser levada em conta no desenho da cavidade. Para isto, utilizamos a técnica da Varredura-Z para absorvedores saturáveis com o objetivo de determinar o índice de refração não-linear,  $n_2$ , e o coeficiente de extinção não-linear do  $BaLiF_3 : Ni^{2+}$  para quatro concentrações diferentes de dopante: 0,15, 0,30, 1 e 2 mol%. As medidas foram realizadas sob bombeio de um laser de Nd:YAG operando na linha  $1,064 \mu m$ . Conseguimos demonstrar que para concentrações até aproximadamente 1% o índice de refração não-linear cresce linearmente com a concentração de dopante. Para concentrações maiores essa relação deixa de ser linear, evidenciando um efeito coletivo dos íons

de dopante. Determinou-se que a não-linearidade observada é de origem eletrônica, sendo os efeitos térmicos desprezíveis nas escalas de tempo e intensidade utilizadas. Apoio FAPESP

### **Teoria de Perturbação em Sistemas com Tunelamento Quântico Rotacional**

LUCIANO PEIXOTO  
UFES, Depto. de Física

Neste trabalho estudamos o acoplamento com as vibrações da rede de estados resultantes do tunelamento quântico rotacional sofrido por moléculas em sólidos. No caso de um grupo molecular de simetria  $C_3$ , como o metil, o tunelamento, para o nível rotacional mais baixo, separa em cerca de 35 meV os dois estados com simetria E do estado com simetria A. A interação magnética dos prótons do metil com neutrons incidentes produz, por espalhamento inelástico, a transição entre os dois níveis. Nosso trabalho consistiu em calcular a forma da linha de ganho no espectro de espalhamento para diferentes temperaturas e daí encontrar as curvas para a variação da largura de linha e do deslocamento de linha em função de  $1/T$  e compará-las com as de outros trabalhos teóricos e com curvas experimentais. No nosso caso, em vez de utilizarmos o formalismo de equações de movimento, calculamos a função de Green através de expansão diagramática, incluindo a contribuição da parte de vértice. A principal dificuldade aqui é com a falta de relações de comutação simples para os operadores de projeção em termos do quais o problema é formulado, impedindo o uso da teoria de perturbação usual. Ela é contornada com o uso da representação da função de Green térmica por integral de contorno para, no contexto da chamada aproximação sem cruzamento de linha (NCA), chegarmos a um conjunto de equações integrais acopladas envolvendo propagadores, auto-energias e funções de vértice. Por solução numérica obtivemos diretamente a forma do espectro e daí as curvas desejadas. Apresentamos resultados correspondentes a diferentes espectros de fónons para confirmar a hipótese de que é o acoplamento com a rede a origem da forma peculiar das duas curvas.

### **ABSORPTION IN THE MODEL OF SELF-CONSISTENT X-RAY SCATTERING**

WLODZIMIERZ KELLER, DIONICARLOS SOARES DE VASCONCELOS  
UFBA

Absorption is approached as a local and statistical event in contrast with a background of the global and strictly determined pattern of x-ray crystal scattering. While particular and detailed physical mechanism of the absorption phenomenon is here considered irrelevant, the main concern is given to the overall effects of absorption on the earlier developed self-consistent model of x-ray

scattering. The above model substitutes a single dipole, used originally in Ewald's papers as the scattering unit, by the plane of dipoles, but at the same time taking advantage of the self-consistency principle as determining the scattering mode. The following points, diverging with the previous work, are: i) Absorption takes place exclusively at the electron sites arranged in a set of dipole planes. ii) The flux of photons incident in each dipole plane is divided into two branches. The first one, as suffering unknown a priori frequency changes, is considered redundant for the model. The second branch is that of the unchanged wavelength. It is scattered under exact satisfaction of the Ewald self-consistency principle and gives rise to the overall scattering pattern of a crystal. This principle, for a non-absorbing case, can guarantee that energy is conserved for each dipole plane separately and for the model as a whole. iii) Absorption is considered as a localized occurrence, with probability factor which can be proportional to the first or higher powers of intensity of the resulting stationary and local field. iv) The latter is calculated separately for both polarization states, which for an non-absorbing crystal are quite independent of each other. The absorption is thus a unique link which interlaces these two states in the absorption effect. v) Absorption and refraction in this model of scattering are two distinct phenomena, which means that there is no necessity to introduce a complex index of refraction for absorbing crystals. The calculated absorption profiles reproduce the experimental results without the necessity of the corrections usually made by means of additional and arbitrary parameters.

### **GEOMETRY OF SINGLE CRYSTAL-PLANE SCATTERING IN DYNAMICAL THEORY OF X-RAY DIFFRACTION**

DIONICARLOS SOARES DE VASCONCELOS,  
WLODZIMIERZ KELLER, MAREK URBANSKI  
UFBA

X-ray diffraction from a crystal plane with zero thickness (two-dimensional problem) filled up by scattering electrical charge which can be treated as either a continuous or discrete distribution, has been calculated in analytical and numerical ways, respectively. The crystal plane scattering was regarded as due to radiation from classical dipoles activated in one case, only by the external electrical field, and in the second case, by the external field plus field due to other dipoles in the plane, determined self-consistently. In the first solution we consider the situation of a single plane wave, incident at the ( glancing angle, as the source of a field forcing the dipole oscillations. In the second, self-consistent solution, we also include fields of neighbouring radiating dipoles. It is then possible to show by using either analytical or numerical methods that the combined dipole radiation takes the form of two plane waves leaving sy-

mmetrically the crystal plane at ( angles which give rise to reflected and forward scattered waves. The resultant dipole waves calculated for the first mode of activation (external field only) have a phase shift equal to  $+\pi/2$  in relation to the incident wave, a result which is known to violate conservation of energy. It is shown here that, the two methods of calculation (analytical and numerical) agree on the shift, they disagree on the minimum distance  $xP$  at which the resultant dipole waves are formed as plane waves. The analytical evaluation requires only  $xP > 0$ , while the numerical one gives an approximate value  $xP = 0.5 - 1.0\lambda$  for distance between dipoles which are encountered in common diffraction experiments. In the self-consistent mode, once again the analytical and numerical methods yield the same values as above. More importantly, in this mode, which considers cooperative effects between scatterers, energy is conserved. The calculated phase shift is shown to be greater than  $+\pi/2$  by exactly the amount necessary to conserve energy.

### SÍNTESE DE DERIVADO DO ÁCIDO QUÍNICO, UTILIZANDO ENERGIA DE MICROONDAS COMO FONTE DE AQUECIMENTO REACIONAL

MARIA DA PAZ DO NASCIMENTO MORENO, LÚCIA HELENA BRITO BAPTISTELLA  
UNICAMP

Temos desenvolvido uma metodologia que permite sintetizar uma lactona ( $C_{10}H_{14}O_5$ , PM=214) de interesse na rota sintética de potencial inibidor da sialidase do vírus da gripe. Era sintetizada por alguns métodos a partir do ácido quínico ( $C_7H_{12}O_6$ , PM=192.166), dentre eles a adaptação do método de Hasegawa[1]. Este é um dos primeiros trabalhos que descreve a proteção de hidroxilas vizinhas do ácido quínico com 2,2-dimetoxipropano, usando energia de microondas, no entanto, há precedentes desta técnica[2] em nosso laboratório. O solvente, dimetilformamida, favorece o uso desta metodologia, pois um aparelho de microondas com potência de 560 watts aquece em 1 minuto, 50 ml à  $131^\circ C$ , enquanto seu ponto de ebulição é  $153^\circ C$ . A homogeneização térmica, aquece o sistema sem necessidade de agitação mecânica, sendo o meio reacional aquecido à elevada temperatura, em pequeno espaço de tempo, sem que haja evaporação do solvente. Obtivemos rendimentos da lactona de até 99%, comparado com 68% do método clássico, quanto ao tempo de 24 horas, foi reduzido a 20 minutos ( com intervalos de 30 " ), e a pureza do material obtido foi superior. Analisamos os compostos através de cromatografia em camada delgada, ponto de fusão, rotação óptica, ressonância magnética de próton e infravermelho. Acreditamos que este trabalho pode contribuir com estudos da aplicação de microondas para reações específicas, ou mesmo em síntese de um modo geral[3].

- [1] Hasegawa et al *Carbohydrate Research*, **29**, 239 (1973).  
[2] Baptistella, L. H. B.; Neto, A. Z.; Onaga H. and Godoi, E. A. M. *Tetrahedron Letters*, **34**, 8407 (1993).  
[3] Whittaker, A. G. and Mingos, D. M. P. *Journal of Microwave Power and Electromagnetic Energy*, **29**, 195 (1994)

### Measuring Piezoelectric Coefficients of LAP, L-Threonine and L-Alanine Monocrystals

DANIEL V. MAGALHÃES, J. JOATAN RODRIGUES JR,  
LIANA B. A. O. MORAES, ANTONIO C.  
HERNANDES, SÉRGIO C. ZILIO  
Instituto de Física de São Carlos - USP  
FREDERICO D. NUNES  
Departamento de Eletrônica e Sistemas - CT - UFPE

This work reports on the measurement of piezoelectric coefficients of aminoacids crystals, namely: L-arginine phosphate monohydrate (LAP), L-alanine and L-threonine. These materials are being studied as candidates to be used in electro-optics phase modulators to generate frequency sidebands, useful for mode-locking of lasers[1], to avoid optical pumping in laser cooling techniques[2] and to achieve correlated jitters in ultra-high resolution spectroscopy[3]. The measurements were made using Michelson as well Mach-Zehnder interferometers under unclamped condition at room temperature. The values obtained are reported and the results discussed giving main attention to LAP crystals due to their promising properties being made an analysis comparing the performance of Michelson and Mach-Zehnder interferometers. The others crystals (L-alanine and L-threonine) are also discussed, because they have some aspects about your symmetry group.

[1] - A. Yariv, *Quantum Electronics*, 3rd Ed., (Wiley, New York, 1989), ch.20;  
[2] - J. F. Kelly and A. Gallagher, *Rev. Sci. Instrum.* **58** (1987) 563;  
[3] - E. Thomas, P. R. Hemmer, S. Ezekiel, C. C. Leiby, R. H. Picard and C. R. Willis, *Phys. Rev. Lett.* **48** (1982) 867.

Support: FAPESP, PRONEX/MCT/MEC.

### ESPECTROSCOPIA ÓPTICA DO ÍON $Er^{3+}$ EM VIDRO CALCIO-ALUMINATO

CRISTINA TEREZA MONTEIRO RIBEIRO, LUIS ANTÔNIO DE OLIVEIRA NUNES  
DFI- Espectroscopia de Sólidos - IFSC - USP  
MAURO BAESSO

Departamento de Física - Universidade Estadual de Maringá

JURACÍ APARECIDO SAMPAIO, SÉRGIO GAMA  
Instituto de Física Gleb Wataghin - Universidade Estadual de Campinas - Unicamp

Os vidros óxidos apresentam inúmeras utilidades no mundo moderno, dentre estes os mais utilizados são os vidros silicatos, entretanto estes vidros tem uma faixa de transparência no infravermelho estreita (em torno de  $4\mu\text{m}$ ). Para superar esta deficiência tem sido pesquisadas sistematicamente novas composições vítreas, dentre estas temos a família à base de  $\text{CaO-Al}_2\text{O}_3$  com transmissão no IV superior a dos vidros silicatos (aproximadamente  $5\mu\text{m}$ ). Estes vidros também apresentam a vantagem de poderem ser preparados em grande quantidade, em contra partida são de pouca durabilidade o que é remediado pela adição de uma pequena quantidade de  $\text{SiO}_2$ , que também aumenta a capacidade de formação de vidro e diminui a taxa de cristalização. Os vidros fluoretos de metais pesados (HMFG) apresentam uma faixa de transmissão no infra vermelho bastante extensa, entretanto são higroscópicos, apresentam tendência a cristalização e baixa viscosidade o que dificulta a sua utilização sendo necessários outros vidros mais resistentes (entre estes temos os vidros de Cálcio-Aluminato). Os vidros à base de  $\text{CaO-Al}_2\text{O}_3$  quando dopados com terras raras (T.R.) apresentam propriedades de emissão de grande interesse para a confecção de dispositivos ópticos ativos. Nestes vidros além do interesse espectroscópico existe um interesse em se verificar a possibilidade de os usarmos como meio ativo para lasers. Então com este intuito foi feito um estudo espectroscópico nestes vidros dopados com o metal raro  $\text{Er}^{3+}$  através de técnicas de absorção, luminescência, tempo de vida e conversão ascendente de energia em conjunto com a análise de Judd-Ofelt dando especial ênfase a transição  $^4\text{I}_{13/2} - ^4\text{I}_{15/2}$  do íon  $\text{Er}^{3+}$ , emissão laser.

**A HABILIDADE FORMADORA DO VIDRO**  
 $0,7\text{Ga}_2\text{S}_3 - 0,3\text{La}_2\text{S}_3$  DOPADO COM ÍON  $\text{Dy}^{3+}$   
 EDGAR MARTINEZ MARMOLEJO, RAUL CUEVAS  
 ROJAS, O. L. ALVES, LUIZ CARLOS BARBOSA  
 UNICAMP

As propriedades ópticas em vidros de fônons de baixa frequência dopado com  $\text{Dy}^{3+}$  tem atraído a atenção para serem aplicados no campo da óptica não linear como amplificadores ópticos, dispositivos chaveadores ópticos planares na janela óptica de 1300 nm. Os vidros baseados sobre  $\text{Ga}_2\text{S}_3$  e  $\text{La}_2\text{S}_3$  são vidros com fônons de baixas frequências os quais são apropriados para esta aplicação. Escolhemos a composição  $0,7\text{Ga}_2\text{S}_3 - 0,3\text{La}_2\text{S}_3$  como a melhor para o objetivo do trabalho. As matérias primas usadas foram de pureza 99,9%. Para evitar a fusão em contato com a atmosfera ambiente, foi necessário fazer uso, da selagem destas matérias primas, em tubos de Sílica de alta pureza; o cadinho utilizado foi carbono vítreo de alta pureza, o qual foi selado juntamente com as matérias primas em seu interior, por intermédio do vácuo atingindo  $6 \times 10^{-6}$  torr. Tal procedimento evitou a ocorrência

de explosões de ampola durante processo de fusão, a seguir o sistema foi levado a um forno de resistência elétrica-(Linberg) tipo poço e acoplado a um sistema de agitação para produzir a melhor homogeneização possível do vidro após a fusão. A temperatura utilizada foi de  $1200^\circ\text{C}$  durante duas horas, após a fusão o sistema de cadinho foi introduzido em água sofrendo processo de quenching. Após este procedimento, amostras na forma de pó e de lâminas sofreram processos de caracterização por difratometria de raio-X, espectroscopia infravermelho e UV-Vis, análises térmicas diferenciais (DTA). Neste trabalho apresentamos o efeito do íon de Terra Rara  $\text{Dy}^{3+}$  sobre a estabilidade térmica do vidro  $0,7\text{Ga}_2\text{S}_3 - 0,3\text{La}_2\text{S}_3$ , através da medida de differential thermal analysis (DTA) e difratometria de raios X. Determinamos os parâmetros de Hruby e a energia de ativação de cristalização que foram deduzidas das curvas de DTA obtidos com várias taxas de aquecimento, dos difratogramas realizamos algumas tentativas de se conhecer as fases cristalinas encontradas.  
 CNPQ, PADCT, TELEBRAS, e FAPESP

**Study of Conductance Quantization in Metal Nanowires**

WALTER A. DE HEER

School of Physics, Georgia Inst. of Technol., Atlanta, USA

VARLEI RODRIGUES, DANIEL M. UGARTE

Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (CNPq/MCT)

Quantized conductance is observed in ballistic quasi-one-dimensional nanometric conductors, and this phenomenon can be easily described with the Landauer-Büttiker formalism that considers conductance as the transmission of the electron waves through a wave guide. This phenomenon has been extensively studied in metal nanowires generated using scanning tunneling microscopy (STM) or mechanically controllable break junction. When the conductance is measured as a function of nanowire section, the curve displays a staircase behavior, and the step values follow the relation  $G = nG_0$ , where  $n$  is an integer and  $G_0$  is equal to  $2e^2/h$  ( $1/12.9 \text{ kohm}^{-1}$ ); the integer number  $n$  represents the number of occupied conduction channels. Recently, it has been reported that quantum conductance may also be observed in point-contacts formed by two touching macroscopic metal wires, where mechanical vibrations induce the wire stretching. Here, we report a study of the conductance values observed in point-contacts formed by metal wires and also carbon nanotube bundles. Our curves show clearly that conductance steps values may be integer and non-integer multiples of  $G_0$ . These two kinds of step cannot be differentiated from each other in the curves. Some authors have argued that non-integer steps are due to impurities or contamination effects; also in many cases an unexplained series classical resistance is considered to shift the step values to be closer of integers. In this work, we adjust the

observed conductance curves showing fractional steps by assuming two or more serial resistors, each one with quantized conductance. We speculate that these serial resistors are generated by quasi-elastic electronic scattering effects in the nanowires.

### Estudo Fototérmico e Fotoacústico do Granito e da Argamassa Armada

MANOEL MARCOS FREIRE D'AGUIAR NETO  
UFBA

JOSEF PELZL, BRUNO BEIN, JURGEN GIBKES  
Ruhr Universität Bochum

Técnicas fototérmicas e fotoacústicas combinadas têm sido usadas na investigação de materiais de construção, notadamente argamassa armada e o granito. A argamassa armada é um novo tipo de material que vem sendo usado com sucesso, na Bahia, principalmente na construção de escolas públicas. É, basicamente, uma mistura de cimento e areia, algumas vezes contendo também uma certa quantidade de mica na sua composição, sendo que as diferentes concentrações dos componentes da mistura determinam o peso e a dureza do produto final. Tem custo bastante reduzido em comparação ao tijolo vazado, de argila cozida, usado comumente e a sua estabilidade mecânica não muda significativamente. O desempenho térmico da argamassa porém precisa ser elucidado, já que influencia o conforto térmico e o custo global da construção. Para tanto foram investigadas algumas características termofísicas da argamassa através da determinação da difusividade térmica e da efusividade, parâmetros importantes para a caracterização dos materiais, determinados por meio do tratamento adequado da amplitude e da fase do sinal fotoacústico. No caso do granito, usado largamente para revestimentos na construção civil, com processos e ensaios de caracterização tecnológica e de previsão de desempenho em serviço já bem conhecidos, busca-se métodos alternativos para a análise deste material. As medidas estão sendo realizadas em temperatura ambiente, com uma célula fotoacústica cuja construção permite medidas do sinal em transmissão e em reflexão na amostra e com radiometria infravermelha, em função da frequência da radiação incidente (laser de Argônio ou lâmpada de Xenônio). Três tipos diferentes de argamassa e quatro variedades de granito estão sendo estudados. Os resultados obtidos até então indicam que o sinal fotoacústico é fortemente dependente da composição e da umidade da argamassa, a difusividade decresce com o aumento da umidade. No caso dos granitos, em geral, as diferenças entre as amplitudes normalizadas são maiores para as amostras não polidas, enquanto que as amostras polidas mostram menor efeito no perfil de profundidade da amplitude devido à reduzida rugosidade das superfícies.

### DIFUSIVIDADE TÉRMICA DE CRISTAIS DE BaLiF<sub>3</sub> PURO E DOPADOS COM ÍONS DE METAIS DE TRANSIÇÃO

LIDIA SAWADA, SONIA LÍCIA BALDOCHI, SPERO  
PENHA MORATO, MARTHA MARQUES FERREIRA  
VIEIRA  
IPEN - SP

Neste trabalho é apresentado um estudo da determinação da difusividade térmica ( $\alpha$ ) de cristais de BaLiF<sub>3</sub> puro e dopados com metais de transição. O estudo das propriedades térmicas desses cristais é importante uma vez que esses materiais apresentam um bom potencial como meio laser ativo e a difusividade térmica é um parâmetro importante para a engenharia de lasers de estado sólido. O conhecimento do valor da difusividade térmica também pode ser útil no aprimoramento do crescimento desses cristais. Os valores da difusividade térmica obtidos foram determinados pelo método fotoacústico da diferença de fase, onde a amostra é irradiada com um feixe de laser modulado nas faces frontal e traseira alternadamente, medindo-se as fases dos respectivos sinais fotoacústicos observados. Devido ao tempo finito da propagação do calor pelo meio, através da diferença de fase entre os sinais da frente e de trás, pode-se calcular a difusividade térmica do cristal. Os valores obtidos corresponderam às expectativas por serem próximos ao da difusividade térmica do cristal de LiF que é de 0,037cm<sup>2</sup>/s. Os valores obtidos à temperatura ambiente foram:  $\alpha = 0,035$  cm<sup>2</sup>/s para BaLiF<sub>3</sub> puro;  $\alpha = 0,0373$ cm<sup>2</sup>/s para BaLiF<sub>3</sub> : Ni<sup>2+</sup> e  $\alpha = 0,0284$ cm<sup>2</sup>/s para BaLiF<sub>3</sub> : Co<sup>2+</sup>. Esses valores possuem uma precisão considerável (Suporte financeiro: CNPq e FAPESP).

### DETERMINAÇÃO DA DIFUSIVIDADE TÉRMICA DE UM VIDRO FLUOROINDATO

LIDIA SAWADA, MARTHA MARQUES FERREIRA  
VIEIRA  
IPEN - SP  
BILL JORGE COSTA

IFSC - USP e Instituto de Tecnologia do Paraná - PR  
SIDNEY RIBEIRO, YOUNÈS MESSADDEQ  
Instituto de Química - UNESP

Os vidros à base de InF<sub>3</sub> (vidros fluoroindatos) constituem uma nova geração de materiais para aplicação na região espectral do infravermelho médio. Sua elevada importância no infra vermelho os torna atraentes para uso em fibras óticas para lasers de CO e amplificação ótica. Esta última especificamente, é crítica para as redes de telecomunicações. Os vidros fluoroindatos, além de suas qualidades óticas, apresentam durabilidade química superior em soluções não tamponadas, quando comparados aos vidros fluorozirconatos. O método utilizado na determinação da difusividade térmica ( $\alpha$ ) foi o método fotoacústico da diferença de

fase. Esse método consiste em se determinar a diferença de fase do sinal fotoacústico ao se iluminar a amostra pela frente e por trás, para uma mesma frequência de modulação. Esse método se baseia na propagação de ondas térmicas através da rede cristalina. Essas ondas térmicas são resultantes da desexcitação não radiativa que ocorre na rede cristalina. Apesar do vidro ser um amorfo o método pode ser aplicado, uma vez que o transporte de calor comporta-se da mesma maneira que numa rede cristalina. Sabe-se da literatura que pelos estudos feitos com outras técnicas, o valor da difusividade térmica de vidros à base de  $\text{SiO}_2$  está entre  $0,0025 \text{ cm}^2/\text{s}$  e  $0,010 \text{ cm}^2/\text{s}$  nas temperaturas de aproximadamente  $300\text{K}$ , dependendo da concentração dos constituintes. O valor da difusividade térmica obtido para a amostra estudada, à temperatura ambiente, foi  $\alpha = 0,0089(4) \text{ cm}^2/\text{s}$  (Apoio financeiro: CNPq e Cooperação Internacional CAPES/COFECUB).

### CARACTERIZAÇÃO DE REORIENTAÇÃO DE DOMÍNIOS FERROELÉTRICOS

MANUEL HENTIQUE LENTE, JOSÉ MARQUES PÓVOA,  
JOSÉ ANTONIO EIRAS

*Universidade Federal de São Carlos*

A introdução de elementos heterovalentes em cerâmicas de titanato zirconato de chumbo,  $\text{Pb}(\text{Zr}_{0.53} \text{Ti}_{0.47})\text{O}_3$ , em substituição aos cátions  $\text{Pb}^{2+}$ ,  $\text{Ti}^{4+}$ , ou  $\text{Zr}^{4+}$ , produz forte influência sobre a mobilidade dos domínios, alterando suas propriedades piezoelétricas. Estes aditivos podem ser divididos em dois grupos. O grupo dos doadores, que induzem a formação de vacâncias de chumbo ( $V_{\text{Pb}}$ ), aumentando a mobilidade dos domínios e a polarização remanescente; e o grupo dos aceitadores, que induzem a formação de vacâncias de oxigênio ( $V_{\text{O}}$ ). A associação  $V_{\text{O}} - V_{\text{Pb}}$ , denominada "defeitos complexos", ancora o movimento dos domínios tendo como consequência o aumento do campo coercitivo e redução da polarização remanescente. Foram preparadas amostras de titanato zirconato de chumbo "puras", (PZT), e dopadas com elementos do tipo doador (Nb) e aceitador (Fe). A análise da reorientação dos domínios foi caracterizada através de medidas de transiente de corrente, após inversão do campo elétrico. Com esta técnica é possível a caracterização para tempos anteriores e posteriores aos compreendidos por histerese ferroelétrica. Observou-se, dos resultados obtidos, dois comportamentos do transiente de corrente. O primeiro, para tempos curtos ( $t < 0.1\text{s}$ ), onde há uma forte dependência não linear com o campo do transiente de corrente, enquanto que para tempos longos ( $t > 0.1\text{s}$ ), não há dependência com o campo. No primeiro, caso a não linearidade com o campo e o intervalo de tempo em que este fato é observado, sugere-nos que este fenômeno possa ser associado a reorientação de domínios, sendo fortemente influenciada pelas impurezas adicionadas ao PZT. Para o segundo comporta-

mento observado, notou-se que para campos mais intensos a estabilização no transiente de corrente é atingido em intervalos de tempos menores em relação a campos menos intensos, indicando o fim do processo de reorientação dos domínios.

### ENVELHECIMENTO E ESTABILIDADE TÉRMICA EM CERÂMICAS DE PZT PURAS.

JAMILSON PINTO DE MEDEIROS, JOSÉ ANTÔNIO  
EIRAS  
*UFSCar*

As cerâmicas de PZT são largamente empregadas em várias aplicações tecnológicas, as quais incluem filtros mecânicos, transdutores piezoelétricos para uso em eletroacústica e ultrassom. No entanto, é de fundamental importância o conhecimento e o controle dos mecanismos que causam o envelhecimento nos parâmetros piezoelétricos e dielétricos destas cerâmicas sobre um determinado intervalo de temperatura de trabalho, onde são exigidas estabilidade de tais propriedades nas condições ambientais. O fenômeno do Envelhecimento é causado pela mudança na estrutura de domínio e a perda de polarização permanente da cerâmica polarizada. Este fenômeno é verificado nas propriedades do PZT após a remoção de um estímulo elétrico ou térmico. Contudo, ainda existe pouca informação na literatura sobre o fenômeno de envelhecimento sobre os parâmetros piezoelétricos e dielétricos para composições de PZT. Resultados preliminares em cerâmicas de PZT puras apresentaram valores que estão consistentes com valores reportados pela literatura. Neste trabalho investigamos o efeito do envelhecimento e a estabilidade térmica em um determinado intervalo de temperatura, realizadas em cerâmicas de PZT puras, onde segundo a literatura devem apresentar coeficientes de temperatura positivos e negativos, respectivamente. Serão apresentados os resultados obtidos para o envelhecimento e estabilidade térmica para o parâmetro dielétrico constante dielétrica relativa e para os parâmetros piezoelétricos da constante de frequência e fator de acoplamento eletromecânico para composições de PZT na geometria em forma de barras, caracterizadas no modo de vibração longitudinal. As amostras de PZT foram polarizadas à temperatura ambiente,  $80^\circ \text{C}$  e  $120^\circ \text{C}$ , pela aplicação de um campo elétrico de  $3 \text{ kV/mm}$  durante 30 minutos.

### MODE-MISMATCHED THERMAL LENS CHARACTERIZATION OF THERMO-OPTICAL PROPERTIES OF LASER MATERIALS

AGÁCIO APARECIDO ANDRADE, TOMAZ CATUNDA

*Instituto de Física de São Carlos, Grupo de Espectroscopia de Sólidos, USP - Universidade de São Paulo*

JURACÍ APARECIDO SAMPAIO, SÉRGIO GAMA  
*Instituto de Física Gleb Wataghin, DFESCM-GPCM, UNICAMP - Universidade Estadual de Campinas*

MAURO LUCIANO BAESSO, ANTONIO CARLOS BENTO

*Departamento de Física, UEM - Universidade Estadual de Maringá*

The thermal lens effect is caused by the deposition of heat via non-radiative decay process after laser energy has been absorbed by the sample. The laser gaussian intensity profile generates a transverse temperature gradient in the sample, causing its lens-like behavior. In this work we used the two-beam mode mismatched thermal lens spectrometry (TLS), which has been demonstrated to be the most sensitive TLS technique. In this work we used TLS to study several kinds of lasers materials: oxide glasses (doped with  $Nd^{+3}$ , calcium aluminate glasses (undoped and with  $Nd^{+3}$ ,  $Er^{+3}$ ,  $Cr^{+3}$  and  $Co^{+2}$  doping), fluoride glasses (undoped and doped with  $Nd^{+3}$  and  $Er^{+3}$  doping) and fluoride crystals ( $SrAlF_5:Cr^{+3}$  and  $LiKYF_5:Nd^{+3}$ ). In the transient TLS technique can be used to obtain the thermal response time  $t_c = w_e^2/4D$ , where  $w_e$  is the excitation beam radius and the thermal diffusivity is given by  $D = K/\rho c$  ( $K$  is the thermal conductivity,  $\rho$  the density and  $c$  the specific heat). Therefore it allows a precise determination of  $D$ , which may depend on the direction of polarization in the case of crystals. In addition, the signal magnitude is proportional to  $\theta = P_e l / K \lambda_p ds/dT A (1 - \phi \lambda_{exc} / \lambda_{em})$ , where  $P_e$  is the excitation beam power,  $l$  the sample thickness,  $\lambda_p$  the probe beam wavelength,  $ds/dT$  the temperature coefficient of the optical path length,  $A$  the absorption coefficient,  $\phi$  the fluorescent quantum efficiency,  $\lambda_{exc}$  the excitation wavelength and  $\lambda_{em}$  the average emission wavelength. The term in parenthesis accounts for the fraction of absorbed energy that is reemitted radiatively. In our experiments we used an Ar laser as excitation beam and a HeNe laser as probe beam. The high sensitivity of technique allow the determination of very small absorption coefficient in the case of undoped materials. All fluoride (crystals and glasses) presented negative thermal lens ( $ds/dT < 0$ ) due to their their small temperature coefficients of the electronic polarizability.

#### PROPRIEDADES ELÉTRICAS E FÍSICO QUÍMICAS DE BLENDA DE PPS COM UM CRISTAL LÍQUIDO POLIMÉRICO

MARTA BUENO DE MORAES, ROSARIO BRETAS  
*UNESP ILHA SOLTEIRA*

O poli (sulfeto de p-fenileno) - (PPS) é um termoplástico de engenharia de elevada resistência térmica e química, com uma crescente importância industrial, já que pode ser utilizado na fabricação de filamentos, filmes e moldados ( $\sigma = 10S/cm$ , na dopagem com  $AsF_5$ ), porém sua estrutura morfológica é bastante destruída quando dopado com estes fortes agentes oxidantes. Neste trabalho, o PPS foi dopado com agentes dopantes mais fracos, como o tetracianoquinodimetano (TCNQ), para que não ocorresse a destruição da morfologia e assim, a sua influência pudesse ser melhor estudada. Diversas morfologias de PPS com TCNQ foram produzidas variando as condições de processamento. Foi analisado o efeito da adição de um segundo polímero, um cristal líquido termotrópico (TLCP), nas características microscópicas. Foi verificado um efeito negativo do TLCP sobre a condutividade do PPS, já que o primeiro teve sua condutividade diminuída com a dopagem. Além disso, o LCP só induziu orientação no PPS a concentrações acima de 80% de TLCP na blenda. Verificou-se para o PPS que não é a orientação, mas sim a cristalinidade, o fator importante na sua condutividade final. O mecanismo de condução apresentado pelo PPS e blendas tanto puros quanto dopados com TCNQ, é através de salto de portadores.

#### PHASE-ENCODE ROTATING-FRAME SPATIALLY RESOLVED NQR SPECTROSCOPY

H. ROBERT, F. VACA CHAVEZ, F. CASANOVA, D. PUSIOL

*Facultad de Matemática, Astronomía y Física, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba- 5000-Ciudad Universitaria, Argentina.*

Rotating-Frame NQR Imaging ( $\rho$ -NQRI) permits rendering of one- or two-dimensional images of the spatial distribution of quadrupole nuclei of the sample. For the detection of gradients of physical parameters influencing the NQR spectrum, a further dimension is added to the dimensions spatially resolved. Spatially resolved NQR spectroscopy allows one to correlate information from the spectroscopic and spatial dimensions, thus providing the distribution of the local spectral properties of the quadrupole nuclei. Both techniques are amplitude encoding methods, where the spatial information is obtained by incrementing the length of an inhomogeneous RF pulse, so that the amplitude of the excited magnetization depends on the position with respect to the RF gradient, while the first dimension corresponds to the conventional NQR spectrum. In contrast to NMR, the phase-encoding variant of rotating-frame zeugmatography has not been studied yet for NQR imaging purposes. In the original Hoult's version of rotating-frame zeugmatography, which was

supposed to be applied to NMR, it was suggested that spatial information can be encoded either in the amplitudes or in the phases of the excited transverse magnetization. The advantage of the simplest amplitude modulation technique is that the absorption and dispersion components are not mixed, but it involves a loss of  $\sqrt{2}$  in sensitivity. In this work we have examined the transient response of the quadrupolar spin- $\frac{3}{2}$  system to an excitation sequence involving a first pulse of variable length, which serves for encoding the nutation frequency information, followed by a second  $\pi/2$  pulse  $90^\circ$  out of phase. The sequence for phase encoding the quadrupolar nutation spectrum is examined for a polycrystalline object. The technique is applied to one-dimensional spatially resolved NQR spectroscopy and the feasibility to encode the spatial information in the phase of the free-induction-decay signal is reported.

### MAPPING LOCAL MOLECULAR ORIENTATION IN SOLIDS BY NQR POSITIONAL SPECTROSCOPY

F. CASANOVA, H. ROBERT, D. PUSIOL

*Facultad de Matemática, Astronomía y Física, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba- 5000-Ciudad Universitaria. Argentina.*

To determine physical properties related to inhomogeneities in solids, it is important to know for instance the spatial distribution of quadrupole nuclei ( $\rho(x)$ ), as well as the determination of the local degree of crystallinity and the distribution of the crystal orientation in polycrystalline samples. A novel technique to image both the spatial distribution of the quadrupole nuclei density and the local orientation of the electric field gradient at the quadrupole sites in non-metallic solids samples is reported. Spatial and orientational information are simultaneously encoded in the nutation spectrum of the NQR signal, without any external magnetic field. In this way the pure NQR spectroscopy information is preserved during the encoding process.

The idea of the present experiment is based on irradiating the object with two RF pulses: one of them having a spatially variable intensity and duration  $t_1$ ; and the second one, of length  $t_2$ , homogeneous in the space occupied by the object. We could in this way simultaneously encode the spatial, the orientational and the spectroscopic informations through the signal  $S(t, t_1, t_2)$ . The actual 3D matrix is therefore recorded after consecutive experiments varying systematically the parameters  $t_1$  and  $t_2$  and acquiring for each one the nuclear induction signal in the temporal domain  $t$ . Adequate transformation procedures to the frequency domain are applied in the three independent temporal domains  $t$ ,  $t_1$  and  $t_2$ . For each frequency axes,  $\omega$ ,  $\omega_1$  and  $\omega_2$  we obtain the spectroscopic information, the quadrupole nuclei density and the local distribution of quadrupole nuclei orientation present in the sample, respectively.

### TWO-DIMENSIONAL PHASE-MODULATED NUTATION NQR SPECTROSCOPY

F. VACA CHÁVEZ, F. CASANOVA, H. ROBERT, D. PUSIOL

*Facultad de Matemática, Astronomía y Física, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba- 5000-Ciudad Universitaria. Argentina.*

It has been demonstrated that the asymmetry parameter of quadrupolar nuclei can be determined by the application of a two-dimensional nutation NQR technique to powder samples.

The nutation method is based on the principle that the effective radiofrequency strength experienced by quadrupolar nucleus depends on the relative orientation of the principal axes of the electric field gradient tensor with respect to the RF field direction. For powder specimens Fourier transformation yields powder patterns in the nutation frequency dimension whose shapes reveal the distribution profiles of  $\lambda(\theta, \phi)$ . The characteristic  $\eta$ -dependent singularities in the nutation lineshapes, that were shown by Harbison *et. al.*, allow one to determine the asymmetry parameter in a straightforward way. In this method, signals are measured as a function of the length of a square excitation pulse, applied with an homogeneous RF field, and the nutation frequency content becomes encoded in the amplitude of the FIDs. In rotating-frame NMR techniques, a more favourable method is the phase-modulated variant which results in  $\sim 40\%$  gain in sensitivity in comparison with the amplitude-encoding technique. The use of the phase-modulated approach has not been studied yet for NQR encoding techniques.

In this work, we described the application of the phase-encoding variant for rotating-frame NQR methods. The amplitude-modulated experiment can be converted to a phase-modulated form if the variable square pulse is followed by an uniform  $90^\circ$  pulse that is  $90^\circ$  out-of-phase with the preceding one. A quantum description of the phase-encoding experiment is provided for spin- $\frac{3}{2}$  system and the sensitivity of the Fourier reconstructed spectrum is discussed.

## DESENVOLVIMENTO, CARACTERIZAÇÃO E PROPRIEDADES DE MATERIAIS (Propriedades Ópticas, Estrutura Cristalina e Instrumentação) – 13/06/97

### IDENTIFICAÇÃO DE ARGILAS EM SOLOS SEDIMENTARES POR DIFRAÇÃO DE RAIOS-X

DIANA RODRIGUES GUERRA, JOSÉ HÉLIO SARAIVA GIRÃO, LINDOMAR R. DAMASCENO DA SILVA  
*UFC-Departamento de Química Orgânica e Inorgânica*  
 JOSÉ MARCOS SASAKI, JOSÉ DE ARIMATEA FREITAS E SILVA, CLEUTON FREIRE, JOSÉ EDUARDO V. DE MORAES, FRANCISCO ERIVAN DE ABREU MELO, JOSUÉ MENDES FILHO  
*UFC-Departamento de Física*

As argilas consistem numa classe de minerais de elevado potencial tecnológico. No ramo da cerâmicas, por exemplo, destacam-se as pesquisas com refratários e supercondutores. Além dessas, se verifica pesquisas cujo objetivo tem sido a utilização como adsorventes e catalisadores para o refino de petróleo. Porém, a sua utilização com estas finalidades, passa pela necessidade de se conhecer os constituintes químicos e as características estruturais, bem como a gênese das mesmas, visando compreender os processos diagenéticos de formação desses minerais. Como isso, foram realizadas análises por difratometria de pó de raios-X para identificar as argilas presentes em solos sedimentares de cinco localidades do Vale do Jaguaribe, no estado do Ceará. Em virtude da constante drenagem a que estão sujeitos, tem sido verificado teores relativamente altos de argilas, em proporções que variam de 38 a 51 por cento. Os difratogramas revelaram que as fases cristalinas mais pronunciadas são quartzo, a caulinita, a haloisita 7A e a ilita. A intensa coloração avermelhada de um dos solos está associada a presença de goetita. A identificação desses constituintes minerais representa um dado extremamente relevante, pois permitiu uma compreensão, ainda que não conclusiva, da diagênese dos solos em função de alterações hidrotermais, e por intemperismos climáticos. Os tipos de argilas presentes nos cinco solos em questão, teve uma identificação decisiva na escolha do solo a ser utilizado na pesquisa e desenvolvimento de suportes para catalisadores e adsorventes, e peneiras moleculares.  
 FINEP/CNPq/CAPES/FUNCAP

### Determinação das Estruturas de Complexos de Rutênio por Métodos Cristalográficos

MARCOS R. BONFADINI, GLAUCIUS OLIVA  
*Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo*  
 ALZIR BATISTA  
*Departamento de Química da Universidade Federal de São Carlos/DQ-UFSCar*

Nos últimos anos a catálise tem sido o objeto de estudo intenso devido à sua importância acadêmica e tecnológica. Do ponto de vista acadêmico pode-se citar a determinação do mecanismo de reação na catálise homogênea. Do ponto de vista tecnológico, a utilização de catalisadores homogêneos ou heterogêneos possibilitou a síntese de novas substâncias e a produção de substâncias já conhecidas, porém à custos menores. Dentre os catalisadores homogêneos destacam-se os complexos de metais de transição (Rádio, Iridio, Ferro e Rutênio). Eles têm sido intensamente estudados devido ao seu potencial em diversos tipos de reações: hidrogenação de olefinas ( $\text{RuCl}_2(\text{PPh}_3)_3$  e  $\text{HRuCl}(\text{PPh}_3)_3$ ), hidroformilação de olefinas e acetilenos ( $\text{Ru}(\text{CO})_3(\text{PPh}_3)_3$ ) e isomerização de olefinas ( $\text{RuCl}_2(\text{PPh}_3)_3$ ). Mais recentemente os complexos de Rutênio têm sido testados no tratamento de tumores malignos. A atividade anti-tumoral foi estudada em Leucemia P388, Carcinossarcoma de Walter 256 e Sarcoma 180 com obtenção de resultados positivos em todos. Em particular, para animais portadores de Leucemia P388 os resultados encontrados indicam que quando tratado com complexo de Rutênio, estes apresentam um aumento do período de vida, além de uma sensível diminuição de efeitos colaterais. Um aspecto importante no estudo de complexos com o objetivo de usá-los como catalisadores, é a determinação de uma estrutura tridimensional uma vez que desta dependem as interações entre o substrato e catalisador. O objetivo deste trabalho consiste na determinação das estruturas dos complexos de Rutênio por métodos cristalográficos e estudo de suas propriedades catalíticas.

### POLINÔMIOS AUTO-SIMILARES PARA CADEIAS DE FIBONACCI DE QUARTA ORDEM.

B. J. O. FRANCO, K. BALZUWEIT, I. C. S. GOMES  
*UFMG*

Recentemente, sistemas quasiperiódicos passaram a despertar grande interesse com a descoberta de ligas quasicristalinas (quasicristais) com simetrias pentagonais, octogonais, etc. bem como com a produção de quasicristais unidimensionais (cristais Fibonacci) pela técnica MBE. Trabalhos recentes, consideram, no estudo de problemas eletrônicos de um quasicristal 1D,

o uso do método da matriz de transferência. O traço da matriz de transferência fornece polinômios que têm uma estrutura auto-similar. Consideramos aqui a determinação de polinômios auto-similares para uma cadeia de Fibonacci de quarta ordem, definida por  $A \rightarrow ABCD, B \rightarrow A, C \rightarrow B, D \rightarrow C$ . O número de termos da sequência é dado por  $S_n = S_{n-1} + S_{n-2} + S_{n-3} + S_{n-4}$  com  $S_0 = S_1 = S_2 = S_3 = 1$ . Uma sequência de Fibonacci de quarta ordem corresponde a uma irracionalidade não quadrática. Irracionalidades não quadráticas referem-se a sistemas físicos altamente instáveis e com efeito ainda não foi obtido o quasicristal correspondente. Fazemos uso do modelo TB (Tight-Binding), para o qual a equação de Schrodinger discreta tem a forma  $t_{i+1}\Psi_{i+1} + t_{i-1}\Psi_{i-1} = E\Psi_i$ , onde  $t_i$  são as integrais de "hopping" entre os sítios  $i$  e  $i+1$  e apresentam, no nosso caso, quatro valores associados a quatro tipos de átomos: A, B, C e D. Na forma matricial temos:  $\Psi_{i+1} = T(i)\Psi_i$ , onde  $T(i)$  é uma matriz  $2 \times 2$ . Uma relação de recorrência para o produto de matrizes  $T(i)$  nos conduz, após tomar os traços, aos polinômios  $F_n(x)$ . Os polinômios encontrados possuem uma estrutura auto-similar. São funções contínuas e apresentam um parâmetro  $r$  que representa a intensidade da quasicontinuidade. Seus graus são os números de Fibonacci de quarta ordem (1, 4, 7, 13, 25, 45, ...). Se fizermos  $r = 1$  (cristal periódico), teremos os polinômios de Chebyshev de primeira espécie.

### STUDY OF THE DIAMOND CRYSTAL BY SEMIEMPIRICAL METHODS

ANTONIO LUIZ FERNANDES MARQUES

DFQ/ICI/EFEI

MARÍLIA JUNQUEIRA CALDAS

DFMT/IFUSP

Diamond is a technologically interesting material, and novel growth techniques (e.g. polycrystalline chemical vapor deposited (CVD) diamond) that produce material cost-compatible with other large-gap semiconductors have fostered the search for Carbon-based optoelectronic devices. The theoretical study of complex or disordered semiconductor structures through *ab-initio* techniques, always difficult because of the large number of atoms that need to be included in a supercell, is hindered in the case of Carbon by the large number of plane waves that are needed in the basis set. An alternative is to apply semiempirical Quantum-Chemistry techniques, very successful for Carbon chemistry: the problem here is that the  $s - p^3$  hybridization useful for Diamond-based structures enters with very little weight in the usual molecular parametrizations. We present a procedure for the study of structural properties of complex Carbon-based materials, consisting of an implementation of the self-consistent semiempirical MNDO/AM1 (Modified Neglect of Diatomic Overlap/Austin Model 1) for periodic systems in Bloch limit,

within the supercell approach; and a new parametrization, which we call AM1/Crystal, that is appropriate to the crystalline environment, but to be used also in the usual molecular code. This method was implemented in our group, but was parametrized only for Si and O. Our results for the Diamond crystal are promising; for the lattice parameter we have an error of -1.4% compared to experimental results, while the numbers obtained with the original parametrizations of AM1 and PM3 (Parametric Method 3, the most successful variant of AM1 up to now) are -2.7% and -4.7% respectively. For the diamond bulk modulus, where the strength of a method for predicting structural properties is best tested, we are able to obtain an error of 3.5%, as compared to 170% and 155% for AM1 and PM3, respectively. Of course, for the study of complex systems where charge density is more localised, it is very important that our parametrization attains sufficient accuracy when describing small molecules. We therefore tested our parameters in reproducing also the geometry (interatomic distances, angles) and vibrational modes of methane ( $CH_4$ ), ethane ( $C_2H_6$ ) and benzene ( $C_6H_6$ ), among others. For all these molecules we have obtained results in good agreement with the experimental data.

*Acknowledgements:* Calculations done using the facilities of the Laboratório de Computação Científica Avançada LCCA-USP; A.L.F. Marques acknowledges support from CAPES.

### AMPLIFICADOR SÍNCRONO BASEADO EM MICROCOMPUTADOR

CÍNTHIA PIAMONTEZE, LEANDRO R. TESSLER

UNICAMP

Qualquer medida experimental envolve ruído, ou seja, uma componente indesejável do sinal medido aleatória no tempo. Os amplificadores síncronos são usados em física experimental como um meio de recuperar o sinal do sistema de dentro do ruído. O método síncrono consiste em modular a excitação do sistema com uma frequência conhecida de referência e filtrar todas as demais frequências detectadas. Desta forma, pode-se obter apenas o sinal com a mesma frequência e com uma certa fase definida em relação à excitação. Em um amplificador síncrono analógico isto é feito por um oscilador/demodulador operando na frequência da referência. Há alguns anos apareceram no mercado amplificadores síncronos digitais, nos quais o sinal de entrada é digitalizado, multiplicado por uma função seno ou cosseno com mesma frequência e fase da referência e integrado no tempo. Os amplificadores síncronos analógicos são melhores a altas frequências enquanto os digitais apresentam uma performance muito superior a baixas frequências. Neste trabalho apresentamos um amplificador síncrono digital que consiste em um microcomputador e uma placa conversora A/D de 12 bits. Toda a parte de processamento de sinal é feita

em linguagem de alto nível, tornando o sistema muito flexível. O sistema foi projetado para utilização em medidas ópticas de muito baixa frequência de excitação (alguns Hz), mas pode operar seguramente até alguns kHz, visto que faz uma leitura de sinal a cada  $100\mu s$ . A reserva dinâmica, parâmetro usado para caracterizar um amplificador síncrono (razão entre o maior ruído permitido e o menor sinal detectável em dB) em nosso amplificador é 72dB. Isto se compara com sistemas analógicos comerciais (tipicamente 60dB) e com sistemas digitais comerciais (100dB para o estado da arte usando um conversor A/D de 18 bits). Nosso trabalho deve continuar com aperfeiçoamentos no programa e a montagem de pré-amplificadores de baixo ruído para aplicações em medidas de fotoluminescência.  
Apoio: CNPq/PIBIC e PADCT

### ESTUDO CRONOLÓGICO DE SÍTIOS ARQUEOLÓGICOS DO ESTADO DO MATO GROSSO DO SUL

S. H. TATUMI

*Faculdade de Tecnologia de São Paulo - UNESP*

G. R. MARTINS, E. M. KASHIMOTO

*Universidade Federal de Mato Grosso do Sul, UFMS*

W. E. F. AYTA, S. WATANABE

*Instituto de Física da USP*

As pesquisas estão sendo realizadas desde de 1993, objetivando, essencialmente, resgatar, através de trabalhos de campo sistemáticos, sítios arqueológicos situados em zonas à serem impactadas direta ou indiretamente pela implantação do Complexo Hidrelétrico de Porto Primavera. Vários sítios arqueológicos foram encontrados por pesquisadores da UFMS. O processo de datações pelo método da termoluminescência (TL) foi efetuado em amostras cerâmicas de sítios arqueológicos da margem direita do rio Paraná, selecionadas a partir de sua representatividade na área. Foi encontrado idades no intervalo de 140 a 1250 anos; uma amostra de cerâmica foi datada por TL em  $(1250 \pm 100)$  anos d.c. e a mesma foi datada método do Carbono 14 (Centre de Faibles Radioactivités, Laboratoire Mixte CNRS - CEA, France) e foi encontrada a idade de  $1015 \pm 75$  anos d.c, podemos observar que a idade obtida pelos métodos foram próximas. O método usado na datação por TL foi o de doses aditivas, a TL observada é proveniente de grãos de quartzo, obtidos através de uma limpeza da cerâmica com um tratamento químico com ácido acético, fluorídrico e clorídrico. A TL foi obtida por uma leitora TL Harshaw, e por grãos naturais (que passaram apenas pelo tratamento químico mencionado anteriormente) e irradiados em diferentes doses de radiação- $\gamma$  de uma fonte de Co-60 (IPEN-CNEN). A dose anual da radiação natural do local foi determinada a

partir de dosímetros termoluminescentes contendo cristais de fluorita. O trabalho de campo dos arqueólogos continua e na etapa atual estão sendo selecionados os sítios mais importantes, que serão analisados com maiores detalhes, onde as cerâmicas serão coletadas em diferentes níveis de profundidade. (Projeto financiado pela Fapesp e Cesp).

### DATAÇÃO DE DUNAS EÓLICAS DO MÉDIO RIO SÃO FRANCISCO, ESTADO DA BAHIA.

S. H. TATUMI

*Faculdade de Tecnologia de São Paulo - UNESP*

A. M. F. BARRETO, K. SUGUIO

*Instituto de Geociência da USP*

N. TSUNETO

*Nara University of Education, Japan*

D. SENGUPTA, S. WATANABE

*Instituto de Física da USP*

Amostras de paleodunas encontradas na região do Médio Rio São Francisco, entre a margem esquerda do Rio São Francisco e a Serra do Estreito foram datadas por Termoluminescência através do Método do Branqueamento Total. As idades encontradas em 16 amostras de sedimentos eólicos, coletadas na sua maioria a uma profundidade de 0,5 m, estão na época do Quaternário variando em um intervalo de  $10^3$  a  $10^4$  anos d.c. As doses anuais da radiação natural do local foram determinadas através de um detector de Germânio específico para baixas doses; os valores determinados estão em um intervalo de  $(607 \pm 80)$  até  $(1603 \pm 20) \mu$  Gy/ano. A estabilidade térmica do pico TL de 590 K, usado neste caso foi estudado e as curvas de emissão TL foram ajustadas pela cinética de segunda ordem, com os parâmetros  $E=1,7$  eV e  $s=1,2 \times 10^{14} s^{-1}$ ; com este ajuste observamos que o pico de 590 K não é um pico simples, sendo composto por um outro com a temperatura inferior de 550K, este começa a ficar mais significativo após uma dose de 50 Gy de radiação- $\gamma$  de Co-60. Esta interferência foi observada no Teste do Platô, onde o platô torna-se indistinto para amostras com doses superiores a 50 Gy; por esse motivo a datação dessas amostras foi feita com base nas amostras com doses inferiores a 50 Gy. O decaimento da TL do quartzo em função da incidência da luz solar foi observado e determinamos a TL residual de cada amostra, que variou de amostra para amostra. Em média obtivemos uma TL residual de 20% em relação à TL natural da amostra. A determinação das idades das paleodunas ajudam na investigação das mudanças paleoclimáticas da região. (Projeto financiado pela Fapesp).

## ESPECTRO DE ABSORÇÃO DE ÓLEOS VEGETAIS

SANCLAYTON GERALDO CARNEIRO MOREIRA, JOÃO GUILHERME, PETRUS ALCANTARA JR  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARA

Vários pesquisadores têm interesse no estudo de óleos. O conhecimento detalhado de sua composição e de suas propriedades permitirá o seu uso em dispositivos no mundo moderno. O óleo de buriti tem nos chamado a atenção por apresentar várias anomalias na sua transição sólido-líquido na faixa de temperatura entre  $T_1 = -100^\circ \text{C}$  e  $T_2 = 40^\circ \text{C}$ , também por ser totalmente opaco à luz verde  $\lambda_1 = 543 \text{ nm}$  e ser transparente a luz vermelha  $\lambda_2 = 632 \text{ nm}$ . Devido a essas propriedades fizemos um espectro completo entre 350 nm e 800 nm para conhecermos a partir de que comprimento de onda a luz é absorvida pelo óleo. Para essas medidas usamos um sistema fabricado pela ORIEL constituído por uma lâmpada de Xenônio com potência total de 1000 W, um monocromador duplo modelo 7240 e um fotodetector ligado a um microcomputador através de uma interface. A análise dos resultados revela uma total absorção da luz na faixa que vai de 350 nm até 523.72 nm. A partir do  $\lambda = 523.72 \text{ nm}$ , começa haver transmissão da luz pelo óleo e esta cresce de forma aproximadamente linear, com o comprimento de onda até aproximadamente 578.13 nm. Outro fato interessante é que existem alguns pontos de coincidência entre as curvas da lâmpada com e sem o óleo. Indicando que o óleo é totalmente transparente para estes comprimentos de onda, que são 695.35 nm, 720.46 nm e a partir de 766.51 nm a coincidência é total até 800 nm. Concluímos que o óleo de buriti pode ser usado como filtro óptico para luz com comprimentos de onda na faixa 350 nm até 523.72 nm, sendo portanto um excelente protetor solar por "cortar" completamente as radiações ultravioletas.

## PROJETO, CONSTRUÇÃO, CALIBRAÇÃO E AUTOMAÇÃO DE UM FORNO ELÉTRICO ESPECIAL PARA TRATAMENTO TÉRMICO EM ATMOSFERA CONTROLADA

JOHN KENNEDY DE OLIVEIRA FERNANDES, MÁRIO ERNESTO GIROLDO VALERIO, JOSÉ FERNANDES DE LIMA

Depto. de Física - UFS

As propriedades dos sólidos de uma maneira geral podem sofrer alterações consideráveis quando submetidos a tratamentos térmicos prévios às medidas. Estes efeitos podem ser obtidos modificando-se as condições nas quais o tratamento térmico é feito. Neste projeto construímos um forno no qual todo o tratamento térmico é feito dentro de condições que podem ser especificadas pelo usuário e controladas por computador. Nos fornos comerciais, para tratamentos térmicos, a atmosfera

à qual está imerso o material não se mantém quando se deseja fazer um resfriamento rápido após um tratamento térmico. No nosso caso este problema é resolvido pela conexão da câmara de resfriamento ao forno o que nos dá melhores condições para um tratamento adequado. O forno foi projetado e construído em cinco partes básicas: i) o forno (região quente) propriamente dita, ii) conexões para a bomba de vácuo e gás, iii) pistão para locomoção da amostra, iv) câmara de resfriamento, v) saída de gás. Além disto foi acoplado ao mesmo as centrais de gases e de ar comprimido, bem como um microcomputador XT, para controle de todo processo. Para a automação foi construído a interface sistema/computador que controla a temperatura e o tempo de tratamento. A medida de temperatura é feita por termopares localizados nas partes i) e iv). O trabalho encontra-se no estágio final de automatização do forno, tendo sido projetadas, construídas e montadas as demais partes (CNPq/UFS).

## Magnetometria por SQUID em Campos Magnéticos Altos

ALBERTO EINSTEIN PEREIRA DE ARAUJO,  
ALEXANDRE RICALDE RODRIGUES, FERNANDO LUIS DE ARAUJO MACHADO, KENIA CARVALHO MENDES  
UFPE

Montamos um sistema SQUID para magnetometria que opera de 1.5 a 300K, em campos magnéticos de até  $H=5000$  e utilizando um gradiômetro, de segunda ordem. O valor do momento magnético pode ser determinado tanto pela leitura da tensão do gradiômetro quanto através do "fit" da dependência da tensão do gradiômetro em função da posição da amostra. O sistema foi testado medindo a transição supercondutora e o campo crítico do chumbo. Os valores obtidos são muito próximos dos valores existentes na literatura,  $\Delta H_c/H_c (T=0) < 4\%$  e  $\Delta T_c/T_c(H=0) < 1\%$ . Com o objetivo de estender as medidas do presente sistema para campos de até 8T utilizando a técnica de extração, construímos uma haste movida por um motor de passo controlado por computador que serve para posicionar a amostra no interior do gradiômetro. O deslocamento da haste é  $5\mu\text{m}/\text{passo}$ . O sistema foi utilizado também para caracterizar uma bobina supercondutora de 8T. Para  $H \geq 5000$  observamos uma variação temporal do sinal do SQUID,  $V_{s,q} \propto Ct$ , onde  $C$  é um parâmetro e  $t$  é o tempo. Observamos ainda que  $C$  aumenta com o valor de  $H$  e decai lentamente com o tempo. Esta dependência resulta basicamente do decaimento de  $H$  ( $10^{-7}/\text{hr}$ ). No presente trabalho apresentaremos detalhes do sistema SQUID e da haste, bem como medidas da susceptibilidade AC na liga metálica amorfa CoFe-SiB, para  $f < 10\text{kHz}$  e  $H < 500\text{Oe}$ . Trabalho parcialmente financiado pela FINEP, CAPES, CNPq, FACEPE.

## STRUCTURAL STUDY OF DISTORTED PEROVSKITES BY X-RAY RIETVELD METHOD

OSCAR ARMANDO GARCÍA PÉREZ

*Eduardo Granado M. Silva*

JOSÉ. A. SANJURJO

*Iris L. Torriani*

CARLOS RETTORI

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

S. OSEROFF

*San Diego State University, San Diego, California 92182*

The distorted variants of the perovskite structure  $ABO_3$  have attracted continuous attention as a consequence of the large variety of physical phenomena presented by materials with this structure. In addition, many of these phenomena are closely related to structural distortions from the ideal cubic structure. In this work we present powder X-Ray diffraction studies on some of these systems, e.g.,  $SrRuO_3$  and  $La_{1-x}Ca_xMnO_3$ .  $SrRuO_3$  is an interesting structure because it is a very rare case where the appearance of ferromagnetic moments below  $T_c$  is solely owing to the 4d transition metal ion,  $Ru^{4+}$ .  $La_{1-x}Ca_xMnO_3$  has recently attracted renewed attention for its strong correlation between structural, magnetic and transport properties. The crystal structure for these samples were refined by means of the Rietveld method. This method is especially designed to deal with powder diffraction data and leads to the obtention of detailed structural refinement information on polycrystalline materials. In both cases we performed the structural refinement assuming the orthorhombic space group  $Pbnm$ . In the case of the polycrystalline  $SrRuO_3$  our results agree very well with the existing data for the orthorhombic structure. In the case of the  $La_{1-x}Ca_xMnO_3$  our results indicate that the orthorhombic distortion in the  $La_{1-x}Ca_xMn_{1-x}Mn_xO_3$  system dramatically decreases with increasing  $x$ , becoming pseudo-cubic even for small doping. We conclude that this behavior is a consequence of a change from cooperative static Jahn-Teller distortion of  $Mn^{3+}$  in  $LaMnO_3$  to a dynamical distortion in  $La_{1-x}Ca_xMnO_3$ , caused by the itineracy of the outer  $Mn e_g$  electron, induced by doping.

## MEDIDAS DE RESOLUÇÃO DE UM ESPECTRÔMETRO DE MASSA POR TEMPO DE VÔO.

EDUARDO L. A. MACCHIONE, K. KOIDE, JOSÉ H. HIRATA, SUZANA S. VASCONCELOS, ERLEJ R. LIMA, FLÁVIO A. HONORATO, JOSÉ R. V. ALVES, O.

DIETZSCH

*USP*

Foi construído e está em operação um espectrômetro de massa por tempo de vôo de 110 cm de comprimento, que utiliza os fragmentos de fissão do  $^{252}Cf$ ,

como íons primários para provocar a dessorção e ionização de moléculas da superfície de uma amostra sólida. Nessa técnica, dois fragmentos de fissão são utilizados: enquanto um deles atinge a amostra provocando a ionização e emissão de íons secundários, o outro incide em um detetor ("start") produzindo um sinal eletrônico que dispara a medida do tempo de vôo dos íons. Os íons secundários emitidos da superfície são acelerados em direção a um tubo de vôo que é mantido em um potencial diferente do potencial da amostra, e viajam através dele com velocidade constante. No final do tubo há um segundo detetor ("stop") que emite um sinal eletrônico ao ser atingido pelos íons. A medida do tempo decorrido entre a emissão dos sinais dos dois detetores (tempo de vôo) permite a determinação da razão  $m/q$  dos átomos, moléculas e aglomerados iônicos provenientes da superfície da amostra. Uma resolução temporal de  $232 \pm 4$  ps foi obtida para o tempo de vôo de íons de  $H^-$  de 18 keV. Os parâmetros geométricos contribuem com  $79 \pm 9$  ps para a resolução total. Esses valores dependem da tensão de aceleração dos íons secundários. Usando uma amostra de CsI, foi obtida uma resolução em massa de  $m/\Delta m \approx 1600$  para o agregado molecular  $Cs_3I_4$  de 906,4 u. Este espectrômetro foi desenvolvido a partir de um protótipo de 25cm de comprimento construído anteriormente no LIP, que apresentou uma resolução  $m/\Delta m \approx 250$ .

## SISTEMA PARA GERAÇÃO DE PROGRAMAS DE AQUISIÇÃO DE DADOS DE USO GERAL.

PEDRO ARAÚJO NETO, CARLOS YUJIRO SHIGUE

*Departamento de Engenharia de Materiais, Faculdade de Engenharia Química de Lorena*

No estudo e caracterização de materiais, diferentes técnicas são empregadas para as medidas das propriedades de transporte, magnéticas, térmicas, elétricas e mecânicas. Usualmente, cada técnica requer o uso de instrumentação eletrônica constituída por aparelhos de diferentes fabricantes, especificações e modelos. A montagem de um sistema automatizado de medidas envolve a elaboração de um programa pelo qual o computador assume o papel de controlador de uma série de instrumentos, placas de conversão A/D e cartões de condicionamento de sinais, conectados através de uma interface serial RS-232, paralela GPIB ou por interfaceamento direto ao barramento do computador. Cada instrumento por sua vez comunica-se com o controlador por meio de comandos específicos a ele. Neste trabalho apresentamos um sistema para geração de programas de aquisição de dados que está sendo usado na montagem de experimentos controlados por microcomputador para medi-

das de resistividade, efeito Hall, transição supercondutora sob campo magnético, indutância, condutividade térmica e teste de fios e magnetos supercondutores. As principais características do sistema são: programação e execução em ambiente MS-DOS; telas textuais orientadas a menus; capacidade de exibição de diversos gráficos simultaneamente; personalização de telas, telas e comandos; inclusão e criação de rotinas e bibliotecas de comandos específicas de instrumentos e dispositivos fornecida pelo usuário; uso de memória estendida para armazenamento dos dados e ambiente de edição e compilação integrado. Para o usuário, a geração do programa de medida é transparente e não requer o uso de uma linguagem de programação, embora o sistema permita a manipulação de diversas funções através de rotinas em linguagem C.

### ELETROIMÃ PARA SEPARAÇÃO MAGNÉTICA DE MAGNETOLIPOSSOMAS

LUIZ FABRIZIO STOPPIGLIA, LEANDRO R. TESSLER  
UNICAMP

Proteínas globulares em colóide podem ser separadas por espécie a partir de sua fixação em partículas de magnetita. As proteínas contendo íons metálicos aderem diretamente ao metal, enquanto as demais são ligadas quimicamente em lamelas fosfolipídicas construídas *in vitro* e nucleadas pela magnetita (magnetolipossomas). Estes lipossomas podem ser precipitados por uma força magnética intensa, com recuperação posterior de 99% da magnetita. O processo é muito barato, contrastando com a dificuldade normalmente encontrada em isolar esse tipo de proteína. A força magnética sobre as partículas depende do produto  $B \nabla B$  ( $B$  = campo magnético), por isso o campo deve ser intenso e também inhomogêneo (o gradiente pode ser gerado fazendo o campo atravessar uma lâmina magnética). Como aparato para obter o campo, utiliza-se um eletroímã com um par de peças polares de ferro nucleando bobinas solenoidais. O gap entre as peças é preenchido por capilares contendo lâmina magnética, nos quais o colóide com os magnetolipossomas circula. Desta forma, o campo necessário é da ordem de 1T. Como a permissividade magnética do ferro varia muito com a indução, as dimensões do gap, das peças polares e das bobinas foram otimizadas aproveitando o pico de permissividade do material em  $H = 1.24$  gauss, assim maximizando a eficiência do magneto. Sendo a permissividade do metal muito superior à do ar, a continuidade das linhas de campo praticamente anula a indução magnética externa à montagem  $B_{ar} = B_{Fe} \frac{\mu_{ar}}{\mu_{Fe}}$  onde  $\mu_{ar} \sim 10^{-7}$  e  $\mu_{Fe} \sim 10^3$ , o campo fica concentrado no gap evitando efeitos sobre equipamentos próximos. O magneto opera com baixa voltagem e baixa dissipação, permitindo seu uso sem refrigeração forçada.

(Apoio financeiro: PIBIC/CNPq e PADCT)

### ANÁLISE QUANTITATIVA DA FORMAÇÃO DE TITANATO DE ALUMÍNIO POR DIFRAÇÃO DE RAIOS X, ATRAVÉS DO REFINAMENTO DE RIETVELD

ELIZABETH FANCIO+, ROSA M. R. PASOTTI, LUIS  
G. MARTINEZ, LUIS A. GENOVA, NELSON B. LIMA  
*Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares -  
IPEN-CNEN/SP*

O titanato de alumínio  $Al_2TiO_5$  é um material de grande interesse em aplicações tecnológicas por apresentar alto ponto de fusão aliado a baixos coeficientes de condutividade e expansão térmica. A formação, estabilização e densificação desta fase a partir de sinterização de misturas equimolares de  $Al_2O_3$  e  $TiO_2$  vem sendo estudada através da variação de parâmetros tais como tempo e temperatura de sinterização e a adição de dopantes que melhorem a sua estabilidade e favoreçam a sua densificação. (1) A quantificação da fração de  $Al_2TiO_5$  formada, que é um fator importante na avaliação do material obtido, vinha sendo feita usualmente pela comparação de raios de difração de raios X pelo método de adição de padrão interno. Está sendo, agora, iniciada a aplicação do método de refinamento de Rietveld, com e sem a adição de padrão interno, por meio do programa DBWS9411, que fornece a porcentagem em peso e a fração volumétrica de cada fase presente na amostra. Os resultados da análise quantitativa por refinamento de Rietveld têm se mostrado mais confiáveis que os resultados obtidos das intensidades das raias, principalmente para amostras com baixas frações volumétricas da fase analisada, onde a análise convencional de altura ou áreas dos picos apresenta maiores desvios. Para frações volumétricas maiores que 80% os resultados são, em geral, concordantes. Neste trabalho são apresentados resultados obtidos com diferentes refinamentos pelo método de Rietveld, nos quais se variou o número e o tipo de parâmetros refinados e a função que descreve o perfil, para amostras com e sem a adição de padrão interno de silício. Estes resultados são comparados com os resultados obtidos pelo método convencional. São, ainda, apresentados resultados de densidade e micrografias das amostras, e discutido o papel do dopante na formação do titanato de alumínio e na densificação do material.

(1)R. M. R.Pasotti, E. Fancio, L. G. Martinez, L. A. Genova, "Avaliação Quantitativa da Formação de Titanato de Alumínio"; a ser apresentado no Congresso Anual da Associação Brasileira de Cerâmica de 1997.  
+ Bolsista de mestrado CNPq

**SISTEMA DE AQUISIÇÃO E CONTROLE  
DE TEMPERATURAS PARA A CAMARA  
DE ALTAS-TEMPERATURAS DO  
DIFRATROMETRO DE RAIOS-X RIGAKU  
RU-200**

MILTON BASTOS DE SOUZA

*CETIND - SENAI-Ba, Escola Politecnica - UFBA*

PAULO CESAR MACHADO DE ABREU FARIAS

*Depto de Ciencias Exatas - UEFS, Escola Politecnica -  
UFBA*

IURI MUNIZ PEPE

*Instituto de Fisica - UFBA*

Este trabalho esta sendo desenvolvido no sentido de fazer o "up-grade" do goniometro de raio-X do Laboratorio de Cristalografia do Instituto de Fisica da UFBA. Consta de um elemento sensor de temperatura (termopar Pt-PtRh 13%), um circuito de tratamento e condicionamento do sinal a base de Amplificadores Operacionais e uma placa de aquisicao de dados de 10 Bits que mede e armazena a temperatura da camara (forno), representando graficamente em função do Tempo (tempo real) na tela do PC o rastreamento de um controlador digital proporcional, integral e Derivativo projetado para gerar rampas de temperaturas com diferentes tempos de subida, objetivando a obtencao de erro nulo. Com os dados adquiridos e utilizando o laboratorio de matrizes (MatLab) foi construido o modelo da camara no dominio de Laplace (dominio S). A partir do modelo da camara e com auxilio do software Protuner foi projetado um modelo para o controlador PID (Proporcional Integral e Derivativo) tambem no dominio S. Este modelo e projetado de forma que o controlador apresente caracteristica otima de desempenho na execucao do algoritmo de controle para aquelas caracteristicas do sistema (forno). Para da maior robustez ao trabalho reprojctamos o controlador utilizando as ferramentas de controle classico tais como o lugar das raizes, Redes Avanço-Atraso, Diagrama de Bode, etc. De posse do modelo no dominio das frequencias e utilizando a teoria de sistemas amostrados, transportamos o modelo para o dominio Z, analizamos a estabilidade do sistema discreto e geramos o algoritmo de controle do fluxo de energia entregue ao forno.

**ANÁLISE DOS ESPECTROS DE  
ABSORÇÃO INFRAVERMELHO DE  
AMINOÁCIDOS**

JOSÉ RAIMUNDO RODRIGUES SIQUEIRA, ANTÔNIO  
JEFERSON DE DEUS MORENO, ADAILSON SILVA

FRANÇA

UFMA

Embora vários aminoácidos tenham sido extensivamente estudados, principalmente por espectroscopia Raman, a classificação de vários modos ainda carecem de estudos. Seus espectros vibracionais apresentam interesse tanto do ponto de vista físico como biofísico. Estes materiais, invariavelmente possuem baixas simetrias, e alguns deles possuem grandes moléculas. Seus espectros de absorção de luz infravermelha, de acordo com a teoria, devem apresentar regiões com elevada densidade de picos. Nestes casos, as informações obtidas em cada espectro nem sempre é suficiente para a efetuação de classificação precisa de todos os modos vibracionais. Frequentemente é necessário usar de artifícios como a deuteração e análise da evolução de seus parâmetros com a temperatura ou pressão. Em trabalhos recentes, apresentamos estudo detalhado de espectroscopia Raman polarizado da l-asparagina monohidratada. Estes resultados e os dados encontrados em alguns trabalhos publicados na literatura foram usados para a classificação dos modos normais de vibração dos espectros de absorção de luz infravermelha da l-asparagina, dl-alanina e l-valina. Foi observado que alguns modos de todos os aminoácidos estudados, apresentam peculiaridades que são associadas aos tipos de ligações no interior da célula unitária. Por exemplo, todos os modos de estiramento de estruturas ligadas ao grupo amino apresentam elevada largura de linha. A explicação deste efeito é baseada na presença de termos anarmônicos na energia potencial associada com estas vibrações. Comparando os modos anarmônicos destes materiais podemos concluir que as contribuições anarmônicas dos modos vibracionais da l-valina são acentuadamente maiores dos que as contribuições equivalentes na dl-alanina e l-asparagina.

## DESENVOLVIMENTO, CARACTERIZAÇÃO E PROPRIEDADES DE MATERIAIS (Defeitos em Materiais)

### DESENVOLVIMENTO, CARACTERIZAÇÃO E PROPRIEDADES DE MATERIAIS (Filmes e Metais) – 13/06/97

#### FILME FINO DE $CeO_2$ - $TiO_2$ OBTIDO VIA PROCESSO SOL-GEL, UTILIZANDO UM SOL ESTABILIZADO POR ACETILACETONA

JOSÉ GERIVALDO DOS SANTOS DUQUE, MARCELO ANDRADE MACÊDO  
UFS

Uma das características físicas mais importante do filme fino de  $CeO_2$ - $TiO_2$  é a possibilidade de alojar íons alcalinos na sua estrutura ( $H^+$  ou  $Li^+$ ). A formação da sua estrutura morfológica depende fortemente da rota de preparação. Uma das rotas de preparação do filme fino de  $CeO_2$ - $TiO_2$  é a dissolução de um sal de cério e de um alcóxido de titânio em um solvente orgânico. Neste trabalho foi utilizado o etanol como solvente e a acetilacetona (A) como estabilizante na razão molar de  $Ti/A = 2$ . O sol preparado permaneceu estável por mais de 1 mês quando armazenado em geladeira a  $5^\circ C$  e a concentração foi de 0,2 M. Um vidro recoberto por um filme fino condutor eletrônico foi mergulhado neste sol numa velocidade de 10 cm/min, e em seguida, o filme fino crescido neste substrato foi seco a  $100^\circ C$  por 15 min e densificado a  $500^\circ C$  por 5 min. Este processo foi repetido até se obter filmes com espessuras que dessem uma boa resposta perante a inserção de íons. O filme fino foi caracterizado via técnica eletroquímica de voltametria cíclica, numa velocidade de varredura de 44 mV/s, num eletrólito de carbonato de propileno e perclorato de lítio. Os resultados indicaram que o filme fino apresentou uma excelente carga inserida ( $65 \text{ mC/cm}^2$ ) depois do 50º ciclo. Estes resultados são considerados bons, mas a estabilidade da solução é baixa. Com o objetivo de aumentar a estabilidade dos sois, serão preparados vários sois com outras razões molares de  $Ti/A$  e os filmes obtidos serão submetidos a maiores números de ciclos voltamétricos, para que a estabilidade dos filmes possa ser testada perante a inserção de íons alcalinos.

#### SÍNTESE DE COMPOSTOS INTERMETÁLICOS DO SISTEMA $Cu - Al$ POR MECHANICAL ALLOYING

JOÃO CARDOSO DE LIMA, JOSÉ DOS PASSOS FERNANDES, VITOR HUGO FERREIRA DOS SANTOS,

TARCISO ANTÔNIO GRANDI  
Universidade Federal de Santa Catarina

Mechanical Alloying (MA) é uma técnica de processamento de pós no estado sólido e, foi desenvolvida na década de 60 para produzir ligas a base de ferro e de níquel com partículas de óxidos dispersas visando aumentar a resistência mecânica dessas ligas. Mais recentemente, foi descoberto que este método pode ser usado para sintetizar verdadeiras ligas partindo de uma mistura de pós dos elementos químicos. Embora um grande número de publicações tenham aparecido nos últimos anos sobre a amorfização de ligas na forma de pós por MA, um número muito pequeno de artigos têm lidado com a formação de compostos intermetálicos e número muito menor ainda com a síntese de soluções sólidas supersaturadas. Neste trabalho, nós apresentamos resultados de MA aplicada a uma mistura de cobre e alumínio resultando na formação de uma liga  $Cu - Al$  possuindo as fases cristalográficas  $\theta$  ( $CuAl_2$ ) e  $\eta_2$  ( $Cu_{10}Al_{10}$ ). Do ponto de vista tecnológico,  $CuAl_2$  é o composto intermetálico mais importante formado no sistema  $Cu - Al$ , pois além de ser um componente importante na fabricação de duralumínio, faz parte ainda da preparação de várias outras ligas leves. A técnica de difração de raios-x foi usada para caracterizar as fases produzidas e para seguir o progresso da formação da liga  $Cu - Al$ . A técnica de calorimetria diferencial de varredura foi usada para determinar a temperatura na qual ocorre a eliminação de defeitos e tensões introduzidos pelo processo MA. Para confirmar a presença dessas duas fases na liga  $Cu - Al$  obtida por MA, o método de Rietveld que é usado para o refinamento de estruturas cristalinas foi usado para simular os padrões de difração de raios-x das fases  $CuAl_2$  e  $Cu_{10}Al_{10}$ . Os padrões simulados concordam muito bem com o padrão de difração de raios-x experimental.

#### DISPERSÃO DE FÔNONS EM MOLIBIDÊNIO E CROMO À VÁRIAS TEMPERATURAS

CLODOALDO GIBIN GARCIA, MADAN MOHAN SHUKLA

Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho"  
Faculdade de Ciências - Campus de Bauru

Recentemente nós, Garcia e Shukla, fizemos o estudo de dinâmica de rede de metais de transição bcc, principalmente molibidênio e cromo à várias temperaturas, calculando a curva de dispersão desses metais nas direções de simetria principal  $[k00]$ ,  $[kk0]$  e  $[kkk]$ . Naquele es-

tudo a interação interatômica desses metais era considerada como dividida entre três partes, interação central efetiva entre dois vizinhos, interação angular efetiva entre dois vizinhos e a interação elétron-íon pela força columbiana. Os fônons calculados por nós deram boa concordância com valores experimentais, mas tinha desvio da ordem de 40% para alguns vetores de onda. Recentemente nós modificamos nosso trabalho em incluir a força central até três vizinhos. Realmente os cálculos novos de curva de dispersão nas três direções de simetria melhoraram bastante. O desvio entre fônons calculados e observados não passa mais que 15%. No presente trabalho apresentamos os novos resultados de curva de dispersão de molibidênio e cromo nas direções de simetria  $[k00]$ ,  $[kk0]$  e  $[kkk]$ . também nós calculamos as curvas de  $(C_v - T)$  e  $(\theta - T)$  e apresentamos aqui junto com valores experimentais disponíveis.

I. C. G. Garcia e M. M. Shukla, XIX Congresso de Física da Matéria Condensada, 02-06 de setembro de 1996, Águas de Lindóia, SP.

### MODIFICAÇÕES ESTRUTURAIS E ELETRÔNICAS DEVIDO AO NITROGÊNIO E AO HIDROGÊNIO EM FILMES DE CN:H.

SÉRGIO SOUTO

USP - FZEA - Departamento de Ciências Básicas

FERNANDO ALVAREZ

UNICAMP - IFGW - DFA - Laboratório de Conversão Fotovoltáica

Com a predição teórica da fase  $\beta - C_3N_4$  <sup>(1)</sup>, de dureza comparável ao diamante, o sistema carbono-nitrogênio ganhou um enorme interesse. Apesar do aparente in-sucesso para se obter esta fase, houve um enorme avanço no conhecimento das propriedades estruturais, eletrônicas e mecânicas dos filmes de a-CN:H e a-CN. Utilizamos a técnica de fotoemissão de elétrons para estudar os níveis eletrônicos profundos ( $C1s$  e  $N1s$ ) e a banda de valência dos filmes de a-CN e a-CN:H preparados pela técnica de *sputtering*. O nível  $C1s$  alarga-se assimetricamente aumentando-se a concentração de nitrogênio, indicando assim a ligação do carbono ao nitrogênio. A deconvolução deste pico sugere que existem carbonos ligados a vários átomos de nitrogênio. Em filmes com a mesma concentração de nitrogênio, o pico  $C1s$  indica que o hidrogênio no plasma reduz a proporção de ligações C-N. O nível  $N1s$  é constituído de um pico duplo evidenciando assim a existência de dois sítios para o nitrogênio. Aumentando o hidrogênio no plasma, observamos o aparecimento de um terceiro pico em uma energia intermediária, possivelmente associado à formação de  $-NH_2$ . A estrutura da banda de valência apresenta três novas bandas em relação ao grafite. A comparação dos espectros com as densidades de estado calculados (DOS) para piridina e  $\beta - C_3N_4$  <sup>(2)</sup> nos per-

mitiram concluir que: A banda à -4.5 eV corresponde ao par isolado do nitrogênio e aos orbitais  $p\pi$  do carbono e nitrogênio; Os outros dois picos, -7.1 eV e -9.5 eV são formados por orbitais tipo p, e uma contribuição menor dos tipo s, do nitrogênio e do carbono; A banda - 9.5 eV parece estar associada as ligações C-N simples, tipo  $\sigma$ . A introdução de H no plasma reduz o pico à 7.1 eV e os estados  $\pi$  do topo da banda de valência.

(1) A Liu and L. Cohen; Science, **245** (1989) 841

(2) J. Robertson and C.A. David, Diamond Relat. Mater., **3** (1994) 353

### ESTUDO DE DINÂMICA DE REDE EM LIGAS BINÁRIA BCC DE NIÓBIO - MOLIBDÊNIO.

MOMOTARO IMAIZUMI, EDMILTON GUSKEN  
UNESP

As frequências de fonons em metais e ligas são calculadas com o uso de modelos fenomenológicos de constantes de forças ou com o uso da teoria eletrônica dos sólidos proveniente de cálculos de primeiros princípios, onde a teoria de perturbação de segunda ordem é geralmente usada. Medidas de frequências de fonons feitas por B.M. Powell, P. Martel, and A.D.B. Woods através de espalhamento inelástico de neutrons, mostraram que as curvas de dispersão de fonons das ligas de nióbio - molibidênio são bem diferentes das curvas de dispersão de fonons seus componentes. Esse comportamento é devido ao preenchimento parcial das camadas eletrônicas internas nos metais de transição, produzindo efeitos significativos nas interações interatômicas devido a hibridização dos níveis eletrônicos s-d. Recentemente R. Shyam, S.C. Upadhyaya, and J. C. Upadhyaya, propuseram um modelo de potencial, cujo fator de forma elétron-íon é extraído de modelo de potencial para metais de transição de Animalu, proveniente de cálculos de primeiros princípios, onde os seus parâmetros são obtidos de dados da espectroscopia. Esse modelo de potencial é derivado do modelo de pseudo-potencial não local de Heine-Abarenkov, que geralmente apresentam bons resultados em cálculos das frequências de fonons porque os seus parâmetros são ajustados através de dados experimentais. O presente trabalho tem o objetivo de estender o modelo de potencial de Animalu para ligas binária bcc de  $Nb_{1-x}Mo_x$  com  $x = 0.25$ ,  $x = 0.41$  e  $x = 0.75$ , onde será estudado o comportamento do potencial de blindagem e os potenciais de correlação e troca desses materiais. Serão também calculados as densidades de fonons e o calor específico em função da temperatura, nessas ligas. As curvas de dispersão de fonons obtidas serão comparadas aos valores experimentais medidos por espalhamento inelástico de neutrons. (Apoio CNPq, FAPESP, CENAPAD)

## ESTUDO DE RESISTIVIDADE ELÉTRICA EM METAIS E LIGAS CRISTALINAS.

EDMILTON GUSKEN, CARLOS ROBERTO GRANDINI,  
MOMOTARO IMAIZUMI  
*Unesp*

Os metais bcc como vanádio, nióbio, tântalo, tem facilidade em absorver elementos leves como hidrogênio, oxigênio e carbono, tornando o estudo dos sistemas compostos por metal - gás importante. Observou-se que estes sistemas geralmente apresentam ordenamento intersticiais dos átomos de gases em concentrações muito pequenas. Esse comportamento do ordenamento intersticial a baixas concentrações em ligas substitucionais é devido a uma forte tensão de cisalhamento nos átomos intersticiais. A variação da resistividade elétrica de um metal com a temperatura é um bom parâmetro para estudar o mecanismo de espalhamento de elétrons nesses materiais, o principal objetivo desse trabalho é o estudo das interações das impurezas intersticiais com átomos da rede cristalina, por meio de medidas de resistividade elétrica em função da temperatura em metais de transição como nióbio, tântalo, tungstênio e molibidênio. As impurezas que serão estudadas nesses metais serão gases como hidrogênio, carbono e oxigênio. As medidas de resistividade elétrica serão obtidas através da técnica dos quatro terminais, por meio de uma fonte, fazendo passar pela amostra de seção transversal uma corrente constante, e através de um multímetro HP34401A e uma interface conectada ao um microcomputador, será feita a medida de tensão entre dois pontos e calculada a resistividade elétrica da amostra a cada intervalo de temperatura, da ambiente até 400K, a resistividade elétrica é obtida usando-se a segunda lei de Ohm, cuja constante de proporcionalidade é a razão entre a área de seção transversal da amostra e o comprimento da mesma ( região onde se mede a resistência). As medidas de resistividade elétricas serão estendidas as ligas de nióbio - titânio. (Apoio CNPq, FAPESP)

## DETERMINAÇÃO POR NANOINDENTAÇÃO DA DUREZA DE CAMADAS SUPERFICIAIS DE FERRO NITRETADO POR IMPLANTAÇÃO IÔNICA

FABIANA CRISTINA NASCIMENTO, CARLOS MAURÍCIO LEPIENSKI  
*Departamento de Física - UFPR*  
CARLOS EUGÊNIO FOERSTER  
*Departamento de Física - UEPG*

Apresentamos resultados de medidas de dureza obtidas por nanoindentação em amostras de ferro puro e aço-1020 implantadas com nitrogênio e pós-bombardeadas com argônio. Para a implantação com nitrogênio, foram utilizadas três energias com o objetivo de se ter uma

maior uniformidade na camada implantada. O fato de se fazer um pós-bombardeamento com argônio está relacionado com o aumento da retenção do nitrogênio quando a amostra é aquecida. A implantação produz camadas finas de nitretos de ferro com espessura da ordem de  $1\mu\text{m}$ . Para determinar a dureza dessas regiões superficiais não é possível utilizar os métodos convencionais, pois nestes casos o penetrador atravessa a região implantada. Por isso faz-se necessário a utilização da técnica da nanoindentação. A nanoindentação é uma técnica que permite medir durezas com uma penetração da ordem de dezenas de nm até alguns  $\mu\text{m}$ . Com essa técnica, pode-se fazer um estudo sobre o módulo de elasticidade do material. A curva típica obtida, carga versus profundidade de penetração mostra o comportamento plástico-elástico do material. Com a análise das curvas, pode-se afirmar que a região implantada apresenta um comportamento menos plástico quando comparada a região não implantada, portanto uma profundidade de penetração menor e conseqüentemente uma dureza maior. Foram realizados ensaios de nanoindentação utilizando cargas entre  $50\mu\text{N}$  e  $90000\mu\text{N}$ . Verificou-se um aumento da dureza na região implantada quando comparada a região não implantada. O módulo elástico não sofre alterações com a implantação.

## STRUCTURAL AND MAGNETIC PROPERTIES OF $Fe_2Nb_{1-x}V_x$

JOÃO CARLOS KRAUSE, JACOB SCHAF, MOACIR ÍNDIO DA COSTA JR  
*Instituto de Física - UFRGS*  
CLEDERSON PADUANI, P. M. DE SOUZA, A. D. MIRANDA, T. A. GRANDI  
*Departamento de Física - UFSC*

The structural and hyperfine magnetic properties of the pseudobinary  $Fe_2(Nb_{1-x})V_x$  alloys are investigated by means of the experimental techniques of X-ray diffraction (XRD), Mössbauer effect (ME) measurements and differential scanning calorimetry (DSC). The effect of the substitution of V atoms for the Nb atoms is investigated throughout the whole range of composition. The samples of about 1 g were produced by melting several times the nominal mixtures of the electrolytic elements Fe (99.9%), Mn (99.9%) and Nb (99.9%), under a high-purity argon atmosphere of about 500 mm Hg, in an arc furnace. The absorbers for XRD and MS analysis were obtained by crushing and subsequent screening of the prepared alloys. The XRD patterns were taken by using the  $K\alpha$  radiation of a Cu/Fe tube, which gives X-rays with  $\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$ . The magnetization results were obtained from crushed samples (suspended in high-vacuum wax). The  $Fe_2(Nb_{1-x})V_x$  spectra were obtained with the transmission geometry in a conventional spectrometer. The XRD results have indicated a bcc structure for all these alloys, in spite of the hcp structure of the  $Fe_2Nb$  intermetallic com-

pound. The ME results have shown that no magnetic coupling exists at room temperature, although the DSC results indicate that transitions to ordered phases at low temperatures shall appear at the vanadium rich side.

### Estudo Teórico de Parâmetros Mössbauer em Ligas Metálicas Diluídas

RENATA NASCIMENTO NOGUEIRA, HELENA MARIA PETRILLI  
IFUSP

Neste trabalho, utilizamos o método RS-LMTO-ASA (*Real Space - Linear Muffin -Tin - Atomic Sphere Approximation*)<sup>1</sup>, para calcular grandezas hiperfinas de impurezas de Fe em ligas diluídas de Co e Fe em hospedeiro Ag. Procuramos com isso discutir as atribuições de sítios de Fe sugeridas em dois trabalhos experimentais recentes<sup>2,3</sup> onde se apresentaram e analisaram espectros Mössbauer obtidos para tais ligas. Em um deles<sup>2</sup>, os autores sugeriram que os sítios observados para a impureza de Fe dentro das amostras utilizadas seriam referentes às seguintes situações: impureza isolada, dímero Fe-Fe e Fe na superfície de pequenos precipitados de Co. No outro trabalho<sup>3</sup>, os autores identificaram dois sítios para o átomo de Fe, sendo um deles com alta simetria e o outro não, os quais foram associados a átomos de Fe no interior ou na superfície de precipitados de Co. Para discutirmos os resultados experimentais da literatura, calculamos o deslocamento isomérico, o gradiente de campo elétrico e o campo hiperfino nas impurezas de Fe em Ag nas seguintes configurações de vizinhança: impureza isolada, dímeros Fe-Fe e Fe-Co, Fe em precipitados de 12 átomos de Co, com a impureza de Fe no centro ou na superfície deste. [1] S. Frota-Pessôa; Phys. Rev. B **48**, 7148 (1992). P. R. Peduto, S. Frota-Pessôa e M. Methfessel; Phys. Rev B **44**, 13283 (1991). S. Ferreira e S. Frota-Pessôa; Phys. Rev B **51**, 2045 (1995). [2] J. Verheynder, G. L. Zhang, J. Destoker, A. Vantomme, W. Deweerdt, K. Milants, T. Barancira e H. Pattyn; J. Phys. D: Appl. Phys **29**, 1316 (1996). [3] J. Verheynder, J. Destoker, G. Neuttiens e H. Pattyn; J. Magn. Magn. Matter. **148**, 113 (1995).

*Trabalho financiado pela FAPESP*

### PROPRIEDADES LOCAIS AO REDOR DE UMA IMPUREZA DE Fe EM Cd E Zn HCP.

PABLO GUILLERMO GONZALES, HELENA MARIA PETRILLI

*Instituto de Física da Universidade de São Paulo.*

O momento localizado é um problema antigo que recebeu nova atenção nos últimos tempos devido ao significativo avanço das técnicas experimentais que permitem tanto a confecção de sistemas que usualmente não formam ligas, como a análise muito precisa de proprieda-

des magnéticas num dado sítio via interações hiperfinas. Por outro lado, cálculos teóricos de estrutura eletrônica têm se apresentado nos últimos tempos como uma importante ferramenta capaz de descrever o comportamento magnético de impurezas de metais de transição em hospedeiros também de metais de transição, sendo um constante desafio ter uma boa descrição destes sistemas dentro da aproximação local por spin da teoria do funcional da densidade (LSDA). Neste trabalho utilizamos o formalismo RS-LMTO-ASA (*Real Space - Linear Muffin Tin Orbital - Atomic Sphere Approximation*), que é um método de primeiros princípios dentro da LSDA, para estudar propriedades locais de sistemas onde os hospedeiros são o Cd e Zn hcp, tendo como impureza o Fe. Através do RS-LMTO-ASA, obtemos densidades locais de estados, momento magnético local e propriedades hiperfinas tais como deslocamento isomérico, gradiente de campo elétrico no núcleo e campos hiperfinos de contato nos sítios da impureza e seus vizinhos. Nossos cálculos mostram que a impureza Fe tem momento magnético local em hospedeiros de Cd e Zn, contradizendo resultados experimentais que indicam que o Fe não tem momento magnético local nos hospedeiros mencionados. Esta contradição é provavelmente devida ao chamado efeito Kondo, que manifesta-se eliminando o momento magnético local quando fazem medidas experimentais a uma determinada temperatura.

### PREPARAÇÃO DE FILMES FERROELÉTRICOS ESPessos A BASE de PbTiO<sub>3</sub>

JAIR BALTAZAR-RODRIGUES, LUIZ EDUARDO RODRIGUES  
UEPG

Devido às suas propriedades dielétricas, piezoelétricas, piroelétricas e eletro-ópticas, os materiais ferroelétricos encontram muitas aplicações tais como: transdutores acústicos e ultrassom, sensores de infravermelho, chaveadores óticos, filtros eletrônicos, capacitores e etc. A obtenção de monocristais de PbTiO<sub>3</sub> é muito difícil devido a alta temperatura de fusão do titânio e a baixa do chumbo, além da volatilização deste em altas temperaturas. Por isto este composto é produzido na forma cerâmica. Atualmente, a adição de lantânio tem revelado que determinadas propriedades maximizam-se e outras minimizam-se em função da concentração. Estas cerâmicas vem sendo estudadas com vistas aos interesses tecnológicos, na forma de filmes cerâmicos. Filmes ferroelétricos espessos permitem a confecção de dispositivos com dimensões ajustadas para as demandas dos projetos e oferece compatibilidade com a tecnologia de semicondutores para a produção de determinados dispositivos. A preparação dos filmes consiste em misturar os pós dos óxidos constituintes em proporções estequiométricas, promover uma reação no es-

tado sólido (calcinação). O pó resultante é submetido a uma moagem em meio líquido e, neste processo, recebe dispersantes orgânicos (defloculantes, ligantes e plastificantes). Com a viscosidade do meio ajustada é feita a deposição dos filmes por print screen. O tratamento térmico final para a densificação da camada cerâmica apresenta alguns problemas fundamentais. No primeiro estágio deve volatilizar os aditivos orgânicos usados para dispersar as partículas, o que pode provocar trincas devido a velocidade de saída dos orgânicos. Enquanto na segunda etapa deve agregar as partículas depositadas e densificar a camada. Também, as composições a base de chumbo, em qualquer método de preparação, devem ser submetidas a um controle de atmosfera pois a volatilização do chumbo pode provocar sérios desvios na estequiometria das composições e alterar as propriedades das mesmas.

#### ANÁLISE PDMS-RBS DE FILMES FINOS DE LiF BOMBARDEADOS POR PARTÍCULAS RÁPIDAS DE NITROGÊNIO

J. A. M. PEREIRA, E. F. DA SILVEIRA  
PUC-Rio

As técnicas RBS (Rutherford Back Scattering) e PDMS (Plasma Desorption Mass Spectrometry) foram utilizadas para verificar a modificação na estequiometria de 1 filme fino de LiF feita por um feixe de nitrogênio de 2.0 MeV. Essas técnicas fornecem informações complementares sobre a variação local relativa das quantidades de Li e F no material em função da dose de radiação do feixe de nitrogênio. O PDMS é uma técnica de caracterização de superfícies particularmente sensível ao Li<sup>+</sup> frequentemente utilizada para análise de superfícies isolantes e de filmes orgânicos depositados sobre substratos metálicos. Em contraste, o F<sup>-</sup> - praticamente não é visto nesta técnica, porém aparece mais intensamente no espectro de energia de recuo dos íons de He fornecido pelo RBS. Um aumento relativo na quantidade de Li na superfície foi determinado através da análise por PDMS, enquanto a diminuição da espessura do filme ficou evidente nos espectros RBS. Esses resultados indicam que a erosão provocada pelo bombardeio iônico ocorre diferentemente para os dois íons em questão. O fluor é retirado preferencialmente, resultando numa metalização da superfície. Essa observação pode ser explicada considerando reações químicas na rede halogênica induzidas pela excitação eletrônica provocada pelo projétil. Ao ser neutrazidado, o F<sup>-</sup> fica menos ligado na rede e quimicamente ativo podendo formar centros Vk. Esses centros são ávidos por elétrons e seu decaimento gera pares F,H. O centro F é um sistema formado por um elétron no lugar de um ion halogenio e o centro H é constituído por uma molécula F<sub>2</sub><sup>-</sup> no sitio de um halogenio. O centro H tem uma mobilidade maior do que a do centro F e sua chegada na superfície provoca a emissão de átomos de flúor.

#### FORMAÇÃO DE ALUMINETOS DE NÍQUEL EM FILMES FINOS.

VITOR HUGO GARCIA  
UDESC

A interdifusão isotérmica em bicamadas ou multicamadas de filmes finos do sistema Ni/Al é estudada através de uma aproximação baseada em uma difusividade efetiva dependente de concentração. Nesta abordagem não se necessita, como em outras abordagens conhecidas, supor, *a priori*, o início da formação das fases em determinadas posições da amostra. A aproximação considera que entre as regiões adjacentes da amostra, onde ocorrem fases bem definidas, cria-se uma camada ou *parede* (geralmente muito fina) com concentrações que não correspondem a fases estáveis do diagrama de fases de equilíbrio. Estas "*paredes*" correspondem aos intervalos de concentração usualmente considerados como regiões de *mistura de fases* no diagrama de fases. O problema consiste em descrever teoricamente a cinética de formação e/ou dissociação dos aluminetos de níquel:  $NiAl_3$ ,  $Ni_2Al_3$ ,  $NiAl$  e  $Ni_3Al$  em um par de difusão binário Ni/Al, no intervalo de temperaturas 250°C - 450°C. É apresentado um procedimento numérico para obter as soluções da equação da difusão. A partir de dados experimentais obtidos para estruturas de filmes finos de Ni/Al tratadas termicamente, é feito um ajuste para o conjunto dos coeficientes de difusão que constituem a difusividade efetiva. O método mostrou-se eficiente em descrever a cinética de formação dos aluminetos de níquel, especialmente no caso do desaparecimento inicial da camada da fase  $NiAl$  e seu posterior reaparecimento, bem como foi capaz de mostrar que o Ni é o elemento limitante na formação destes aluminetos. No intervalo de temperaturas considerado, o procedimento teve sucesso em prever a sequência de formação das fases do sistema Ni/Al, obtendo boa concordância com os resultados experimentais.

#### FILMES FINOS E ESPessos DE As<sub>2</sub>S<sub>3</sub> PARA APLICAÇÕES EM ÓPTICA

MARCOS HENRIQUE DE PINHO MAURICIO, RAUL ALMEIDA NUNES

DCMM - Pontifícia Universidade Católica - RJ

MARCO CREMONA, LUIZ CARLOS SCAVARDA DO CARMO

Departamento de Física - Pontifícia Universidade Católica - RJ

PAULO ACIOLY M. DOS SANTOS, RICARDO MARQUES RIBEIRO

Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense

O sulfeto de arsênio (As<sub>2</sub>S<sub>3</sub>) é um material que sofre uma série de transformações físico-químicas quando exposto a radiação. Estas modificações são importantes

do ponto de vista tecnológico, permitindo o uso deste material na preparação de camadas foto-sensíveis, filmes holográficos e memórias ópticas. O presente trabalho consiste no desenvolvimento da produção de filmes finos (menor que  $2 \mu\text{m}$ ) e espessos (maior que  $10 \mu\text{m}$ ) de  $\text{As}_2\text{S}_3$ , pelas técnicas de evaporação térmica em vácuo e de deposição por "spin-coating", respectivamente. No processo de deposição à vácuo, o pó de  $\text{As}_2\text{S}_3$  é evaporado diretamente em um cadinho de molibdênio. Já na técnica de "spin-coating", em uma primeira etapa o  $\text{As}_2\text{S}_3$  é solubilizado em um solvente orgânico (aminas primárias ou secundárias). A solução resultante é então aplicada sobre o substrato em um "spinner", sendo posteriormente efetuado um tratamento térmico para volatilização da amina. Por meio das mencionadas técnicas, foram produzidos diversos filmes de  $\text{As}_2\text{S}_3$  sobre substratos de vidro amorfo. Os resultados, preliminares, de espectrofotometria mostraram comportamentos distintos em relação a transmissão no IR, entre as amostras depositadas por evaporação térmica e por "spin-coating". Através dos espectros de transmitância foram calculados valores de espessura e índice de refração dos filmes. Além disto, foram também realizados alguns experimentos de reflectância, através da incidência de um feixe de laser polarizado, He:Ne ( $633\text{nm}$ ) de  $20\text{mW}$ , ortogonal à superfície dos filmes de  $\text{As}_2\text{S}_3$ . Estes testes demonstraram inicialmente um comportamento temporal crescente, e posteriormente oscilatório, da reflexão. Tal observação não pode ser explicada pela simples variação do caminho óptico nos filmes (o produto do índice de refração pela espessura), indicando a formação de uma rede de Bragg ao longo da espessura. Em vista dos resultados, pretende-se integrar estes filmes à fibras ópticas convencionais e especiais, com o intuito de compor novos dispositivos fotônicos.

### MEDIDAS DE RELAXAÇÕES ANELÁSTICAS EM Nb E Ta

ODILA FLORÊNCIO, WANTUIR APARECIDO DE FREITAS, PEDRO LIMA DIAS, CARLOS EDUARDO CABRAL JR

Universidade Federal de São Carlos  
CARLOS ROBERTO GRANDINI  
Universidade Estadual Paulista

Átomos de elementos intersticiais (como oxigênio, nitrogênio e carbono) presentes em metais e ligas metálicas cúbicas de corpo centrado causam picos de relaxação anelástica, quando submetidas a tensões cíclicas, 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 diluídas de relaxação é de um único pico de Debye, mas para altas concentrações devido a possíveis interações entre os átomos intersticiais, processos múltiplos de relaxação podem ocorrer. Os dados

de atrito interno e de frequência em função da temperatura (no intervalo de  $300\text{K}$  a  $700\text{K}$ ) estão sendo realizadas num pêndulo de torção em amostras de Nb e Ta contendo diferentes concentrações de oxigênio e nitrogênio. A frequência de oscilação do pêndulo é da ordem de alguns Hertz, num vácuo melhor que  $10^{-3}$  mbar e taxa de aquecimento de 2 Kelvin por minuto. Os espectros de relaxações anelásticas obtidos para estas amostras são decompostos em picos elementares de Debye e associados a interações matriz-intersticial. Os parâmetros de relaxação anelásticas: intensidade, temperatura do pico, energia de ativação e tempo de relaxação são calculados e comparados com os dados de literatura para identificação dos processos envolvidos. A variação da intensidade de relaxação em função da concentração do elemento intersticial é dependente do metal analisado (Nb ou Ta), além disso, ocorre um alargamento assimétrico do pico de Snoek para altas temperaturas com aumento dos teores de intersticiais e a existência de pares, tripletos, etc.. de átomos de solutos intersticiais dão origem a relaxações adicionais àquelas do pico normal de Snoek.

Apoio: CNPq, FINEP, FAENQUIL-CEMAR

### MODELAMIENTO DE LA REFLECTIVIDAD Y DETERMINACIÓN DE LAS CONSTANTES ÓPTICAS DE MULTICAPAS DE $a - \text{Si} : \text{H} / a - \text{SiC}_x : \text{H}$ y $a - \text{Si} : \text{H} / a - \text{Ge} : \text{H}$

ELVIRA L. ZEBALLOS-VELÁSQUEZ  
UNIVERSIDAD NACIONAL MAYOR DE SAN MARCOS

En anteriores trabajos, las propiedades estructurales de multicapas de  $a - \text{Si} : \text{H} / a - \text{SiC}_x : \text{H}$  y  $a - \text{Si} : \text{H} / a - \text{Ge} : \text{H}$  (depositadas por la técnica de descarga liminescente) fueron analizadas por difracción de rayos-X con medidas a bajo ángulo, llegando a determinar parámetros importantes como los espesores de las capas individuales y de la interface. En esa ocasión fueron utilizados diversos modelos teóricos de la reflectividad con el propósito de obtener la simulación más adecuada del difractograma experimental. El modelamiento teórico definitivo evidenció la influencia de importantes factores. En el presente trabajo continuamos con el proceso de modelamiento para otras muestras pertenecientes a estos dos grupos de heteroestructuras semiconductoras amorfas, cuyos resultados confirman una vez más los efectos de la mezcla de materiales en la interface, rugosidad y variación aleatoria de los espesores de las capas individuales, en las propiedades estructurales de los sistemas. Mientras que la rugosidad produce un decrecimiento de la intensidad de las reflexiones, particularmente para órdenes altas, la variación aleatoria de los espesores produce un engrosamiento de los picos, pudiendo llegar a comprometer la periodicidad. De esta forma podemos estimar la influencia de

cada uno de estos factores, separadamente, en la calidad de los sistemas investigados. Asimismo, es evidenciada la influencia del haz directo y del "background" en la intensidad de las reflexiones. Como consecuencia del modelamiento, son determinados los espesores de las capas individuales, de la interface, como también las constantes ópticas de los materiales amorfos, entre otros parámetros. Los resultados son presentados para cada uno de los sistemas analizados.

**CARACTERIZAÇÃO DE FILMES  
ESPessos DE  $\text{La}_{0.67}\text{Sr}_{0.33}\text{MnO}_{0.3}$   
PRODUZIDOS ATRAVÉS DA TÉCNICA DE  
PLASMA SPRAY**

LUIS GALLEG0 MARTINEZ

*Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN*  
ALFREDO GONÇALVES CUNHA, MARCOS TADEU DE  
AZEREDO ORLANDO, FRANCISCO GUILHERME  
EMMERICH, CARLOS LARICA

*Departamento de Física - Universidade Federal do Espírito  
Santo*

BORIS GIORDANENGO

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF*

ELISA BAGGIO-SAITOVITCH

*Centro brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF*

Em um recente trabalho, Snyder et al comparou propriedades magnéticas e de transporte elétrico do composto  $\text{La}_{0.67}\text{Sr}_{0.33}\text{MnO}_{0.3}$  sob a forma policristalina, filmes e cristais. Neste trabalho foram fabricados filmes espessos de  $\text{La}_{0.67}\text{Sr}_{0.33}\text{MnO}_{0.3}$  produzidos através da técnica de plasma spray sobre substratos de aço inoxidável sem uso de auto ligante e camada intermediária. O composto foi depositado através de uma tocha de plasma spray usando o nitrogênio como gás de trabalho. O pó precursor foi produzido seguindo varias etapas de processamento. A cada etapa, uma análise de raio-X foi realizada. Após o tratamento completo, foi obtido um pó com fase única (cúbica). O pó produzido foi depositado através da técnica de plasma spray. Os filmes espessos, cujas espessuras variam de 20 a  $80\mu\text{m}$ , apresentaram boa aderência. O uso do nitrogênio reduziu a formação de micro fissuras devido ao resfriamento dos splats. No entanto, medidas de resistividade elétrica revelaram uma diminuição de Tc. O composto na forma de pó, quando analisado por sua suscetibilidade magnética, apresentava Tc próximo a 380K. Por outro lado, o filme espesso produzido apresentou inicialmente Tc em torno de 70K. Um posterior tratamento térmico do filme sob um fluxo de oxigênio deslocou o valor do Tc para um valor próximo a 190K. A análise dos difratogramas desses filmes tratados sob fluxo de oxigênio revelaram uma recuperação da fase cúbica, modificada pela perda de oxigênio durante a produção dos filmes espessos.

**APLICAÇÃO DO POTENCIAL DE MORSE  
PARA METAIS CÚBICOS PELO MÉTODO  
MILSTEIN**

JOSÉ ROBERTO CAMPANHA, MADAM MOHAM  
SHUKLA

*Unesp*

O potencial de Morse é um potencial molecular com uso extensivo nas propriedades térmicas dos sólidos, permitindo o cálculo da equação de estado, frequências de fonons e constantes elásticas de segundo, terceiro e quarto graus. O potencial de Morse para metais cúbicos foi estudado por dois métodos diferentes. Um deles é o método de Girifalco e Weizer, no qual utilizou-se os valores experimentais do parâmetro de rede, energia de coesão e bulk módulo do cristal para determinar os parâmetros  $D, \alpha$  e  $r_0$  do potencial de Morse, dado pela equação:

$$\Phi(r_{ij}) = D[e^{-2\alpha(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-\alpha(r_{ij}-r_0)}]$$

Girifalco e Weizer calcularam através do potencial de Morse as constantes elásticas de segundo grau e as equações do estado para sete metais com estrutura cristalina fcc e nove metais com estrutura bcc. Por outro lado Milstein usou valores experimentais do quociente das constantes elásticas  $c_{11}$  e  $c_{12}$  e o parâmetro de rede do cristal a fim de determinar os parâmetros do potencial de Morse. Milstein verificou que o seu modelo só era aplicado para os metais que apresentam o quociente  $c_{11}$  e  $c_{12}$  no intervalo entre os valores 1.14 e 2.0. O Presente trabalho mostra que este intervalo de validade do modelo de Milstein para o potencial de Morse esta entre os valores de 0.5 a 4.8. Essa observação possibilitou o cálculo dos parâmetros para os potenciais de Morse para 13 metais com estrutura fcc e 12 metais com estrutura bcc e também possibilitou o cálculo das constantes elásticas de terceiro e quarto graus desses metais e esses resultados foram comparados aos valores experimentais.

**ENERGIA DE PRECIPITAÇÃO DA FASE  
RICA EM PRATA NA LIGA CU-5%  
Al-11%Ag**

CARLOS ROBERTO SOBREIRA BEATRICE, MÁRIO  
CILENSE, ANTONIO TALLARICO ADORNO  
*Instituto de Química - UNESP, Araraquara-SP*

As ligas de Cu-Al-Ag com 5%Al e 5 - 12%Ag apresentam algumas características como alta plasticidade, ductibilidade, brilho e resistência à corrosão. Na temperatura ambiente e em condições de equilíbrio, estas ligas apresentam duas fases, sendo uma rica em cobre e outra rica em prata. Quando submetidas a temperaturas acima de  $700^\circ\text{C}$  ocorre solubilização da fase rica em prata, que posteriormente pode ser precipitada em determinadas condições. A liga Cu-5%Al-11%Ag foi preparada a partir de elementos com pureza de 99,99, fun-

dida em cadinhos de grafite, em um forno de indução e foram obtidos tarugos E com aproximadamente 100 gramas, que foram usinados e laminados em forma de fios, e trefilados até o diâmetro de 0,9 mm. Depois de um pré recozimento a liga foi enrolada na forma de mola e aquecida na temperatura de 750 °C em atmosfera de argônio durante 30 minutos. Após esse tempo a amostra foi esfriada em água na temperatura ambiente, e rapidamente soldada no porta- amostras por meio de arco. Medidas de variação da resistividade elétrica com o tempo pelo método dos quatro pontos, foram obtidas para diferentes temperaturas de envelhecimento,

na temperatura do nitrogênio líquido, em uma liga de Cu-5%Al-11%Ag. As medidas foram realizadas para o tempo zero, ou seja logo após a têmpera e em tempos pré-determinados nas diferentes temperaturas de envelhecimento. Os dados foram tratados pelo método de corte das curvas de variação da resistividade em cada tempo de envelhecimento, em relação à resistividade inicial, em função do inverso da temperatura absoluta de envelhecimento, e foi obtida a energia de precipitação da fase rica em prata, cujo valor foi de (179(5)kJ/mol.

---

## DESENVOLVIMENTO, CARACTERIZAÇÃO E PROPRIEDADES DE MATERIAIS (Estruturas Cristalinas)

### DESENVOLVIMENTO, CARACTERIZAÇÃO E PROPRIEDADES DE MATERIAIS (Estrutura Cristalina/Transição de Fase) – 11/06/97

#### MÉTODO RIETVELD PARA REFINAMENTO ESTRUTURAL: UM ESTUDO COM O PROGRAMA FULLPROF

CARLOS ALBERTO DOS SANTOS, ÉDER JULIO KINAST  
*Instituto de Física - UFRGS*

O uso do método Rietveld vem crescendo progressivamente, especialmente entre pesquisadores dedicados à metalurgia do pó, à química do estado sólido e à mineralogia. Apesar do considerável intervalo de tempo decorrido desde sua publicação, em 1969, o método ainda apresenta questões em aberto e dificuldades sutis para sua implementação. Além das dificuldades específicas do método, o usuário potencial depara-se com a grande diversidade de algoritmos e programas. Embora tais programas objetivem cumprir o método original, sabe-se que os resultados obtidos dependem de algumas características de cada programa. Frente a tal cenário, parece importante a divulgação de estudos sistemáticos com diferentes programas, buscando a compreensão dos efeitos de determinadas variáveis experimentais e computacionais, sobre o refinamento estrutural. A presente comunicação objetiva contribuir para a discussão dos aspectos fundamentais do método Rietveld, a partir de estudos sistemáticos com o programa fullprof, largamente utilizado em laboratórios europeus e americanos. Constituem objeto de investigação, materiais comerciais de alta pureza, tais como  $Fe_2O_3$ ,  $Ta_2O_5$ ,  $Nb_2O_5$ ,  $MnO$ ,  $CoO$ ,  $MgO$  e  $SiO_2$ , bem como amostras naturais e sintéticas, pertencentes às soluções sólidas tantalita-columbita e tapiolita-mossita, com composição ideal do tipo  $AB_2O_6$ , onde  $A=Fe, Mn, Co$  e  $Mg$ , e  $B=Ta, Nb$ . Faixa angular do difratograma, passo da varredura angular e tempo de contagem são as variáveis experimentais utilizadas no estudo. As variáveis utilizadas no refinamento incluem, parâmetros de rede, posições atômicas, fatores de temperatura, orientação preferencial e contagem de base. Dar-se-á ênfase aos efeitos de diferentes procedimentos experimentais, bem como procedimentos de ajustes, sobre a estabilidade e convergência do processo de refinamento, especialmente no que se refere à obtenção de valores negativos para o fator de temperatura. A comparação com resultados obtidos através do estudo Mössbauer do composto  $(Fe, Mn)(Ta, Nb)_2O_6$ , mostra que embora o método de refinamento seja apropriado para o estudo de processos de ordem-desordem, a técnica de difração de raios-X é ineficiente em determinados materiais.

#### NEUTRON POWDER DIFFRACTION OF HAFNIATES AND RUTHENATES

J. A. GUEVARA, S. L. CUFFINI, Y. P.

MASCARENHAS

*Lab. de Cristalografia, IFSC-USP, São Carlos. BRAZIL.*

M. T. FERNANDEZ

*Institut Laue-Langevin, 156X, 38042, Grénoble, Cedex, FRANCE.*

PETER W. STEPHENS

*State University of New York at Stony Brook, NY, 11974, USA*

R. E. CARBONIO

*INFQC, Ciencias Químicas. UNC. Suc. 16, C.C. 61.*

*Cordoba. ARGENTINE.*

J. A. ALONSO

*Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid. C.S.I.C.*

*Cantablanco 29049. Adrid. SPAIN.*

$ABO_3$  ( $A = Ca, Sr$  and  $B = Ru, Hf$ ) belongs to perovskite family with general formula  $A^{2+}B^{4+}O_3$ . Several investigations produce conflicting reports in which  $SrHfO_3$  (SH) is assigned a cubic symmetry (Z. Phys. Chem. 28, 74 (1935)) and other author (Neorganicheskie Materialy, 24, 2027 (1988)) reported as pseudocubic or orthorhombic at room temperature.  $CaRuO_3$  presents an orthorhombic Pnma symmetry at room temperature (Solid State Ion. 43, 171 (1990)). Both compounds present the  $GdFeO_3$ -structure with oxygen tilted regular octahedra. Neutron powder diffraction (NPD) data of  $SrHfO_3$  were collected at room temperature in the high resolution D2B diffractometer at ILL, Grenoble. Neutron powder diffraction data of  $CaRuO_3$  were taken at 8.5 Kelvin, with a neutron wavelength of

2.358 Å at the Brookhaven National Laboratory. The structures were refined by the Rietveld Method using DBWS9411 and GSAS programs. The refinement of SH using neutron and X-ray powder pattern indicates an orthorhombic Pnma symmetry at room temperature with lattice parameters,  $a = 5.7889(1)$  Å,  $b = 8.1716(2)$  Å,  $c = 5.7769(1)$  Å. For  $\text{CaRuO}_3$  the refinement at the low temperature (8.5K) indicates an orthorhombic Pnma symmetry as well as at room temperature, so there is no evidence of structural phase transition. A graphical representation of the crystalline structure, using ATOMS for Windows program, was obtained with the refined structure parameters. In this way, it can be visualized the B-O6 octahedral tilting, typical of these perovskite compounds. Acknowledgements: This work was supported by FAPESP, CNPq, CAPES and FINEP.

### ESTUDO CONFORMACIONAL DOS ÍONS NO SAL DE ROCHELLE ( $\text{NaKC}_4\text{H}_4\text{O}_6\text{AH}_2\text{O}$ ) COM A APLICAÇÃO DO CAMPO ELÉTRICO POR DIFRAÇÃO DE RAIOS-X

JOSÉ DE ARIMATEA FREITAS E SILVA, CLEUTON FREIRE, JOSÉ MARCOS SASAKI, NEWTON M. BARBOSA NETO, A. T. VARELA, ILDE GUEDES, FRANCISCO ERIVAN DE ABREU MELO, JOSUÉ MENDES FILHO

UFC- Universidade Federal do Ceará

O sal de Rochelle (RS) é um dos mais importantes materiais ferroelétricos já estudados. Como é bem conhecido este cristal, apresenta duas transições de fase que ocorrem nas temperaturas  $T_{C1} = 255\text{K}$  e  $T_{C2} = 297\text{K}$ . No intervalo de temperatura (T) compreendidos entre  $T_{C1}$  e  $T_{C2}$  o RS é ferroelétrico com estrutura monoclinica com grupo espacial  $P2_1$ . Para  $T < T_{C1}$  e  $T > T_{C2}$ , de acordo com inúmeros trabalhos já publicados, o RS é paraelétrico com estrutura ortorrômbica com grupo espacial  $P2_12_12$ . Entretanto, outros trabalhos questionam o fato da fase paraelétrica (PE) para  $T < T_{C1}$  ser idêntica a fase PE para  $T > T_{C2}$ . Estas transições são denominadas transições de fase estruturais. Recentemente, alguns estudos no  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  (KDP), submetidos a campos elétricos constantes e pressões uniaxiais [1, 2], mostraram que além destas transições de fase estruturais, podemos obter outras transições denominadas de conformacionais, pois, mantêm a mesma estrutura cristalina do cristal mudando apenas a simetria local dos dipolos. Neste trabalho apresentamos, pela primeira vez, um estudo das transições de fase conformacionais do RS devido a um campo elétrico DC. Aplicamos o campo DC na direção cristalográfica [100] e medimos a intensidade difratada numa varredura  $\theta - 2\theta$  nas direções [010] e [001] para as fases paraelétrica e fase ferroelétrica. Observamos mudanças abruptas nas intensidades integradas, para campos das ordem de 700 V/cm, que podem ser explicados como sendo uma con-

formação dos íons na estrutura cristalina. Os deslocamentos dos íons consiste de movimentos das moléculas de tartarato ( $\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_6$ ) e as moléculas de água. As mudanças nas intensidade das reflexões têm um carácter irreversível semelhante aqueles observados nos espectros Raman do KDP[2]. Essas mudanças nas intensidades foram observadas na direção [010] enquanto que na direção [001] estes efeitos não foram visíveis. Essas medidas tem mostrado uma forte evidência de que podemos acompanhar as polarizações das moléculas por difração de raios-X em função do campo elétrico.

[1] Moreira, S.G.C. et al, *Ferroelectrics*, 160, 47 (1994)

[2] Moreira, S.G.C., Melo, F.E.A., Mendes Filho, J., *Phys. Rev. B* 54, 6027 (1996)

FINEP/CNPq/CAPES/FUNCAP

### Transições de fase do pirocloro de defeito $\text{RbNbWO}_6$ induzidas por altas pressões e moagem prolongada.

CLÁUDIO A. PEROTTONI, JANETE E. ZORZI, JOÃO A. H. DA JORNADA

Instituto de Física - Universidade Federal do Rio Grande do Sul

O composto  $\text{RbNbWO}_6$  faz parte da extensa família de compostos  $\text{AB}_2\text{O}_6$ , conhecidos como piroclores de defeito por apresentarem uma ocupação parcial dos sítios cristalográficos associados à fórmula estequiométrica mais geral,  $\text{A}_2\text{B}_2\text{X}_6\text{X}'$ , dos compostos com estrutura de pirocloro. A estrutura destes compostos pode ser descrita em termos de um arranjo de octaedros de oxigênio unidos entre si pelos vértices e uma sub-rede de cátions A ( $\text{NH}_4, \text{Rb}, \text{Cs}, \text{K} \dots$ ) que ocupam sítios próximos ao centro das cavidades formadas pelo *framework* ( $\text{B}_2\text{O}_6$ ). O comportamento destes compostos sob altas pressões vem sendo estudado com o intuito de estabelecer uma possível sistemática das suas transições de fase e sua correlação com a natureza do cátion A. Neste trabalho, serão apresentados os resultados de difração de raios X por dispersão em energia, em altas pressões, do composto  $\text{RbNbWO}_6$ , obtidos com auxílio de uma câmara de bigornas de diamantes (DAC). Estes resultados demonstram a ocorrência de pelo menos duas transições de fase estruturais em altas pressões, uma das quais dependente da condição de hidrostaticidade do meio. Além destas transições estruturais, a uma determinada pressão ocorre a inserção de moléculas de água do meio transmissor de pressão (metanol-etanol-água, 16:3:1), com conseqüente aumento de volume da cela unitária do composto, à semelhança do que ocorre com outro pirocloro de defeito,  $\text{NH}_4\text{NbWO}_6$ . Também foi observada uma transição de fase induzida por moagem prolongada (*ball milling*) de uma amostra de  $\text{RbNbWO}_6$ . A análise por difração de raios X sugere uma possível conexão entre uma das fases do composto  $\text{RbNbWO}_6$  em alta pressão e a fase originada pelo processo de moagem. (CNPq, FINEP, FAPERGS)

**ON THE NATURE OF THE  
LOW-TEMPERATURE PHASE OF  
ROCHELLE SALT CRYSTALS**

NEWTON MARTINS BARBOSA NETO, ANTONIO  
TEMÓTEO VARELA, EVERASMO FREIRE BEZERRA,  
FRANCISCO ERIVAN DE ABREU MELO, PAULO DE  
TARSO CAVALCANTE FREIRE, ILDE GUEDES, JOSUÉ  
MENDES FILHO

*Universidade Federal do Ceará*

It is well known that in Rochelle Salt (RS) crystals a ferroelectric phase (FE) exists in the temperature range from  $T_{C1}=255\text{K}$  to  $T_{C2}=297\text{K}$  with orthorhombic structure. Below  $T_{C1}$  and above  $T_{C2}$ , RS is in a paraelectric phase (PE) with monoclinic structure, *i.e.*, the low-temperature (LTP) and high-temperature (HTP) phases are completely identical. However, Ismailz LTP of the RS crystals may be antiferroelectric (AFE). They studied this interesting problem using the effect of permanent electric fields,  $E$ , upon the phase transition temperatures of RS crystals. If in the spontaneously polarized crystal the successive phase transitions occur between phases having an electric ordering, and between phases, one of which has an electric ordering (FE or AFE) but the order does not contain at all electric dipoles (PE), then the effect of the given  $E$  upon these phase transitions quantitatively will not be the same. Here, we show, by using a three electrode piezoelectric resonance technique that there are some quantitative differences in the resonant spectrum obtained in the range from  $T_1=243\text{K}$  to  $T_2=300\text{K}$ . We observe that the behavior for the mode propagation oscillating at 300kHz around 243K is completely different in LTP and HTP. The spectrum shows that at  $T_{C1}$  this mode is splitted into two other modes that persist up to  $T_2$ . This modification can not be attributed to the thermal expansion of RS. So, we can conclude that this result is another evidence that below  $T_{C1}$  the RS crystal is not in PE phase.

[1] I.H. Ismailzade *et al.*, Phys. State Solid **94**, K17 (1986).

**ESTUDO RAMAN DAS TRANSIÇÕES  
INCOMENSURAVEL E LOCK-IN EM  
CRISTAIS DE  $\text{Cs}_2\text{HgBr}_4$**

ADO JORIO, CARLOS B. PINHEIRO, NIVALDO L.  
SPEZIALI, MARCOS A. PIMENTA

*UFMG*

Na maioria dos sistemas incomensuráveis, o vetor de onda da modulação varia com a temperatura, levando o cristal a uma fase comensurável abaixo da transição lock-in, com uma célula unitária  $p$  vezes maior que a original. No entanto, para o cristal de  $\text{Cs}_2\text{HgBr}_4$  o vetor de onda vale aproximadamente  $0.15 a^*$  e praticamente não varia com a temperatura. Além disso, a fase comensurável não apresenta superestrutura. A temperatura

ambiente, seu grupo de espaço é Pnma e a fase incomensurável ocorre entre 245 e 232 K. Foi proposta uma estrutura monoclinica apolar (grupo de espaço  $P2_1/n$ ) para a fase comensurável abaixo de 232 K. Realizamos um estudo de espalhamento Raman neste cristal entre 80 e 300 K, usando várias geometrias de espalhamento, com o intuito de observar o efeito da incomensurabilidade sobre os modos de vibração do cristal. A análise dos modos internos do anion  $\text{HgBr}_4^{2-}$  à temperatura ambiente mostrou resultados contraditórios com os previstos pela teoria de grupos. Atribuímos estas discrepâncias à desordem orientacional destes anions. A análise da fase comensurável mostrou que a frequência de determinados fonons depende de sua direção de propagação. Este resultado é incompatível com a estrutura apolar proposta para esta fase. Observamos ainda que a incomensurabilidade praticamente não altera a forma de linha dos modos internos de estiramento. No entanto, um aumento gradativo do desdobramento TOLO do modo de estiramento simétrico foi observado na fase incomensurável, sugerindo que o caráter polar deste modo esteja associado à amplitude da modulação.

**ESTUDO DE TRANSIÇÃO DE FASE EM  
CRISTAIS DE  $\text{LiK}_{1-x}(\text{NH}_4)_x\text{SO}_4$  POR  
MEDIDAS DE CONSTANTE DIELÉTRICA.**

ANTÔNIO PAULO DA SILVA, EMERSON FERREIRA DE  
ALMEIDA, PAULO DE TARSO CAVALCANTE FREIRE,  
JOSUÉ MENDES FILHO, MARCOS ANTONIO ARAÚJO  
SILVA, ILDE GUEDES, FRANCISCO ERIVAN DE ABREU  
MELO

*Universidade Federal do Ceará*

Por um lado é bem conhecido que o cristal de  $\text{LiKSO}_4$  apresenta uma série de transições de fase com a temperatura. Para  $T < 300\text{K}$  é sabido que baixando-se a temperatura o cristal muda de estrutura nas temperaturas de 210, 172 e 20 K, enquanto que aumentando-se a temperatura as mudanças de fase ocorrem para  $T = 30, 190$  e  $253\text{K}$ . Tais transições de fase já foram investigadas por várias técnicas experimentais. Na temperatura ambiente o cristal possui uma estrutura hexagonal pertencendo ao grupo espacial  $P6_3$ . Por outro lado, o  $\text{Li}(\text{NH}_4)\text{SO}_4$  também apresenta uma série de transições de fase com a temperatura, mas diferentemente do primeiro, as mudanças na estrutura não apresentam nenhuma histerese térmica. À temperatura ambiente o  $\text{Li}(\text{NH}_4)\text{SO}_4$  cristaliza-se no grupo espacial  $C_{2v}^9$  numa estrutura pseudohexagonal. Uma primeira motivação para se estudar estes materiais é tentar encontrar um modelo que explique a diferença no comportamento destes sulfatos mistos de lítio. Uma outra motivação é o fato de existir uma previsão teórica que dá conta de 25 transições de fase apenas por possíveis orientações do  $\text{SO}_4$ . Foram crescidos cristais de  $\text{LiK}_{1-x}(\text{NH}_4)_x\text{SO}_4$ , inicialmente com  $x = 0,05$  e  $x = 0,2$ , e realizadas medidas de constante dielétrica. Para o crescimento dos

crístais utilizou-se a técnica de evaporação lenta do solvente à temperatura controlada. Antes da realização das medidas as amostras não sofreram nenhum tratamento térmico. Produziu-se "wafers" de aproximadamente 0,5 mm, pintando-se tinta de prata em suas superfícies. As amostras foram colocadas em um criostato de hélio líquido operando com nitrogênio e um controlador de temperatura que fornecia uma precisão de  $\sim 0,2$

K. As constantes dielétricas dos materiais em função da temperatura foram medidas com um medidor de capacitância da General Radio. Mostramos os resultados destas medidas tanto subindo quanto baixando a temperatura.

---

## DESENVOLVIMENTO, CARACTERIZAÇÃO E PROPRIEDADES DE MATERIAIS

### DESENVOLVIMENTO, CARACTERIZAÇÃO E PROPRIEDADES DE MATERIAIS (Transições de Fase e Defeitos) – 12/06/97

#### ESTUDO POR EPR DA SEGREGAÇÃO DE ÍONS DE MANGANÊS EM PÓS DE DIÓXIDO DE ESTANHO

WANDA CECILIA LAS, ELAINE TOFFOLI DAL PONTE  
*Instituto de Química - UNESP*

DOUGLAS GOUVEA

*Dept. Engenharia Química e Materiais - USP*

WALTER SANO

*Instituto de Física - USP*

Pós de dióxido de estanho dopados com íons de manganês, em concentrações variando de 1% mol a 10% mol, foram preparados por via química a partir de sais orgânicos com o objetivo de propiciar uma distribuição homogênea desses íons na rede cristalina. As resinas obtidas para cada concentração foram pré-calcinadas a 400°C por 4h; em seguida, porções de cada concentração foram submetidas à calcinação a temperaturas variando de 500°C a 900°C, por 1h e 15h. Os pós calcinados foram caracterizados medindo-se a área superficial pelo método BET e o sinal do íon manganês (+II) por ressonância magnética eletrônica (EPR). Resultados obtidos por Gouvea et al (Eur. J. Solid State Inorg. Chem., 33(10), 1996, 1015-1023) mostraram que a área superficial aumenta com o aumento da concentração de manganês para pós calcinados às mesmas temperaturas e intervalos de tempo. Supôs-se que vacâncias de oxigênio ocupam a camada superficial das partículas. Esses defeitos surgiriam quando da substituição de íons manganês (+II) ou (+III) nos sítios de estanho (+IV). Na tentativa de comprovar esse modelo, medidas de EPR foram realizadas nos pós calcinados. Observou-se uma banda larga nos estágios iniciais de calcinação, isto é, baixas concentrações de manganês e baixas temperaturas; esse sinal foi atribuído ao Mn (+II) relacionado à segregação desse íon na superfície da partícula. Para concentrações mais altas de manganês e temperaturas mais altas, aparece também um espectro com cinco grupos de seis linhas, característico do Mn (+II) que estaria relacionado com defeitos presentes ao longo de uma interface que se desenvolve à medida que as partículas começam a sinterizar.

Apoio financeiro: FAPESP, PADCT/FINEP

#### ABSORÇÃO ÓPTICA E CORRENTES DE DESPOLARIZAÇÃO TERMICAMENTE ESTIMULADAS EM AMETISTAS BRASILEIRAS

SALETE UGATTI CORTEZÃO, ANA REGINA BLAK  
*IFUSP*

Com o objetivo de caracterizar ametistas brasileiras foi desenvolvido um estudo sistemático em três etapas. Inicialmente as amostras foram analisadas por técnicas que determinaram a composição do material. Dentre essas técnicas foram utilizadas: ativação por neutrons, microscopia eletrônica de varredura, fluorescência de raios X e difração de raios X. Essas técnicas mostraram uma concentração de Fe superior a do Si em regiões coloridas, sugerindo que o Fe<sup>3+</sup> substitui o Si da rede nestas regiões. Em seguida foi utilizada a técnica de Absorção Óptica (AO) para a caracterização dos defeitos eletrônicos encontrados nas ametistas. Os espectros de AO apresentaram três picos principais na região do visível (10000, 18000 e 27500cm<sup>-1</sup>) e um enorme pico na região do ultravioleta (47500cm<sup>-1</sup>), atribuídos ao ferro em diferentes estados de valência. Na região do infravermelho, a presença de centros OH<sup>-</sup> foi observada através de bandas em 3430 e 3580cm<sup>-1</sup>. A cor violeta está relacionada ao Fe<sup>3+</sup> substituindo o Si<sup>4+</sup>, e a ausência de carga é compensada com a presença de íons de metais alcalinos nos canais e buracos armadilhados em íons oxigênio. Aquecendo as amostras entre 400 e 600°C a mudança para a cor citrina é observada, provocando o surgimento de uma banda de AO na região de 23000cm<sup>-1</sup>. Finalmente foram efetuadas medidas de Correntes de Despolarização Termicamente Estimuladas (CDTE) para completar os estudos de caracterização da ametista. Os espectros de CDTE apresentam duas bandas a 235 e 275K, cuja intensidade aumenta linearmente com o campo de polarização, comportamento típico dos defeitos com origem dipolar. Tratamentos térmicos entre 400 e 600°C reduzem drasticamente os dois picos, que foram relacionados a dipolos do tipo Fe<sup>3+</sup> substitucional - H<sup>+</sup> intersticial em duas configurações distintas. Este dipolo foi correlacionado com a banda de AO na região de 18000cm<sup>-1</sup>.

#### Caracterização da Termoluminescência do Topázio Brasileiro

EDUARDO GARDENALI YUKIHARA, EMICO OKUNO  
*Laboratório de Dosimetria do DFN - Instituto de Física da Universidade de São Paulo*

A termoluminescência (TL) ou luminescência termicamente estimulada é uma técnica de importante

aplicação em áreas como dosimetria, datação arqueológica ou geológica etc. Estudos sobre o topázio anteriormente realizados apontam a presença de pelo menos quatro picos de emissão TL e uma resposta linear com a dose até a saturação em cerca de 700Gy. No entanto, os poucos artigos que tratam desse tema apresentam resultados bastante diferentes no que diz respeito à posição dos picos. Nesse estudo realizamos o reconhecimento das características termoluminescentes do topázio brasileiro e sua resposta TL com a dose de radiação ionizante. Nossos resultados mostram que as características TL do topázio não apresentam grande variação entre amostras de um mesmo cristal ou entre amostras de procedência diferentes. Constatamos, entretanto, a presença de pelo menos seis picos distintos, em 120, 190, 210, 250, 340 e 425°C, quando aquecemos as amostras com uma taxa constante de 1°C/s, sendo os dois primeiros os principais picos induzidos por irradiação gama. A existência dos picos em 210 e 250°C ainda não está bem estabelecida. Verificamos também que a resposta TL em função da dose é linear na região entre 20mGy e 100Gy e se torna supralinear a partir desse valor até uma dose de saturação da ordem de 5kGy. Consideramos como resposta TL a altura do pico em 190°C, denominado pico dosimétrico. Os resultados são também discutidos em termos da ordem de cinética dos picos de TL.

**PHOTOTHERMAL AND  
ELECTROREFLECTANCE IMAGES OF  
BIASED  
METAL-OXIDE-SEMICONDUCTOR  
FIELD-EFFECT-TRANSISTORS: SIX  
DIFFERENT KINDS OF SUB-SURFACE  
MICROSCOPY**

JERIAS ALVES BATISTA, ANTONIO MANOEL  
MANSANARES  
UNICAMP

An important step in the development of microelectronic structures is the non-destructive evaluation of operating devices. Several techniques are currently employed, mostly devoted to electrical analysis. As it is well known, the thermal losses in these structures are of crucial importance, since they can both indicate the presence of defects, and promote, when excessive, runaway processes of degradation. The Photothermal Reflectance Microscopy technique has proved to be a useful tool in the determination of the temperature field of operating optoelectronic and microelectronic devices. Its sensitivity (roughly  $10^{-6}$  in  $\Delta R/R$ ), conjugated to its spatial resolution ( $< 1.0 \mu\text{m}$ ), ensures the capability to detect temperature profile variation due to both structural differences and local surface/subsurface defects in the micrometer scale. The non-destructive character of the technique enables aging tests, a necessary step in the development of electronic devices. In the

present work the conventional pump laser beam is replaced by a modulated driving voltage applied to the sample. The resulting surface potential and temperature variation due to the thermal losses induce reflectance modulation. Six different ways of performing microscopy in these devices are demonstrated, each one revealing a particular contrast of the operating structure. These different images are obtained by interchanging the modulation of gate-source and drain-source potentials, as well as by varying the probe beam intensity. Three main components were identified in the signal, their relative importance depending on the experimental configuration: the electroreflectance component, the photo-injected carrier (probe induced) component and the bias current (Joule effect) component. The high ability of the technique to detect defects in these structures is also demonstrated.

Authors are grateful to the Brazilian Agencies FAPESP, CNPq and FINEP for financial support. Dr. N. Jannuzzi and M. C. B. Pimentel are acknowledged for helpful discussions.

**DEVELOPMENT OF LOW DENSITY  
MIRRORS USING VITREOUS CARBON  
SUBSTRATES**

LAURENTINO C. VASCONCELOS NETO, ALVARO JOSÉ  
DAMIÃO, MIRABEL C. REZENDE  
*Instituto de Estudos Avançados/CTA - São José dos  
Campos - SP Divisão de Materiais/IAE/CTA - São José  
dos Campos - SP*

In recent years, there has been a growing interest on vitreous carbon in many fields such as chemistry, biomedicine, electrochemistry and industry. The possible use of vitreous carbon in optical components was mentioned in the past, but no paper describing a real use of it has been found. This work describes a systematic study on vitreous carbon as a substrate for laser mirrors. The aim was to obtain a good low density mirror that could be positioned both in optical assemblies and beam delivering systems more easily or to decrease the weight of optical systems in any aerospace application. The experimental work was divided in to parts: 1) The processing of monolithic vitreous carbon; and 2) preparation and optical characterization of the mirrors. The resin used in the present work was of the furfuryl type, synthesised via acid catalyst from reaction of furfuryl alcohol and formaldehyde. The resin was cured at room temperature, in appropriate cast. It was then carbonised up to 1300 K, at a heating rate of 10 K/h. A lasers mirror is strongly dependent on the surface finish. The grinding process was done at a Loh Optical Surface Generator, using a diamond tool. Followed by polishing on vegetal pitch or polyurethane plate. And ad-layer of Cr was deposited e-beam gun, and a final layer of Al or Au deposited by sputtering. Reflectivities between 84 and 92 %, and roughness as low as 3.6 nm

(rms) were obtained. This is not far from commercial mirrors, however the mirrors were 40% lighter

### Determinação da Temperatura de Transição Antiferromagnética do Composto $(\text{NH}_4)_2\text{FeF}_5\text{H}_2\text{O}$ .

LUCIANA KAZUMI HANAMOTO, CARLOS HENRIQUE WESTPHAL, CARMEN SILVIA DE MOYA PARTITI  
*Instituto de Física de Universidade de São Paulo.*

Os compostos  $\text{A}_2\text{FeCl}_5\text{H}_2\text{O}$  ( $\text{A} = \text{K}, \text{Rb}, \text{NH}_4$ ) são antiferromagnéticos com  $T_N$  entre 6 K e 14 K (1). O espectro Mössbauer obtido abaixo de  $T_N$  no caso do composto  $(\text{NH}_4)_2\text{FeCl}_5\text{H}_2\text{O}$  apresenta anomalias, ou seja, uma diferença na largura de linha, indicando a presença de pelo menos dois sítios de Fe não equivalentes (2). No estudo do composto  $(\text{NH}_4)_2\text{FeF}_5\text{H}_2\text{O}$  publicado por Fourquet et. al. (3) o espectro Mössbauer ainda é paramagnético a 4,2 K. No entanto, como o composto  $(\text{NH}_4)_2\text{FeF}_5\text{H}_2\text{O}$  pertence à mesma família dos sais clorados,  $\text{A}_2\text{FeCl}_5\text{H}_2\text{O}$ , era esperado que o composto de flúor apresentasse transição de fase antiferromagnética em baixas temperaturas e na faixa de temperaturas semelhante aos sais de cloro. Movidos pelo interesse em observar a transição, medimos o espectro Mössbauer a 4,2 K no criostato a hélio líquido do composto de flúor e o espectro obtido foi um dubleto paramagnético. Fizemos, então, medidas de susceptibilidade ac da amostra em pó na faixa de temperaturas entre 1,5 K e 14,4 K. Na porção paramagnética da curva de susceptibilidade, um ajuste linear de  $1/\chi$  baseado na lei de Curie-Weiss resultou em temperatura de Curie negativa demonstrando que a transição é antiferromagnética. Por outro lado, na porção antiferromagnética, em baixas temperaturas, observamos um ponto de máxima derivada a 2,7 K sendo, então, possível estimar  $T_N$  como sendo igual a 2,7 K.

1. R. L. Carlin and F. Palacio, *Coord. Chem. Rev.* **65**, 141 (1985)

2. C. S. M. Partiti, H. R. Rechenberg and J. P. Sanchez, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **21**, 5825 (1988)

3. J. L. Fourquet, F. Plet and Y. Calage, *J. Solid St. Chem.* **74**, 34 (1988)

Apoio financeiro do CNPq

### ESTUDO DE CAULINITA DO AMAZONAS POR DIFRATOMETRIA DA RAIOS-X EM ALTAS TEMPERATURAS

WILSON OTTO GOMES BATISTA

*Centro Federal de Educação Tecnológica da Bahia - CEFET-Ba.*

ZBIGNIEW BARAN, THIERRY LEMAIRE

*Instituto de Física, UFBA.*

No presente estudo propomos o uso da técnica de difração de raios-x em temperaturas elevadas para estimar o índice de Hinckley-HI [1] em várias temperatura

dentro da faixa 25-600°C. Neste estudo usamos uma caulinita de excelente cristalização proveniente do Amazonas. Os espectros de difração de raios-X foram obtidos com auxílio Câmara Rigaku de Alta Temperatura, radiação  $\text{CuK}\alpha$  produzida por ânodo rotatório, fenda de divergência=1°, fenda receptora=0.3 mm e velocidade de varredura=0.5° 2 $\theta$ /min. As reflexões na faixa 19°-28° 2 $\theta$  e 33°-40° 2 $\theta$ , e também as proeminentes reflexões basais 001 e 002 próximas a 12.3° e 24.8° 2 $\theta$  foram observadas. As reflexões 021 e 111 são bem definidas e com visível separação entre 11 $\bar{1}$  e 1 $\bar{1}1$ . Uma importante característica do espectro de difração é a presença de baixo ruído entre as reflexões 020 e [2]. O grau de desordem estrutural em nossa amostra foi estimado através HI como função da temperatura, a saber, 25,160,200,250,300,350,400 e 450°C. Os gráficos de HI vs temperatura mostra que o valor de HI cresce de 1.53 a 1.64 em 25-160°C e depois os valores de HI permanece praticamente constante até 450°C. Com o aumento da temperatura os picos de difração desaparecem entre 450-510°C. Parece que, no primeiro estágio de aquecimento certos tipos de defeitos são provavelmente recozidos, e no segundo estágio a estrutura de defeitos permanece estável. Os tipos destes defeitos são caracterizados através do programa "Expert System" [3]. Assim comparando os espectros de difração experimental e simulado para diversas temperaturas, podemos avaliarmos a evolução da estrutura de defeitos.

[1] Hinckley, D.N., *Clays Clay Mineral* (1963), **11**, 229-235.

[2] Plançon, A. et al, *Clay Mineral* (1988), **23**, 249-60.

[3] Plançon, A. and Zacharie, C., *Clay Minerals*, **25**, 249-260.

### OBTENÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE VIDROS BORATOS DOPADOS COM $\text{Cr}^{3+}$ E $\text{Nd}^{3+}$ PARA INVESTIGAÇÃO DE TRANSFERÊNCIA DE ENERGIA

L. S. KANASHIRO, W. M. PONTUSCHKA

*Instituto de Física - USP*

O estudo da transferência de energia do cromo para o neodímio tem sido objeto de interesse devido à aplicação desse efeito para o aumento da eficiência de bombeamento em lasers de neodímio. Usamos o vidro aluminoborato de bário com composição  $20\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 50\text{B}_2\text{O}_3 \cdot 30\text{BaO}$  (mol%) como vidro-base para esses íons. Os vidros foram fundidos à temperatura de 1300°C em gás inerte a fim de obtermos vidros com íons  $\text{Cr}^{3+}$ . Para isso foram realizados estudos do processo de oxi-redução em vidros e experimentos visando obter as condições adequadas para redução dos íons  $\text{Cr}^{6+}$  para  $\text{Cr}^{3+}$ . As amostras foram analisadas pela técnica de

EPR para garantir a presença dos íons desejados. Todas as medidas foram feitas à temperatura ambiente. No espectro do vidro com  $\text{Cr}^{3+}$  observamos em  $13000\text{-}20000\text{cm}^{-1}$  e  $18000\text{-}26000\text{cm}^{-1}$  as bandas de absorção do íon  $\text{Cr}^{3+}$ , referentes às transições  ${}^4\text{A}_2 \rightarrow {}^4\text{T}_2$  e  ${}^4\text{A}_2 \rightarrow {}^4\text{T}_1$ , respectivamente. A fluorescência tem origem na transição do nível  ${}^4\text{T}_2$  para o fundamental  ${}^4\text{A}_2$ , localizada em  $9000\text{-}15000\text{cm}^{-1}$ . Para o neodímio obtivemos um espectro de absorção típico desse íon observado em outros vidros boratos. As emissões fluorescentes do  $\text{Nd}^{3+}$  em  $9000\text{-}10000\text{cm}^{-1}$  e  $11000\text{-}12000\text{cm}^{-1}$  correspondem às transições  ${}^4\text{F}_{3/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{11/2}$  e  ${}^4\text{F}_{3/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{9/2}$ , respectivamente. A posição das bandas de absorção do  $\text{Nd}^{3+}$  com relação ao espectro de emissão do  $\text{Cr}^{3+}$  antecipa a possibilidade de ocorrência de transferência de energia entre os íons. Para altas concentrações de  $\text{Nd}^{3+}$ , não se observa fluorescência do íon  $\text{Cr}^{3+}$  indicando que a transferência de energia do nível  ${}^4\text{T}_2$  do  $\text{Cr}^{3+}$  para o nível  ${}^4\text{F}_{3/2}$  do  $\text{Nd}^{3+}$  ocorre através de um mecanismo não-radiativo.

#### FASE PARAELÉTRICA METAESTÁVEL NO $\text{KH}_2\text{PO}_4$ ABAIXO DE 120 K.

ILDE GUEDES, PAULO DE TARSO CAVALCANTE  
FREIRE, MARCOS ANTONIO ARAÚJO SILVA,  
FRANCISCO ERIVAN DE ABREU MELO, JOSUÉ  
MENDES FILHO

*Universidade Federal do Ceará*

SANCLAYTON GERALDO CARNEIRO MOREIRA

*Universidade Federal do Pará*

ALAOR SILVÉRIO CHAVES

*Universidade Federal de Minas Gerais*

O  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  (KDP) é o protótipo de uma família de cristais ferroelétricos com ligações químicas do tipo ponte de hidrogênio. Suas propriedades físicas têm sido extensivamente estudadas nas últimas cinco décadas. Por isso é bem conhecido que o KDP apresenta, no mínimo, quatro modificações cristalinas no intervalo de temperatura entre 10K e 525K. As duas fases mais estudadas são a fase tetragonal ( $T_i$ 122K) onde o cristal é paraelétrico, e a fase ortorrômbica ( $T_j$ 122K) onde o cristal é ferroelétrico. A fase monoclinica é obtida para temperaturas acima de 453K. Para  $T_i$ 60K, ocorre uma transição de fase que muda a estrutura cristalina de ortorrômbica para monoclinica. Estas transições são ditas serem estáveis, pois são obtidas apenas variando continuamente a temperatura. No entanto, outras transições podem ser observadas com a aplicação de campos elétricos e pressões uniaxiais, que são denominadas metaestáveis. Algumas destas transições já foram observadas por nosso grupo [1-3], onde estudamos em que condições elas ocorrem e quais são as condições de reversibilidade. Geralmente para  $T_j$ 122K, estas transições são do tipo conformacional, ou seja, elas mantêm a estrutura do KDP ortorrômbica, mas numa nova classe do mesmo grupo espacial. Também, elas

são irreversíveis, *i.é.*, ao retirarmos o campo elétrico ou a pressão externos não obtemos a fase original, que é reobtida ao aquecermos acima de 122K e depois resfriarmos abaixo de 122K. Entretanto, ao revertermos o campo aplicado em 110K observamos uma transição de fase surpreendente. Esta nova fase é similar à fase tetragonal acima de 122K. Para nos certificarmos da existência desta nova fase, denominada de paraelétrica induzida (PEI), baixamos a temperatura até 20K e obtivemos o mesmo resultado. Neste trabalho, discutimos como obter a PEI e como explicá-la através de um modelo fenomenológico da energia livre de Landau.

[1]S.G.C. Moreira *et al.*, *Ferroelectrics* **160**, 47 (1994).

[2]S.G.C. Moreira *et al.*, *Ferroelectrics* **54**, 6047 (1996).

[3]F.E.A. Melo *et al.*, no prelo.

#### Criação de Centros de Cor Induzidos por Laser e Campo Elétrico em Cristais de KI puro

LUIS HUMBERTO DA CUNHA ANDRADE, ANTÔNIO

CARLOS HERNANDEZ, MÁXIMO SIU LI

*Instituto de Física de São Carlos - USP*

Sabemos que centros de cor em cristais de halogenetos alcalinos são criados através de métodos já conhecidos como exposição de raio x, injeção de elétrons e coloração aditiva. Uma alternativa diferente para a criação de centros de cor em KI, é fazendo incidir um feixe de laser UV e campo elétrico. Amostras de KI foram submetidas a um campo elétrico de 200V/mm e simultaneamente exposto à linha de 356 nm de um laser de  $\text{Kr}^+$  (700mW) à temperatura de  $\text{N}_2$  líquido por 2 horas. Como resultado o espectro de absorção apresenta 3 bandas em 668, 347 e 252nm. A aplicação subsequente da linha de 647 nm traz como consequência uma pequena diminuição da banda de 668 nm. Experimentos realizados sem o campo elétrico, mostram que esses centros de cor praticamente não aparecem. Sabendo que a banda proibida do KI é aproximadamente 6.3 eV e a linha de 356 nm do laser corresponde a 3.49 eV, acreditamos que a formação de centros nas amostras seja devido a absorção de dois ftons e associados com o campo elétrico que favorece a formação desses defeitos. O fato da pequena produção de centros sem aplicação do campo elétrico, permite afirmar que sua aplicação é importante para a formação desses centros. A aplicação subsequente da linha de 647 nm e pouca variação observada no decréscimo da banda em 668 nm mostra a formação de um centro de cor mais resistente à fotoconversão. Esta criação e destruição de centros de cor nas amostras de KI puro é uma ferramenta importante para o estudo desses cristais dopados com  $\text{Yb}^{2+}/\text{CN}^-$ .

## EVIDENCE OF THE CORRELATION LENGTH GROWING NEAR STRUCTURAL AND ORIENTATIONAL GLASS TRANSFORMATIONS

VALERY B. KOKSHENEV

*Departamento de Física, ICEx, Universidade Federal de Minas Gerais*

As established in molecular simulation studies (C.Dasgupta *et.al.*, Europhys. Lett., v.15, p.307, 1991) and R.M. Ernst *et.al.*, Phys.Rev.B43, p.8070, 1991) no correlation length growing but only rising of the relaxation time scale through structural phase transition in glass forming materials can be observed as the temperature approaches to the transition from above. We show that this statement is in a contradiction with findings of real experiments. The analysis is given through the generalized phenomenological description of the structural relaxation dynamics which is considered in an effective medium of dimension  $d$ . Dynamical correlations are introduced through the relaxation time  $\tau_R \sim R^z$  of a cluster of radius  $R$ . In the low-frequency region the relaxation function is presented in an explicit form  $\phi \sim \exp(-t^\beta)$  with the stretch exponent  $\beta = d/(z+d)$ . It is proved that near the Kohlrausch-Williams-Watts frequency domain the proposed algebraic scaling is consistent with the model-independent Dixon-Nagel master curve, established for real glass-forming liquids. We argue that the fragility  $m = m_0(\beta^{-1} - 1)$ , which indicates the deviation of the characteristic relaxation time from Arrhenius behavior, observed near the glass transition temperature complies with the growing correlation length conception for all family of the glass forming materials, including molecular overcooled liquids, molten salts, alcohols, amorphous polymers as well as orientational and amorphous glass solids. Financial support of CNPq is acknowledged.

## RELAXATION DYNAMICS OF PHASE TRANSFORMATIONS: CLUSTER-GROWTH MECHANISMS

VALERY B. KOKSHENEV

*Departamento de Física, ICEx, Universidade Federal de Minas Gerais*

We have analyzed qualitative aspects of the late-time cluster dynamics within the framework of mathematical and physical models which eventually bring to the Kohlrausch-Williams-Watts-form relaxation, i.e.  $\phi \sim \exp(-t^\beta)$ . This is given in terms of the pre-transition dynamical clusters. Dynamical correlations are introduced through the cluster-radius power-growing characteristic relaxation time and are described by the growth-cluster critical exponent  $z$ . On the basis of the proposed model the known Brownian-type mechanisms are discussed for the diffusion-to-trap model and for the Lifshitz-Slyosov diffusion-droplet model employed in normal liquids. The expression  $\beta = d/(z+d)$ , obtained

for the stretched exponent in an explicit form, has been compared with findings of the response experiments, which use viscoelastic, dielectric, calorimetric and optical technics. The effective dimension  $d$  and cluster-growth dynamical exponent  $z$  have been derived from experimental data for the particular cases of the glass-forming overcooled molecular ( $d = 6$ ) and polymeric ( $d = 5/2$ ) liquids. The Lévy-flight (non-Brownian) diffusion regimes ( $1 < z < 2$ ) are predicted for the cluster-growth kinetics for certain cases of glass-forming liquids and solids. Financial support of CNPq is acknowledged.

## TRANSFORMAÇÕES DE FASE DURANTE A MECANOSSÍNTESE

IGOR FROTA DE VASCONCELOS, REGINALDO SOUZA DE FIGUEIREDO

*Departamento de Física, UFCE*

JACQUES FOCT

*Laboratoire de Métallurgie Physique, USTL, França*

A mecanossíntese (Mechanical Alloying) apareceu nos anos 70 na fabricação das ODS (ligas com dispersão de óxido). Hoje em dia é usada na obtenção de diversos materiais tais como ligas amorfas, nanocristalinas, ligas com materiais imiscíveis entre outros. Se um por lado essa técnica é tecnologicamente promissora, por outro, os mecanismos envolvidos durante os processos ainda não estão completamente elucidados. Uma descrição quantitativa da mecanossíntese seria de grande valia para seu maior entendimento. Existem ainda lacunas no que diz respeito a sua descrição, principalmente no que concerne às leis de transformação de fase. Nos estudos clássicos de transformação de fase, as leis cinéticas se distinguem das leis de crescimento. As leis cinéticas permitem uma descrição global e quantitativa do volume da fase em função do tempo. Leis de crescimento traduzem uma modelagem microscópica local do fenômeno de transformação de fase e permitem a construção das leis cinéticas a partir de observações microscópicas e/ou modelos. Na mecanossíntese, essas duas abordagens existem ainda que raramente explícitas na literatura. Assim como as leis cinéticas podem ser deduzidas a partir das leis de crescimento, algumas informações importantes sobre as leis de crescimento podem ser obtidas da cinética global. Neste trabalho, propõe-se um modelo de passagem das leis cinéticas para as leis de crescimento, o que nos permitiu a introdução do conceito de atividade triboquímica. Esse modelo é sustentado pela análise de dados experimentais de ligas formadas por Fe-C, Fe-N e Fe-Cu e por resultados que estão sendo obtidos por computação numérica, que, através de dinâmica molecular em duas dimensões, procura simular o comportamento dos grãos do material durante os choques.

### INVESTIGAÇÕES DIELÉTRICAS DA TRANSIÇÃO DE FASE FERROELÉTRICA NO CRISTAL $SrAlF_5$

MARCELO AUGUSTO SILVA DE OLIVEIRA, ROBERTO LUIZ MOREIRA, ALEJANDRO PEDRO AYALA  
*Depto de Física, Universidade Federal de Minas Gerais*  
 JEAN-YVES GESLAND  
*Université du Maine Cristallogénese, 72017-Le Mans Cedex, France*

$SrAlF_5$  é um dos raros cristais contendo flúor que apresentam ferroeletricidade à temperatura ambiente. A estrutura proposta para este material pertence ao grupo tetragonal  $I4$ , mas uma pequena distorção ao longo do eixo  $c$  duplica este parâmetro, tornando melhor ajustável ao grupo tetragonal  $P4$ . Em 1981, baseado na relação AKJ, S.C. Abrahams *et al.*<sup>a</sup> previu a existência de uma transição de fase ferro-paraelétrica neste material por volta de 685K que levaria o cristal a um possível grupo espacial  $I4/m$ , sendo então adicionado um espelho horizontal a nova subcélula. Esta transição de fase foi confirmada por estes autores através de medidas de permissividade dielétrica e microcalorimétricas em amostras policristalinas e posteriormente por medidas de birrefringência em amostras monocristalinas<sup>b</sup>. Devido a falta de estudos sistemáticos acerca desta transição, iniciamos investigações cuidadosas com várias técnicas em uma ampla faixa de temperatura. Em nosso trabalho, monocristais crescidos por Czochralsky foram investigados por técnicas dielétricas e calorimétricas. As medidas dielétricas foram feitas ao longo das direções cristalográficas (100) e (001) entre 100 e 900K, para frequências variando entre 5 Hz e 13 MHz. As análises térmicas foram feitas utilizando um DSC 30 Mettler, com taxa de aquecimento e resfriamento de 10K/min sob atmosfera de hélio. Medidas dielétricas foram feitas utilizando seja um criostato, seja um forno, sob atmosfera de nitrogênio e a 1K/min. A transição de fase foi observada em ambas as direções e apresenta uma forte irreversibilidade bem como fenômenos de relaxação. Estes resultados estão sendo explicados baseado em um modelo que leva em conta a cinética da transição.

Financiamento: CNPq, FINEP e FAPEMIG.

<sup>a</sup>C. S. Abrahams, J. Ravez, A. Simon and J.P. Chaminade, *J. Appl. Phys.* **52**, 4740 (1981)

<sup>b</sup>S. Canouet, J. Ravez and P. Hagenmuller, *J. Fluorine Chem.* **27**, 241 (1985)

### MECANISMO DA EMISSÃO TERMOLUMINESCENTE DO $CaCO_3$ DOPADO COM $Mn^{2+}$ , $Sr^{2+}$ E $Mg^{2+}$

ZÉLIA SOARES MACÊDO, MÁRIO ERNESTO GIROLDO VALERIO, JOSÉ FERNANDES DE LIMA  
*Departamento de Física, CCET, Universidade Federal de Sergipe*

A calcita é um mineral encontrado em diversas formações geológicas. Sua termoluminescência (TL) tem sido investigada há algum tempo, tendo em vista principalmente seu papel na datação geológica de fósseis. Pouca atenção, no entanto, tem sido dada ao estudo dos mecanismos de TL da calcita, e muitas questões, como a natureza das armadilhas, o papel dos defeitos e os processos de excitação e emissão não estão ainda totalmente esclarecidas. Tendo em vista que as impurezas  $Mn^{2+}$ ,  $Mg^{2+}$  e  $Sr^{2+}$  são encontradas em um grande número de amostras de calcita natural, o objetivo deste trabalho é estudar o papel dessas impurezas no que se refere à estabilização dos centros de armadilhamento. O uso de amostras sintéticas, crescidas em nosso laboratório, nos permite controlar a concentração de impurezas presentes no material. Analisando as curvas de emissão TL, observamos que a calcita dopada com  $Mn^{2+}$  e  $Mg^{2+}$  ou com  $Mn^{2+}$  e  $Sr^{2+}$  apresenta dois picos de TL mais intensos do que a calcita que contém somente  $Mn^{2+}$ . Este comportamento sugere que os íons  $Sr^{2+}$  e  $Mg^{2+}$  estabilizam as armadilhas responsáveis pelos picos de emissão TL da calcita. Observamos ainda que um dos picos de emissão, a uma temperatura de aproximadamente 100°C, deslocase para temperaturas maiores ou menores, dependendo da impureza presente no cristal. Dando continuidade a este trabalho, investigamos, através do método de aquecimentos parciais, a possibilidade de superposição de dois picos na região de 100°C. Estudamos ainda a curva de emissão da calcita dopada com  $Mn^{2+}$ ,  $Mg^{2+}$  e  $Sr^{2+}$  simultaneamente, os espectros de emissão termoluminescente de amostras dopadas com cada uma destas impurezas, e o efeito de tratamentos térmicos nestes espectros.

### CORRENTES DE POLARIZAÇÃO E DESPOLARIZAÇÃO NO $BaLiF_3$ DOPADO COM METAIS DIVALENTES

ANA GARDÊNIA SANTOS MANGUEIRA, MÁRIO ERNESTO GIROLDO VALERIO, JOSÉ FERNANDES DE LIMA  
*Depto. de Física - UFS*  
 LÚCIA PRADO, SÔNIA LÍCIA BALDOCHI, NILSON DIAS VIEIRA JÚNIOR, SPERO PENHA MORATO  
*IPEN - SP*

O presente trabalho é o terceiro em uma série de trabalhos dedicados ao estudo das propriedades dos defeitos induzidos pela presença de metais divalentes no  $BaLiF_3$  através de diferentes técnicas experimentais. No presente trabalho estamos estudando os mecanismos de polarização e despolarização induzidos pelo  $Ni^{2+}$  e  $Pb^{2+}$  no  $BaLiF_3$  através das técnicas de Correntes de Polarização e Despolarização Estimuladas Termicamente (TSPC e TSDC, respectivamente). O  $BaLiF_3$  é um cristal iônico de estrutura conhecida como perovskita invertida com os cátions  $Ba^{2+}$  e o  $Li^+$  e os

íons  $F^-$  ocupando sítios de simetria  $O_h$  e  $D_{4h}$  respectivamente. O conhecimento da estrutura dos defeitos intrínsecos e os gerados por impurezas neste material é de grande importância no que se refere a aplicação em lasers e dispositivos ópticos. As amostras foram crescidas pela técnica de Czochralski em atmosfera dinâmica hidrofluorante. As medidas de TSPC e TSDC estão sendo realizadas segundo um ciclo térmico que se inicia com a TSPC, entre temperatura próxima ao  $N_2$  líquido até 400K com tensões de polarização de até 1100V seguindo um programa de aquecimento linear com taxa de aproximadamente 2K/min, seguida de um resfriamento rápido com o campo aplicado e uma posterior medida de TSDC até 450K segundo um mesmo programa de aquecimento da TSPC. Os resultados obtidos indicam a presença de relaxações abaixo de 300K que podem ser devidas a mecanismos dipolares enquanto que as relaxações a altas temperaturas são devidas a condutividade iônica do material. Outras relaxações entre 200 e 400K estão presentes ainda sem uma identificação clara do mecanismo de polarização envolvido. (Apoio CNPq).

#### RESPOSTA TERMOLUMINESCENTE DO QUARTZO EM FUNÇÃO DO TRATAMENTO TÉRMICO

ANTÔNIO JOSÉ DE JESUS SANTOS, MÁRIO ERNESTO GIROLDO VALERIO, JOSÉ FERNANDES DE LIMA  
*Depto. de Física - UFS*

Neste trabalho estamos fazendo um estudo da emissão termoluminescente (TL) de baixas temperaturas do quartzo exposto à radiação gama de cobalto 60 e com diferentes temperaturas de cozimento. As amostras foram transformadas em pó com granulação de 0.075 a 0.150 mm. As medidas foram colhidas em um equipamento desenvolvido no próprio laboratório que opera desde a temperatura de  $-100^{\circ}C$  a temperatura ambiente. Todos os tratamentos térmicos foram feitos entre  $100^{\circ}C$  e  $800^{\circ}C$  por uma hora em um forno de atmosfera aberta com resfriamento lento ou rápido e as doses de radiação gama foram feitas a temperatura ambiente. Após a amostra atingir o equilíbrio térmico, aplicamos luz UV sobre a mesma durante três minutos no próprio aparato de medida e em seguida foram registradas as curvas de emissão termoluminescente. Verificamos que os diferentes tratamentos térmicos e a forma do resfriamento alteram a curva de emissão TL. A amostra sem tratamento térmico apresentou dois picos nas temperaturas de  $-50^{\circ}C$  e  $-23^{\circ}C$ , a amostra recozida a  $100^{\circ}C$  por uma hora (resfriamento rápido) apresentou dois picos nas temperaturas de  $-50^{\circ}C$  e  $-23^{\circ}C$  enquanto que a amostra tratada da mesma forma que a anterior, porém com resfriamento lento, apresentou mais outro pico a  $-5^{\circ}C$ . Já na amostra tratada a  $800^{\circ}C$  houve o surgimento de 5 picos no intervalo de temperatura de  $-70^{\circ}C$  a  $+10^{\circ}C$  onde o pico de  $-8^{\circ}C$  apresentou uma

intensidade bem maior que os demais. Estes resultados indicam que as diferentes condições de tratamento térmico estão induzindo a formação ou a destruição de centros de armadilhamentos. (Apoio CNPq).

#### DINÂMICA DOS ESTADOS EXCITADOS E TRANSFERÊNCIA DE ENERGIA EM VIDROS FLUORETOS DOPADOS COM ÍONS DE $Cr^{3+}$ , $Tm^{3+}$ E $Ho^{3+}$

LILIA CORONATO COURROL, LAÉRCIO GOMES,  
 NILSON DIAS VIEIRA JÚNIOR

*Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - CNEN-SP*  
 YOUNES MESSADDEQ

*Instituto de Química de Araraquara - UNESP*

MICHAEL POULAIN

*Université de Rennes*

Os vidros fluoretos dopados com Cromo, Túlio e Hólmio, são bons candidatos a meios laser ativos, na região de 2 microns, bombeados por lâmpada flash. A dinâmica do estado excitado dos íons de Cromo, Túlio e Hólmio nos vidros fluoretos e o mecanismo de transferência de energia entre essas impurezas são estudadas à temperatura ambiente sobre excitação com lâmpada flash. Os íons de Cr apresentam forte interação com a rede e podem transferir energia eficientemente para os íons de Tm e Ho. Excitados, os íons de Tm, sensitizadores do Ho, apresentam 3 caminhos possíveis de desexcitação: uma desexcitação interna de um mesmo íon de Tm; uma relaxação cruzada entre íons de Tm adjacentes do tipo  ${}^3H_4, {}^3H_6 \rightarrow {}^3F_4, {}^3F_4$  e uma transferência direta Tm-Ho. A caracterização da transferência de energia entre íons de Cr e Tm e Tm e Ho é analisada utilizando-se o método de Förster-Dexter que consiste na determinação dos raios críticos de interação a partir dos espectros de absorção do íon doador e o espectro de emissão do íon aceitador. Os parâmetros microscópicos são também analisados através dos ajustes dos tempos de vida dos níveis de onde partem as transferências de energia. Os dois métodos são comparados. A partir do raio crítico de interação é possível; se obter as probabilidades de transferência de energia. Devido a larga banda de emissão na região de 2 microns nesses vidros é discutida a possibilidade de se obter um laser sintonizável nessa região, simplesmente controlando-se a concentração dos dopantes para que haja ganho no sistema. Apoio: FAPESP

#### Produção e caracterização de fibras e filmes de óxidos dopados por técnicas de emissão por conversão ascendente.

MÁXIMO SIU LI, FÁBIO SIMÕES DE VICENTE,  
 ANTÔNIO CARLOS HERNANDES  
 IFSC-USP

Parte deste trabalho consiste na caracterização óptica de fibras vitrocerâmicas dopadas com terras raras, nas

quais se observa o efeito de emissão por conversão ascendente (up-conversion) quando estas fibras são excitadas opticamente por um laser na região do vermelho. A fibra utilizada é composta de  $ZrO_2:Er^{3+}:Y^{3+}:Pr^{3+}$  e para comparação do efeito de conversão ascendente utilizamos também um cristal de  $LiNbO_3:Er^{3+}$ . Como fonte de excitação foi utilizado um laser de Kriptônio operando em regime multilinhas (647-676,4) nm, e o espectro de emissão da fibra e do cristal foi obtido com um monocromador (Jarrel 0,24m) e um sistema de aquisição de dados. O espectro de emissão das fibras foi comparado com o espectro de emissão do cristal de niobato de lítio, com o intuito de verificar os efeitos de rede cristalina das matrizes e blindagem do íon  $Er^{3+}$  nestes diferentes materiais. Os espectro de emissão do cristal está em torno de 550nm e apresenta linhas estreitas características do  $Er^{3+}$  referentes as transições  ${}^2H_{11/2} - {}^4I_{15/2}$  (510-540 nm) e  ${}^4S_{3/2} - {}^4I_{15/2}$  (540-570 nm) o que não acontece com as fibras que apresentam um espectro semelhante ao do cristal mas com um alargamento de linhas. Este alargamento pode estar relacionado com a estrutura cristalina e as múltiplas posições que o íon  $Er^{3+}$  pode ocupar na rede seja da Zircônia (cúbica) ou do cristal de  $LiNbO_3$  (hexagonal). Pretende-se também produzir filmes com os mesmos materiais das fibras com o intuito de verificar qual o comportamento dos efeitos de emissão nesta configuração, já que os filmes apresentam formação policristalina enquanto que os cristais e fibras se apresentam na forma de monocristais.

#### ESTUDO DO EFEITO DAS IMPUREZAS $CN^-$ E $Sn^{2+}$ , EM AMOSTRAS DE KCl, ATRAVÉS DE MEDIDAS DE CDTE.

ROSA MARIA FERNANDES SCALVI, LÍGIA DE OLIVEIRA

Depto. de Física - UNESP - CP 473 - Bauru - SP - 17033-360,

MÁXIMO SIU LI, ANTÔNIO CARLOS HERNANDEZ  
F.C.M. - IFSC- USP - CP 369 - São Carlos - SP - 13560-970

Os cristais de halogenetos alcalinos dopados com íons de configuração eletrônica  $ns^2$  em seu estado fundamental tem sido bastante investigados. Estes cristais são considerados hospedeiros ideais para o estudo de centros

de cor, pois neste caso, defeitos ou impurezas significam uma perturbação às propriedades ópticas do cristal perfeito. Um método que permite obter informações sobre o comportamento do processo de relaxação em dielétricos, tipo halogenetos alcalinos da família KCl, é o de medidas de Corrente de Despolarização Termicamente Estimulada, CDTE. Neste trabalho apresentamos os dados de corrente de despolarização em função da temperatura registrados para um cristal de KCl dopado multiplamente com 1%  $CN^-$ , 0,5%  $SnCl_2$ , com espessura 1,30 mm. As medidas de CDTE foram realizadas com taxa de aquecimento de  $0,08 Ks^{-1}$  e um campo de polarização de 2,0 kV/cm, aplicado por 5 minutos na amostra à temperatura ambiente e após isto abaixada até 11 K. Estas medidas mostram o aparecimento de uma banda larga em torno de 254 K indicando a presença de relaxação dipolar. Para obtermos o valor da Energia de Ativação,  $E_a$ , utilizamos o método melhorado de Prakash [1]. Entretanto, a altura do pico apresentou um decréscimo em cada medida subsequente; este resultado poderia ser melhor investigado diminuindo-se a espessura do cristal e consequentemente aplicando-se um campo elétrico bem menos intenso, por exemplo. A fim de verificarmos o efeito da dopagem com  $CN^-$ , deveremos realizar medidas com cristais de KCl dopados somente com  $SnCl_2$ . Paralelamente as medidas de CDTE, foram realizadas medidas de absorção óptica no cristal, cujos resultados também são apresentados neste trabalho. [1] R.Vila, A. Ibarra and M. Jimenez de Castro, Phys. Stat. Sol. (a), 105, (1988), 61.

#### DESENVOLVIMENTO, CARACTERIZAÇÃO E PROPRIEDADES DE MATERIAIS (Transições de Fase / Material Monocristalino) – 13/06/97

#### ROLE OF COUPLING BETWEEN STRAINS AND ORDER PARAMETER GRADIENT IN CRYSTALS.

PIERRE SAINT-GRÉGOIRE

CEMES, BP 4347, 31055 TOULOUSE Cedex, FRANCE

When the symmetry breaking which occurs at phase transitions in crystals is induced by an order parameter admitting a Lifshitz invariant, an intermediate incommensurate phase (IC) may take place. A Lifshitz term is written in such a way that it couples antisymmetrically a component of the order parameter to the spatial derivative of another component.

Incommensurate phases can nevertheless be encountered in systems where the Lifshitz term is absent. In such cases the IC phase can be attributed to "Lifshitz type" invariants which express couplings between different degrees of

freedom, for instance soft phonon branch and a lower branch in displacive systems. In most cases the "lower" branch is an acoustic branch and the term which stabilizes the IC phase corresponds to a coupling between order parameter gradient and strain.

A review is given of studies of such IC phases, where main interesting results are obtained by means of inelastic neutron and light scattering. The cases of thiourea, biphenyl,  $Sn_2P_2Se_6$ , quartz, and others will be presented. Transmission electron microscopy results can also provide relevant information, as will be discussed for the specific case of quartz. Finally systems where such couplings exist but where the IC phase is not realized, as quantum paraelectrics, are also presented.

## COMPATIBILIDADE DE DOMÍNIOS FERROELÁSTICOS NÃO SINGULARES DO

$LiKSO_4$ .

ROBERTO LUIZ MOREIRA

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais

O interesse no estudo do Sulfato de Lítio e Potássio ( $LiKSO_4$ ) justifica-se pela variedade de suas transições de fase estruturais, destacando-se fases piroelétricas, ferroelásticas e talvez, fases incomensuráveis. Em particular, a baixas temperaturas, este material apresenta uma transição de fase reconstrutiva, entre a estrutura hexagonal de temperatura ambiente ( $P6_3$ ) para uma estrutura trigonal ( $P31_c$ ), seguida de uma transição de primeira ordem para uma estrutura monoclinica ( $C_c$ ). Neste último caso, observamos o aparecimento de uma deformação elástica espontânea no plano basal da célula unitária do cristal, a qual se acopla linearmente com o parâmetro de ordem primário da transição. O caráter ferroelástico da fase monoclinica, assim como a presença de uma pequena histerese térmica na transição, têm sido bem demonstrados. Recentemente, nós utilizamos técnicas de difração de raios-X para investigar as transições de fase de baixa temperatura do  $LiKSO_4$ . Em particular, nós focalizamos o comportamento térmico da deformação elástica espontânea, e observamos o aparecimento de um padrão complexo de domínios ferroelásticos. No presente trabalho, nós apresentamos uma discussão acerca do aparecimento da deformação elástica e mostramos que os domínios observados se acomodam segundo ângulos completamente correlacionados à deformação elástica espontânea. A estrutura de domínios observada pode ser interpretada em termos da compatibilidade entre os domínios ferroelásticos não singulares apresentados pelo cristal.

Financiamento: FAPEMIG, CNPq e FINEP.

## O CARÁTER DIFUSO DA TRANSIÇÃO DE FASE RECONSTRUTIVA EM CRISTAIS MISTOS TIPO $LiK_{1-x}Rb_xSO_4$

ARIETE RIGHI, MARCOS ASSUNÇÃO PIMENTA, ROBERTO LUIZ MOREIRA

Depto de Física, Universidade Federal de Minas Gerais  
PATRICE BOURSON

MOPS, Université de Metz - SUPELEC, Metz, França

O sulfato de lítio e potássio ( $LiKSO_4$ ) apresenta uma transição de fase reconstrutiva a  $T_c = 708K$ , acompanhada por um salto importante da condutividade elétrica. À temperatura ambiente, este cristal apresenta uma simetria hexagonal pertencente ao grupo de espaço  $P6_3$ . Acima de  $T_c$ , alguns autores propõem uma estrutura ortorrômbica normal pertencente ao grupo de espaço  $Pnma$ , enquanto outros defendem a existência de uma fase incomensurável, cuja estrutura média ortorrômbica pertence ao mesmo grupo de espaço acima. Recentemente, nós iniciamos o estudo de compostos mistos do tipo  $LiK_{1-x}Rb_xSO_4$ , para  $x \leq 0.50$ , crescidos pela técnicas de evaporação lenta de solução aquosa. Estes materiais também apresentam uma transição de fase a alta temperatura, análoga a do cristal puro. Neste trabalho nós mostramos o caráter difuso desta transição, por meio de medidas de condutividade elétrica em função da temperatura. Esta difusibilidade é devida a ocorrência de transições de fase locais à temperaturas diferentes na amostra. Nós apresentamos um método que permite determinar a função de distribuição de temperaturas críticas  $f(T_c)$ , e comparamos com os resultados obtidos por calorimetria (DSC) para o mesmo sistema. Nós mostramos também que estas funções podem ser perfeitamente descritas por uma distribuição Gaussiana. No caso dos sistemas mistos, nós observamos outros fatos interessantes, tais como uma diminuição da temperatura média de transição, o alargamento gradual do intervalo de transição e o aparecimento de máximos adicionais na função distribuição de temperaturas críticas com o aumento da concentração de rubídio. Este último fato pode ser atribuído a existência de "clusters" com diferentes concentrações nos sistemas mistos (flutuações composicionais), análogo à fase de Griffiths descrita para sistemas magnéticos diluídos.

Financiamento: CNPq, FINEP e FAPEMIG.

## INFLUÊNCIA DE UMA FASE RICA EM TE NO COEFICIENTE SEEBECK DE CRISTAIS DE TELURETO DE BISMUTO TIPO-N.

MARIA CLÁUDIA CERCHIARI CUSTÓDIO, ANTONIO CARLOS HERNANDES

IFSC-USP

O composto telureto de bismuto ( $Bi_2Te_3$ ) é um semicondutor da família V-VI, que apresenta propriedades termoelétricas. Desta família é o composto simples, mais importante para aplicações em dispositivos refrigeradores, utilizando-se para tanto, a associação de materiais tipo-p e tipo-n. A formação de materiais tipo-p e tipo-n se dá pelo desvio de estequiometria, sendo que materiais com excesso de Te são tipo-n e materiais com excesso de Bi são tipo-p. Diversos cristais tipo-p e tipo-n foram preparados pela técnica de Bridgman, e apresentamos, neste trabalho, o aparecimento de uma fase rica em Te ao longo de alguns cristais tipo-n. O aparecimento desta fase é associado a superresfriamento constitucional localizado, e surgiu em materiais resultantes de um processo de síntese ainda não otimizado e de um sistema de crescimento com baixo gradiente de temperatura axial na interface sólido-líquido. A otimização do processo de síntese e a utilização de um sistema de crescimento com maior gradiente de temperatura na interface sólido-líquido levou a eliminação desta fase. A existência da fase de Te foi verificada utilizando-se microscopia eletrônica de varredura. Efetuamos também medidas de coeficiente Seebeck em função do comprimento dos cristais e de resistividade elétrica. Com os resultados das medidas termoelétricas, foi possível associarmos a diminuição na intensidade do coeficiente Seebeck ao aparecimento da fase de Te.

### ESTUDO DA PURIFICAÇÃO DE SILÍCIO GRAU METALÚRGICO VIA FUSÃO POR FEIXE DE ELÉTRONS

ADRIANA FRANCO BUENO BRAGA, PAULO ROBERTO MEI, JORGE OTUBO  
UNICAMP

Durante as duas últimas décadas vários autores têm trabalhado no sentido de se obter uma rota alternativa, de baixo custo, para obtenção do silício policristalino para aplicação em células solares. Neste trabalho silício grau metalúrgico (Si-GM), previamente tratado via lixiviação ácida, foi submetido a um processo de fusão por feixe de elétrons para se avaliar a potencialidade do método de purificação. As amostras foram obtidas mediante nove tratamentos distintos onde, através da variação do tempo de processo e potência do feixe, procurou-se estabelecer a melhor condição. Foram utilizadas as potências de 12, 16 e 18,7 KW, e os tempos de 0, 10 e 20 minutos. As amostras apresentaram a geometria de uma calota. Pôde-se observar o efeito do tempo de fusão e potência do feixe através da variação da pressão interna da câmara. No início do processo a pressão da câmara é da ordem de  $10^{-3}$  Pa. À medida que se eleva a potência do feixe essa pressão aumenta chegando a  $10^{-1}$  Pa, decorrente da evaporação das impurezas da matriz de silício. É observada uma tendência de aumento da pressão interna da câmara de vácuo à medida que se eleva a potência do feixe e/ou o

tempo de fusão. Além da eliminação de elementos como Al, Ca, Cr, Na e P, pôde-se perceber uma tendência de concentração das impurezas que não evaporam, no centro da amostra. Trabalhos preliminares para se avaliar a variação da resistividade das amostras, indicaram valores entre 0,3 a 1  $\Omega$ .cm. O método pode servir como uma rota adicional à fusão unidirecional, uma vez que o princípio físico de purificação é diferente.

### CRESCIMENTO E CARACTERIZAÇÃO ÓPTICA DE BTO DOPADO COM VANÁDIO

J. F. CARVALHO

*Instituto de Física - Universidade Federal de Goiás*

A. C. HERNANDES, J. P. ANDREETA

*Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo*

J. FREJLICH

*Instituto de Física - Universidade de Campinas*

Os cristais de  $Bi_{12}TiO_{20}$  (BTO) são cristais cúbicos pertencentes ao grupo espacial I23 com uma estrutura comum a uma grande família de cristais conhecida como sillenita. São cristais eletro-ópticos que exibem alta sensibilidade fotorrefrativa e resposta rápida fazendo com que sejam bastante adequados como meio ativo para processamento óptico de sinal e holografia dinâmica. No entanto, eles apresentam algumas desvantagens como atividade óptica elevada e coeficiente eletro-óptico baixo, o que limita a eficiência de difração das redes holográficas. Alterações de composição química são um meio possível para tentar superar estas deficiências. Neste trabalho mostramos resultados do crescimento de cristais de BTO dopados com vanádio (BTO:V) os quais apresentaram atividade óptica significativamente menor e fotocondutividade mais elevada. A atividade óptica foi reduzida de 6,3 para 4,1 graus por milímetro, para  $\lambda=632,8$  nm, o que representa uma diminuição de cerca de 35%. A absorção óptica e a fotocondutividade do BTO:V foram medidas no intervalo de 700 a 350 nm. Verificamos uma pequena alteração na absorção e um significativo aumento na fotocondutividade quando comparados com o BTO nominalmente puro. Estes resultados são para cristais crescidos por puxamento a partir de solução com composição molar de  $10Bi_2O_3 : 0.90TiO_2 : 0.05V_2O_5$  a uma taxa de 0,2 mm/h. Tentativas de crescimento de cristais a partir de solução mais rica em vanádio mostraram sérias dificuldades devido à instabilidades na interface cristal/líquido associadas ao superesfriamento constitucional com conseqüente perda da qualidade cristalina. Como o aumento da concentração de vanádio pode reduzir ainda mais a atividade óptica do cristal, novos esforços estão em andamento nos quais o aumento do gradiente de temperatura axial do forno de crescimento e diminuição da velocidade de puxamento estão sendo considerados.

**SrVO<sub>3</sub> AND Sr<sub>2</sub>VO<sub>4</sub> SINGLE CRYSTAL  
FIBER GROWTH EXPERIMENTS USING  
THE LHPG METHOD**

D. REYES ARDILA, J. P. ANDREETA  
*Universidade de São Paulo - São Carlos*

SrVO<sub>3</sub> and Sr<sub>2</sub>VO<sub>4</sub> belong to the structural family of Sr<sub>n+1</sub>V<sub>n</sub>O<sub>3n+1</sub>, n=∞ and n=1, respectively. SrVO<sub>3</sub> has a perovskite structure, is a n-type like conductor below room T, exhibits a typical behaviour of correlated electrons in the low T range and a linear resistivity reminiscent to that of high T<sub>c</sub> cuprates according to recent conductivity measurements in oxygen deficient bulk single crystals and sintered ceramic rods. Sr<sub>2</sub>VO<sub>4</sub> is a relatively new material involving vanadium in the d<sup>1</sup> electronic state, likely in SrVO<sub>3</sub>, is the only superconducting phase, besides SrVO<sub>3</sub>, of the Sr<sub>n+1</sub>V<sub>n</sub>O<sub>3n+1</sub> series, and it could have an enhancement of its superconductor behaviour when doped because of its structural characteristics. The search of non-cuprates superconducting oxides have stimulated

some interest to vanadates because of the possibility to form conducting compounds with a d<sup>1</sup> electronic configuration (V<sup>+4</sup>) that could have similar properties to the d<sup>9</sup> cuprates. Pure SrVO<sub>3</sub> and Sr<sub>2</sub>VO<sub>4</sub> bulk single crystals are conventionally prepared by the Czochralski technique under special experimental conditions because of its tendency to lose oxygen during the crystal growth, preceded by several syntheses of the reagents. The laser-heated pedestal growth (LHPG) technique is an alternative method for preparing single crystal fibers under more flexible experimental conditions and in short time. Because of the characteristics of both compounds, it is interesting to make a study of single crystal fiber growth experiments using the LHPG method. In this report, first results about SrVO<sub>3</sub> and Sr<sub>2</sub>VO<sub>4</sub> single crystal fiber growth experiments using the LHPG method and following a non-conventional ceramic processing route are presented and discussed.

## DESENVOLVIMENTO, CARACTERIZAÇÃO E PROPRIEDADES DE MATERIAIS (Ressonância e Relaxação)

### DESENVOLVIMENTO, CARACTERIZAÇÃO E PROPRIEDADES DE MATERIAIS (Ressonância e Relaxação) – 11/06/97

#### EFEITO DA FREQUÊNCIA DE MODULAÇÃO NA INTENSIDADE, LARGURA E FORMA DA LINHA DA RESSONÂNCIA DE SPIN DOS PORTADORES DE CARGA DOS $\text{AlCl}_3: \text{Fe}^{3+}$ - GICs.

M. A. PIRES, E. N. DE OLIVEIRA  
*Instituto de Física - Universidade Federal de Goiás.*

A Ressonância de Spin dos Portadores de Carga (RSPC) dos Compostos de Grafite Intercalado (GICs) tem sido objeto de estudo para vários pesquisadores, uma vez que a partir de sua interpretação é possível extrair, entre outras propriedades, o valor absoluto da resistividade ao longo do eixo-c destes materiais. Assim este método permite a obtenção da resistividade com a amostra encapsulada, o que nestas condições é de grande vantagem em relação a outros métodos tradicionais de contato. Tem sido verificado que, dentro dos limites apropriados, é possível aplicar a teoria de Dyson unidimensional onde a geometria e tamanho das amostras são decisivos para explicar a forma da linha. Entretanto alguns aspectos experimentais, relacionados à real detecção da ressonância, devem ser levados em consideração. Em contraste com um meio isotrópico, em GICs a forma da linha e intensidade da ressonância observadas são em geral anisotrópicas, e esta anisotropia depende fortemente da anisotropia da condutividade, tamanho da amostra, frequência do campo de modulação e configuração eletromagnética. Levando em conta todos estes efeitos, neste trabalho foram realizados experimentos em várias amostras de  $\text{AlCl}_3: \text{Fe}^{3+}$  - GICs, de forma a descobrir em detalhes os parâmetros relevantes que em geral determina a intensidade, largura e forma da linha de ressonância destes materiais anisotrópicos. Mostraremos amostras grossas de  $\text{AlCl}_3: \text{Fe}^{3+}$  - GICs, apresentam anisotropia com relação a altas frequência de modulação para forma de linha, intensidade e largura da linha. As linhas se mostram isotrópicas para baixas frequências do campo de modulação do campo magnético externo. Assim cuidados experimentais com relação a frequência de modulação devem ser observados para a correta obtenção das informações relacionada a RSPC.

#### ESTUDO POR RESSONÂNCIA MAGNÉTICA DE FLUORAPATITA DOPADA COM MANGANÊS

RONALDO SERGIO DE BIASI, JOÃO COZAC NETO  
*Instituto Militar de Engenharia*

Os componentes inorgânicos de dentes e ossos apresentam uma estrutura semelhante à do mineral apatita, mas contêm numerosas impurezas que podem afetar consideravelmente suas propriedades físico-químicas. O manganês, em particular, é encontrado nos dentes e vários estudos revelaram que existe uma correlação positiva entre o teor de manganês e as cáries dentárias. O mecanismo através do qual o manganês favorece a formação de cáries dentárias ainda não é bem compreendido. Um primeiro passo para entender esse mecanismo é verificar de que forma os íons de manganês são incorporados à rede cristalina das apatitas. No presente trabalho, o método da ressonância magnética eletrônica (RME) foi usado para investigar amostras de fluorapatita,  $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6\text{F}_2$ , dopadas com manganês. As amostras foram fabricadas usando como matérias-primas carbonato de cálcio,  $\text{CaCO}_3$ , fosfato ácido de amônia,  $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$ , fluoreto de cálcio,  $\text{CaF}_2$ , e dióxido de manganês,  $\text{MnO}_2$ . Medidas de difração de raios X revelaram a presença de uma única fase cristalina em todas as amostras. As medidas de RME foram realizadas na Banda X (9,5 GHz). Foi observado um centro altamente simétrico com  $S = 1/2$ ,  $I = 5/2$ ,  $g = 2,0016$  e  $A = 9,00$  mT. O tempo de relaxação spin-spin,  $T_2$ , deste centro é 15 ns. O tempo de relaxação spin-rede,  $T_1$ , à temperatura ambiente foi medido para várias concentrações de manganês entre 0,20 e 1,00 cátion%. Os resultados podem ser descritos pela equação  $T_1 = cf^{-0,55}$ , onde  $c$  é uma constante e  $f$  é a concentração de manganês. É proposto um modelo para a estrutura do centro.

#### IMAGEM DO CAMPO MAGNÉTICO DE UM DIPOLO COM TÉCNICAS DE RMN

D. TOMASI, H. PANEPUCCI, E. L. VIDOTO, E. RIBEIRO AZEVEDO

*Universidade de São Paulo, Instituto de Física de São Carlos*

Este trabalho mostra que é possível obter uma imagem de Ressonância Magnética Nuclear da componente  $z$  do campo magnético produzido por um dipolo magnético. As medidas do módulo da magnetização transversal foram feitas utilizando um tomógrafo de baixo campo magnético (500 Gauss), uma sequência de gradiente echo (GRE) e um "phantom" de sulfato de cobre a 0.5 mM com uma pequena peça de aço inoxidável

tipo 304 (0.08% C, 18.5% Cr, 8.5% Ni) em seu interior. As franjas observadas na imagem correspondem às linhas de igual componente  $z$  do campo magnético produzido pelo dipolo, pois a seqüência GRE não refocaliza a evolução dos spins produzida pela distorção do campo magnético. As imagens foram interpretadas calculando a magnetização resultante dentro de cada voxel, onde a defasagem dos "spins" é proporcional ao tempo ao eco, e a susceptibilidade magnética do material utilizado. A espessura da fatia ( $\sim 3$ cm) utilizada é responsável pelo aparecimento das franjas brilhantes e escuras da imagem na região próxima ao dipolo. Para fatias finas ( $\sim 1$ cm) não se observam estes efeitos. O tamanho do artefato introduzido na imagem é proporcional ao tempo ao eco e a susceptibilidade magnética do material utilizado.

### RMN DE COMPOSTOS INTERCALADOS PROTÔNICOS DE ESTRUTURA PEROVSKITA

CAIO EDUARDO C. TAMBELLI, LUIZ TELMO S. AULER, ARIIVALDO O. FLERENTINO, CLAUDIO JOSÉ MAGON, JOSÉ PEDRO DONOSO

*Instituto de Física de São Carlos - USP - São Carlos*

MARGARIDA SAIKI

*Departamento de Química - UNESP - Bauru*

O eletrólito protônico cerâmico  $\text{H:Pb}_2\text{Nb}_3\text{O}_{10}$  é um composto laminar com estrutura perovskita [1]. Estes materiais laminares tem sido propostos para utilização em sensores e baterias eletroquímicas. Eles são preparados pelo método sol-gel intercalando-se o hidrogênio por meio de troca iônica. Foi observado que estes materiais apresentam condutividade iônica, devida provavelmente a difusão de espécies protônicas, e que esta condutividade pode ser aumentada, em quase uma ordem de grandeza, hidratando o sistema. O objetivo de nosso estudo é caracterizar as propriedades de transporte através da evolução da forma de linha de RMN do  $^1\text{H}$  e das medidas de relaxação nuclear, em função da temperatura. As medidas foram realizadas numa amostra calcinada à 923K. Observamos um processo de estreitamento de linha de ressonância do  $^1\text{H}$  entre 130K e 330K, provocado pelo movimento de difusão protônica o qual induz um cancelamento progressivo das interações do próton com o seu meio (*Motional Narrowing*). As medidas do tempo de relaxação spin-rede ( $T_1$ ), mostram a presença de um mínimo assimétrico à 250K, o qual é característico de um processo de difusão. Supondo um processo termicamente ativado descrito pela lei de Arrhenius, obtemos, a partir dos dados de relaxação acima de  $T_{1\text{min}}$ , uma energia de ativação da ordem de 0.18eV, com  $\tau_0 \sim 10^{-12}$  segundos. Esta energia é consistente com as encontradas em outros condutores protônicos [1]. Estes resultados serão comparados com os obtidos em amostras hidratadas afim de observar a possível mudança na mo-

bilidade das espécies protônicas. [1] - Colomban, Ph. *Protons Conductors*. Cambridge Univ. Press, 1992. (FAPESP,CNPq,FINEP)

### RELAXAÇÃO SPIN-REDE DE PRÓTONS NO REFERENCIAL GIRANTE NA REGIÃO DA TRANSIÇÃO VÍTREA.

LUIZ G. MENDES, M. ENGELSBERG, INÊS C. L. DE SOUZA, RICARDO E. DE SOUZA

*Departamento de Física, Univ. Federal de Pernambuco, Recife, PE.*

Foram realizadas medições precisas do decaimento da magnetização dos prótons no referencial girante em função da amplitude do campo magnético de RF e da temperatura na região da anomalia calorimétrica do glicerol ( $T_g = 185$  K) utilizando amostras de glicerol penta-deuterado (glicerol-d5) e glicerol normal (d0). Os resultados obtidos corroboram e generalizam outros obtidos recentemente [1] e permitem uma melhor compreensão da natureza do movimento na região da transição vítrea. Concluímos que, no referencial girante, a relaxação dos prótons, caracterizada pelo tempo  $T_{1r}$ , é sensível à transição de um regime, que poderia ser denominado de ergódico, para um regime não-ergódico. Isto já tinha sido observado na relaxação do deutério no referencial do laboratório [2] mas aparentemente não foi detectado na relaxação dos prótons no referencial do laboratório, provavelmente devido a que o efeito é mascarado pela difusão de spin. A possibilidade de utilizar a ressonância do  $^1\text{H}$ , com sua inerente sensibilidade e ausência de efeitos quadrupolares, em amostras de glicerol deuteradas em sítios selecionados, permite uma visão mais completa da dinâmica molecular em sistemas vítreos.

Existe grande interesse em entender a natureza do movimento num sistema vítreo na vizinhança de  $T_g$ , e o glicerol, apesar de sua relativa complexidade, é um dos sistemas mais estudados experimentalmente. Os resultados sugerem fortemente que acima de  $T_g$ , os tempos de correlação correspondentes a graus de liberdade translacionais são suficientemente curtos, comparados com  $T_{1r}$ , como para que cada spin sinta toda a distribuição espacial de tempos de correlação antes de relaxar. Nestas condições o comportamento é ergódico. Por outro lado, abaixo de  $T_g$ , o movimento se torna espacialmente localizado. Cada spin relaxa pela ação das flutuações dos campos locais de spins na vizinhança e o comportamento se torna não-ergódico. Além de informações sobre a dinâmica molecular os resultados também são sensíveis a geometria da rede vítrea através da dependência espacial da interação dipolar que prevalece no caso dos prótons ( $I = 1/2$ ).

1. Inês C.L de Souza, Luiz G. Mendes, M. Engelsberg and R.E de Souza, *Chem.Phys.Lett.* (no prelo).

2. F. Fujara, W. Petry, R.M. Diehl, W. Shnauss, and H. Silesco, *Europhys.Lett.* **14**, 568 (1991).

12.

**ESTUDO POR RPE E ENDOR DAS PROPRIEDADES ROTACIONAIS DO RADICAL  $\text{CO}_2^-$  EM CARBO-APATITAS DO TIPO A.**

DELSON U. SCHRAMM, ALEXANDRE M. ROSSI  
CBPF/CNPq

Estudos sobre propriedades rotacionais de radicais  $\text{CO}_2^-$  em carbonatos de cálcio e hidroxiapatitas ( $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$  carbonatadas do tipo B ( $\text{CO}_3^{2-}$  no sítio dos grupos fosfatos)[1] indicam que o movimento dos grupos  $\text{CO}_2^-$  pode ser descrito por um modelo de um radical girando em um meio viscoso (modelo de Ayant)[2]. Neste trabalho sintetizou-se carbohidroxiapatitas do tipo A ( $\text{CO}_3^{2-}$  no sítio dos grupos  $\text{OH}_-$ ) e irradiou-se as amostras com raios gama. O espectro de RPE foi interpretado como sendo constituído por linhas devido a uma espécie com simetria axial ( $g_{\text{perp}}=2.0028$  e  $g_{\parallel}=1.9972$ ) e largura de linha igual a 4.5 MHz. A espécie foi atribuída a radicais  $\text{CO}_2^-$  localizados no sítio da hidroxila. Medidas de ENDOR indicam que as interações superhiperfinas dos radicais  $\text{CO}_2^-$  com núcleos de  $^{31}\text{P}$  e  $^1\text{H}$  localizados na rede cristalina são de 0.17 e 0.19 MHz, respectivamente, não contribuindo significativamente na largura de linha de RPE da espécie. Espectros obtidos em frequência de microondas de 35 GHz mostram um alargamento das linhas da espécie indicando a existência de uma distribuição de fatores g (g-strain). Medidas nesta mesma frequência de microondas em temperaturas entre 300 e 50 K mostram a transformação gradual da espécie em uma espécie ortorrômbica ( $g_x=2.0019$ ,  $g_y=1.9972$ ,  $g_z=2.0039$ ), bem como a variação da largura de linha com a temperatura. Este resultado sugere que o radical é provido de rotação em torno do eixo c da apatita, com o eixo de rotação (direção O - O) paralelo a c. As informações obtidas através das medidas de RPE e ENDOR foram utilizadas para simular espectros de RPE da espécie, no intervalo entre 50 e 300K. Destas simulações foi construída a curva de variação da largura de linha (Lw) com a temperatura. Os pontos experimentais da curva Lw vs. T foram simulados com os modelos de Ayant e de Hughes e Soos [3] que é usado para radicais em meio cristalino. O ajuste dos dados experimentais indicam que o modelo rotacional de Hughes e Soos é mais adequado para descrever o comportamento rotacional da molécula na carboapatita do tipo A. [1] Delson U. Schramm e Alexandre M. Rossi (1997), A ser publicado no Jpn. J. Appl. Phys. [2] Y. Ayant, R. Besson e A. Salvi (1975), J. Phys. **36**, 571. [3] R. C. Hughes e Z. G. Soos (1970), J. Chem. Phys. **52**, No.

**APLICAÇÃO DA ESPECTROSCOPIA MÖSSBAUER E RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA A ESTUDOS DE PROVENIÊNCIA DE OBSIDIANAS**

S. PETRICK C, A. BUSTAMANTE D, R. B. SCORZELLI, A. M. ROSSI

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas  
G. POUPEAU

Institut Dolomieu, Université Joseph Fourier, Grenoble, França

A obsidiana, um vidro natural de origem vulcânica, foi um dos materiais mais utilizados na confecção de artefatos e utensílios por povos primitivos que viveram próximo ou em território de solo vulcânico, em diversos continentes. O homem primitivo buscando formas de comércio entre grupos culturais diferentes, trocava estes objetos ou buscava materiais naturais em regiões muitas vezes distantes de seu lugar de origem. Este trabalho tem por objetivo aplicar as técnicas de Espectroscopia Mössbauer e Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE) ao estudo de proveniência de obsidiana encontradas em sítios arqueológicos, com ênfase nas civilizações andinas pré-hispânicas. Com este objetivo estão sendo analisadas amostras geológicas e arqueológicas do Chile, Colômbia e Equador que são comparadas com amostras provenientes de uma mesma fonte geológica na Turquia. Através das medidas de Espectroscopia Mössbauer do  $^{57}\text{Fe}$ , realizadas em amostras diferentes, é possível estabelecer correlações entre os parâmetros hiperfinos que permitem o agrupamento das amostras segundo as fontes de origem. Outros critérios que estão sendo utilizados são a relação  $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ , a posição estrutural e coordenação do ferro. Outra informação importante que está sendo obtida através de EM é a detecção de inclusões minerais portadoras de Fe e partículas pequenas de óxidos de ferro (magnetita e hematita), que em alguns casos podem mascarar o espectro do ferro contido na matriz vítrea. Medidas de RPE nas amostras de vidro foram realizadas em frequências de microondas de 9.5 GHz e 35 GHz em temperaturas entre 4K e 300K. Os espectros apresentam linhas características do  $\text{Fe}^{3+}$  como impureza substitucional na estrutura do vidro ( $g = 4,29$ ) e linhas largas ( $g \simeq 2$  e largura  $> 2000\text{G}$ ) características de fases magnéticas deste ion. Correlações entre os resultados de RPE e espectroscopia Mössbauer são realizadas no sentido de caracterizar os diferentes ambientes do ferro nas estruturas do vidro.

### Estudo de compostos intercalados através de RMN do $^7\text{Li}$

F. B. GUEDES, N. C. MELLO, T. J. BONAGAMBA, H. PANEPUCCI, O. A. CANEVAROLLO, J. G. SILVA, J. P. DONOSO

*Instituto de Física de São Carlos - USP*

G. GONZALEZ, M. SANTA ANA, E. BENAVENTE  
*Facultad de Ciencias - Universidad de Chile*

No  $\text{Li}_x\text{MoS}_2$  os íons  $\text{Li}^+$  estão posicionados em sítios localizados entre as camadas planas do dissulfeto de molibidênio. A difusão do  $\text{Li}^+$  ocorre através de saltos entre estes sítios e depende do seu envolvimento com o espaço interlamilar. Intercalando o poli-óxido-etileno (POE) complexado com lítio mudamos este espaço obtendo  $\text{Li}_x\text{MoS}_2(\text{POE})_y$  que apresenta, em alguns casos, maior difusão para o íon  $\text{Li}^+$ . Anteriormente, estudamos a mobilidade do  $\text{Li}^+$  comparando a forma de linha e o tempo de relaxação spin-rede para os núcleos  $^7\text{Li}$  e  $^1\text{H}$ . Analisamos as amostras  $\text{Li}_x\text{MoS}_2$  ( $x = 0,22$  e  $0,66$ ) e  $\text{Li}_{0,1}(\text{POE})\text{MoS}_2$ , dentro de um intervalo de temperatura de 150 K a 400 K, em um campo de 2T. Para completar este trabalho, utilizando a mesma metodologia, realizamos medidas complementares com amostras  $\text{Li}_x\text{MoS}_2$  ( $x = 0,18, 0,20, 0,40, 0,70, 0,90$  e  $0,96$ ), em um intervalo de temperatura de 150 K a 670 K. Para um maior aquecimento da amostra construímos uma nova sonda de RMN com temperatura variável. A partir destes novos resultados, observamos que a mobilidade do íon  $\text{Li}^+$  depende fortemente de sua concentração no composto e da presença do POE.

### CARACTERIZAÇÃO POR RMN NO ESTADO SÓLIDO DE BIOMASSAS TERMICAMENTE TRATADAS

JAIR CARLOS CHECON DE FREITAS

*Departamento de Matéria Condensada e Espectroscopia - CBPF / Departamento de Física - UFES*

TITO JOSÉ BONAGAMBA

*Instituto de Física de São Carlos - USP*

FRANCISCO GUILHERME EMMERICH

*Departamento de Física - UFES*

A espectroscopia por Ressonância Magnética Nuclear vem sendo amplamente utilizada na caracterização de materiais sólidos com alto teor de carbono, tais como polímeros, componentes de substâncias vegetais, carvões e fulerenos. O uso de técnicas de alta resolução como rotação em torno do ângulo mágico (MAS), desacoplamento de alta potência (DEC) e polarização cruzada (CP) permite o estudo de diversas propriedades desses materiais, através da análise dos espectros de RMN de núcleos como  $^{13}\text{C}$ ,  $^{29}\text{Si}$  e  $^1\text{H}$ . Neste trabalho investigamos o efeito de tratamentos térmicos em amostras de endocarpo de babaçu (*orbignya martiana*) utilizando RMN de  $^{13}\text{C}$ . Foram caracterizadas amostras com temperatura de tratamento térmico (TTT)

entre 300 e 2000°C, preparadas em vácuo sob taxa de aquecimento uniforme e com tempo de residência pré-determinado. Os espectros de RMN de  $^{13}\text{C}$  com CP, DEC e MAS foram obtidos a 21,4MHz, após 18000 aquisições, com tempo de repetição de 1,5s, tempo de contato igual a 1ms e frequência de rotação de 3,0kHz. A amostra de endocarpo de babaçu natural mostrou linhas bem definidas entre 20 e 180 ppm(TMS), associadas aos polímeros constituintes do material: celulose, hemicelulose e lignina. Para TTT's abaixo de 400°C verificou-se um progressivo desaparecimento dessas linhas, restando principalmente sinais provenientes da lignina, que é o componente mais estável termicamente. Entre 450 e 800°C notou-se o aparecimento de apenas uma linha larga em torno de 125 ppm(TMS), num deslocamento químico típico de átomos de carbono com coordenação  $\text{sp}^2$ . Em TTT's mais altas (acima de 1200°C) as amostras não apresentaram qualquer sinal de RMN detectável nas condições usadas, provavelmente devido ao baixo teor de hidrogênio que dificultou a realização de polarização cruzada. Os resultados obtidos permitem uma investigação detalhada do processo de carbonização da biomassa estudada, verificando-se como se dá a transformação dos polímeros constituintes do material inicial em uma estrutura granular com microcristalites grafiticos.

### EFEITO DA TEMPERATURA NA TRANSFORMAÇÃO DE RADICAIS LIVRES NO XISTO IRATI; UM ESTUDO POR EPR.

JOÃO JOSÉ FERNANDES DE SOUSA, NEY VERNON VUGMAN

*Instituto de Física da UFRJ*

CLAUDIO COSTA NETO

*Instituto de Química da UFRJ*

Radicais livres com fator- $g$  entre 2,0020 e 2,0040 são facilmente observados no querogênio pela Ressonância Paramagnética Eletrônica. Concentrações expressivas, da ordem de  $10^{18}$  radicais livres por grama de carbono orgânico, associadas a uma linha estreita, em torno de 4 Gauss, resultam em sinais intensos. Os radicais livres são produzidos durante a maturação da matéria orgânica fóssil pela ação da temperatura e resultam do rompimento de ligações químicas. A Formação Irati, datada do Permiano (240 milhões de anos), é a maior reserva de xisto oleígeno conhecida atualmente no Brasil. Seus afloramentos fazem um grande S entre os Estados de São Paulo e do Rio Grande do Sul, ultrapassando a fronteira com o Uruguai. O xisto oleígeno encontrado nestes afloramentos possui elevado teor de carbono (de 3 a 24%) mas, apesar de sua antiguidade, é imaturo para a geração de petróleo, devido à pequena profundidade de soterramento. Neste trabalho analisou-se uma coluna estratigráfica, extraída em Canoinhas-PR, que foi cortada por magma intrusivo no período Cretáceo (há 120 milhões de anos). A coluna, designada CER1-2, repre-

senta um excelente experimento *in-situ*, já que registrou os efeitos de um gradiente de temperatura num pequeno intervalo de profundidade. Medidas da concentração de radicais livres indicam que a razão entre a extensão da ação térmica sobre a matéria orgânica sedimentar e a espessura da intrusiva vale 1,14. A função estratigráfica da concentração de radicais livres apresenta simetria em relação à intrusão vulcânica, sugerindo que os gradientes de temperatura, para cima e para baixo foram simétricos. Os resultados de experiências de pirólise isotérmica do xisto indicam que diversas espécies paramagnéticas com fator-*g* muito próximas entre si encontram-se não resolvidas na linha única do espectro do xisto, tornando-a um *envelope*. A cinética de produção dos radicais livres é descrita em termos de reações paralelas de 1ª ordem e, a partir do ajuste dos dados experimentais determina-se a energia de ativação das duas principais espécies de radicais livres: 54 e 36 kcal mol<sup>-1</sup>. (CNPq, FINEP, FUJB, CEPG-UFRJ)

#### EFFECTOS DE TAMAÑO FINITO SOBRE LA TRANSICION INCOMMENSURADA DEL BIS(4-CLOROFENIL)SULFONE ESTUDIADOS POR <sup>35</sup>Cl RCN

J. SCHNEIDER, C. SCHURRER, A. H. BRUNETTI  
Fa.M.A.F. - Universidad Nacional de Cordoba - Argentina

La fase cristalina del Bis(4-Chlorophenyl)sulphone (BCPS) experimenta una transición a una fase incommensurada a TI=150K. La incommensuración involucra una modulación de los parámetros geométricos internos de la molécula (ángulos diedro y de bending entre anillos bencénicos). En este trabajo, se estudian los efectos de tamaño finito de los dominios cristalinos sobre la modulación IC, por medio de la Resonancia Cuadrupolar Nuclear (RCN) del <sup>35</sup>Cl. Se prepararon películas de BCPS (espesor medio: 70 Å) crecidas sobre sustratos de TiO<sub>2</sub>, realizándose un estudio comparativo de estas muestras con respecto a cristales tipo "bulk". El espectro de RCN y el tiempo de relajación spin-red T<sub>1</sub> fueron medidos en función de la temperatura en el rango 80K-370K. Pudo observarse un aumento de 6K en la temperatura de transición IC para las películas de BCPS. Este aumento puede ser explicado en términos de los efectos del sustrato sobre el empaquetamiento cristalino y la competencia entre las interacciones intra e intermoleculares. La dependencia térmica de los parámetros de la RCN de los films, en la fase cristalina de alta temperatura, muestran cambios en la dinámica molecular respecto del "bulk". Los espectros de RCN en la fase IC muestran cambios cualitativos de importancia en las características de la modulación IC. La presencia de un pico adicional sobre el espectro IC sugiere la existencia de regiones de la película en donde las moléculas de BCPS no están distorsionadas. Tales regiones se ubicarían cerca de la interfase BCPS-sustrato.

#### RPE DE AlCl<sub>3</sub>:Mn<sup>2+</sup> GICs, PREPARADOS SOB DIFERENTES PRESSÕES DE Cl<sub>2</sub>.

M. A. PIRES, W. M. M. ALMEIDA  
Universidade Federal de Goiás  
C. RETTORI, G. E. BARBERIS  
UNICAMP

Embora vários trabalhos tenham sido publicados com relação aos Compostos de Grafite Intercalados (GICs) com AlCl<sub>3</sub>, o que diz respeito à estrutura da camada intercalante é ainda objeto de estudo em literatura. O AlCl<sub>3</sub> cristaliza-se com estrutura do tipo camadas, com duas camadas de cloro entre sucessivas camadas de Al. Os íons de Al estão localizados em sítios aproximadamente octaédricos e a rede cristalina é formada por 4 átomos de Al<sup>3+</sup> por célula unitária. Nos cristais dopados com Mn<sup>2+</sup>, este íon ocupa o lugar do Al<sup>3+</sup> no centro do octaedro distorcido formado pelos átomos de cloro. A questão porém, é saber se isto é verdadeiro também para a camada intercalante dos compostos de grafite intercalado com AlCl<sub>3</sub>. Amostras de Grafite Piroclítico Altamente Orientado (HOPG) foram intercaladas com AlCl<sub>3</sub>:Mn<sup>2+</sup>, usando a técnica de duas zonas de vapor, com duas diferentes pressões de Cl<sub>2</sub>. Experimentos de Ressonância Paramagnética Eletrônica nos cristais de AlCl<sub>3</sub>: Mn<sup>2+</sup> e seus compostos de grafite intercalados foram analisados comparativamente. Os espectros de ressonância refletem as características do sítio do íon de Mn<sup>2+</sup> podendo desta forma fornecer informações a respeito da camada intercalante. Foi observado, através da variação angular do campo de ressonância que o íon Mn<sup>2+</sup> ocupa um sítio de simetria axial no cristal de AlCl<sub>3</sub>: Mn<sup>2+</sup> e que esta simetria é preservada sob intercalação nos AlCl<sub>3</sub>: Mn<sup>2+</sup> - GICs. Experimentos em função da temperatura indicam que dependendo da condição de preparação da amostra (pressão de Cl<sub>2</sub> aplicada) é possível observar transição de fase na linha dos elétrons de condução. Esta transição é atribuída a uma transição de fase tipo ordem-desordem observada nas moléculas intercalantes. Isto sugere que além do AlCl<sub>3</sub> intercalado sob forma laminar, possivelmente outras espécies moleculares são inseridas entre as camadas de carbono durante o processo de intercalação.

#### RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA EM VIDROS NIOBOFOSFATOS DE LÍTIO COM IMPUREZA DE FERRO

M. A. PIRES  
Universidade Federal de Goiás  
A. S. B. SOMBRA, E. B. DE ARAÚJO, J. A. C. DE PAIVA, M. A. B. DE ARAÚJO  
Depto de Física - UFC

Vidro contendo Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> tem despertado o interesse de um grande número de pesquisadores em virtude de suas potenciais aplicações tecnológicas em dispositivos

fotônicos e matrizes de fibras ópticas com alto valor para a susceptibilidade não linear. Mais recentemente o uso de vidros contendo microcristais ferroelétricos tem sido proposto em literatura, como um novo tipo de vidros óptico não linear. O Niobato de Lítio,  $LiNbO_3$ , é um material ferroelétrico com alta temperatura de Curie, largamente utilizado como dispositivo óptico não linear. Por outro lado, ao contrário de vidros silicatos e fosfatos, os vidros niobatos tem sido pouco estudados. O número de coordenação do Nb e a sua interação com outros elementos da rede vítrea é ainda objeto e de estudo em literatura. Neste trabalho descreveremos experimentos de Ressonância Paramagnética Eletrônica realizados em vidros niobo-fosfatos em base de lítio,  $[xNb_2O_5(0.5x - x)P_2O_5]0.5LiO : yFe_2O_3(0.5mol\%), y = 0,02(mol\%)$ . Os resultados indicam dois sítios distintos de simetria caracterizados pelos valores de  $g \approx 2$  (apropriado para  $Fe^{3+}$  ocupando sítios octaédricos) e  $g_{eff} \approx 4,25$  (indicando átomos de  $Fe^{3+}$  ocupando sítios grande componente de distorção rombic) comumente observado para sistemas vítreos com impureza de ferro. Foi observado ainda que com o crescimento da relação  $Nb_2O_5/P_2O_5$  na composição das amostras, a intensidade da linha correspondente a  $g_{eff} \approx 4,25$  diminui, sugerindo que a ocupação do  $Fe^{3+}$  nos sítios de simetria rombic decresce. Os sítios de simetria ocupados pelo  $Fe^{3+}$  em compostos de Niobio é bastante discutido em literatura e é bem aceito que o íon  $Fe^{3+}$  substitue o íon  $Nb^{5+}$  no octaedro  $NbO_6$ . Assim estes resultados sugerem que o aumento da concentração de  $NbO_5$  nas amostras leva o  $Nb^{5+}$  a ocupar preferencialmente posições de simetria octaédrica na rede.

### RELAXAÇÃO MAGNÉTICA EM VIDROS FLUOROINDETOS - FORMA DE LINHA

PEDRO LUIZ FRARE JÚNIOR, LUIZ TELMO S. AULER, CLAUDIO JOSÉ MAGON, JOSÉ PEDRO DONOSO

*Instituto de Física de São Carlos - USP*

Y. MESSADEQQ

*Instituto de Química - UNESP - Araraquara*

Os vidros de fluoretos vem sendo estudados há mais de quinze anos devido a seu uso potencial em componentes ópticos (filtros, conversores e fibras ópticas). Estes vidros constituem também eficientes condutores iônicos rápidos de  $F^+$ . Neste trabalho apresentamos um estudo da forma de linha de RMN do núcleo  $^{19}F$ , no vidro  $40In_2F_3 - 20ZnF_2 - 20SrF_2 - 2Ga_2O_3 - 2NaF - 16BaF_2$  ( $T_g=550K$ ) na fase vítrea [1]. A baixas temperaturas (130K) esta forma de linha pode ser representada por uma Gaussiana, com uma largura de linha de aproximadamente 40KHz (10G). O segundo momento correspondente a esta linha é de  $18G^2$ . Supondo que a unidade estrutural básica destes vidros são poliedros constituídos de grupos  $InF_6$  [2] e, supondo

que a maior parte deste segundo momento é resultante da interação dipolar homonuclear F-F [3], utilizamos a fórmula de Van Vleck, na aproximação de um sistema policristalino, para estimar a distância média entre os núcleos de flúor. Considerando apenas a contribuição dos flúors primeiros vizinhos encontra-se 2.1 Å para distância média F-F. Este valor é comparável ao encontrado em outros vidros de fluoretos, como por exemplo ZBL-AL, onde as larguras de linha medidas do  $^{19}F$  são consistentes com uma distância média F-F da ordem 2.2 Å, supondo a unidade estrutural básica destes sistemas o poliedro  $Zr_2F_{12}$ , determinada por scattering de raios X, Exafs e simulações computacionais [4].

[1] *J. Mat. Res.* 8, 885 (1993); [2] *Glass Chem. & Physics* 21, 53 (1995); [3] *J. Chem. Phys.* 58, 5446 (1973); [4] *Solid St. Comm.* 89, 983 (1994), *J. Non. Cryst. Solids* 94, 315 (1987).

### ESTUDO DE RPE E RMN NA CRISTALIZAÇÃO DE VIDROS FLUOROINDATOS

ROBERTO WEIDER DE ASSIS FRANCO, CLÁUDIO JOSÉ MAGON, CÁSSIO CAMPOS TAMBELLI, JOSÉ PEDRO DONOSO

*Instituto de Física - USP - São Carlos*

YOUNÉS MESSADEQQ

*Instituto de Química - UNESP - Araraquara*

Foram estudados os efeitos de tratamentos térmicos no vidro fluoroindato  $40InF_2-20ZnF_2-20BaF_2-20SrF_2$ , visando acompanhar o processo de nucleação e cristalização deste sistema através de Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE), em banda X, e Ressonância Magnética Nuclear (RMN), a 36 MHz. As amostras foram aquecidas em temperaturas entre a transição vítrea ( $T_g=300^\circ C$ ) e a cristalização ( $T_c=397^\circ C$ ), durante 20 minutos. Os espectros de RPE de todos os vidros foram obtidos a 7K, sendo observados uma linha em  $g \approx 4.3$  e outra em  $g \approx 2$ , características de íons de ferro, que surgem como impurezas naturais dos produtos da preparação. Apenas no espectro da amostra aquecida pouco acima da temperatura de cristalização ( $400^\circ C$ ) é detectada uma larga linha gaussiana ( $\Delta H=127G$ ) em  $g=1,98$ , que característica do ferro em sítio com simetria cúbica, na fase cristalina da amostra. Os resultados de RMN em temperatura ambiente mostram que o tempo de relaxação spin-rede ( $T_1$ ) do  $^{19}F$  sofre um pequeno decréscimo (de 186 para 171 ms) da amostra não aquecida para a amostra tratada a  $350^\circ C$ . Os vidros aquecidos a  $360^\circ C$  apresentam dois valores de  $T_1$  (17,4 e 172 ms), aumentando significadamente (para 133 e 296 ms, respectivamente) nas amostras tratadas a  $400^\circ C$ . O pequeno valor de  $T_1$  observado a  $360^\circ C$  ocorre simultaneamente com o aumento da nucleação verificado neste sistema. O tratamento térmico nesta temperatura, durante 20 minutos, provoca um drástico aumento da(s) fase(s) cristalina(s) na amostra. Do ponto

de vista tecnológico, estes resultados são importantes, pois indicam que não é recomendável proceder o puxamento do vidro para fibras ópticas a 360°C, já que a existência de diferentes fases poderia provocar espalhamentos indesejáveis de luz.

### PREPARAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DO COMPÓSITO P(OE)<sub>8</sub>:LiClO<sub>4</sub>/CARBON BLACK

ROBERTO WEIDER DE ASSIS FRANCO, CRISTIANE BARBIERI RODELLA, CLÁUDIO JOSÉ MAGON, JOSÉ PEDRO DONOSO, ARIIVALDO DE OLIVEIRA

FLORENTINO  
USP - São Carlos

MARGARIDA JURI SAEKI  
UNESP - Bauru

JEAN MICHEL PERNAUT, ARMANDO LOPES DE OLIVEIRA  
UFMG

Condutores iônicos formados do complexo: Polióxido de etileno (POE) e perclorato de lítio (LiClO<sub>4</sub>) quando misturados com carbono (*carbon black*) formam compósitos, cujas propriedades elétricas e eletroquímicas favorecem sua utilização na fabricação de capacitores eletroquímicos. O princípio ativo deste material é baseado na capacitância elétrica da interface complexo-carbono. Tais compósitos foram obtidos por dois métodos de preparação, visando maximizar a dispersão do carbono, garantindo uma maior interface complexo-carbono. No primeiro método os componentes são prensados e submetidos a tratamento térmico, sem utilização de solvente. No segundo método o complexo, com 20% de carbono, é dissolvido em acetonitrila, posteriormente evaporada com aquecimento, ultrassom ou agitação magnética. O estudo foi realizado utilizando as espectroscopias de RPE, RMN e Impedância. Nos espectros de RPE das amostras preparadas pelos dois métodos é observada uma linha *lorentziana*, correspondente aos elétrons localizados, superposta a uma linha *dysoniana* (A/B=1.2), relativa aos elétrons delocalizados. A variação destas linhas com a temperatura (7-300 K) possibilita estimar a contribuição relativa dos paramagnetismos de Pauli e de Curie neste sistema. A intensidade do espectro e a relação entre as componentes de Pauli e Curie depende do método de preparação dos compósitos. A influência das partículas de carbono nos movimentos da cadeia polimérica é estudada pelos espectros de RMN do <sup>1</sup>H. Medidas da relaxação spin-spin (T<sub>2</sub>) entre 220 e 350 K, mostrou que a mistura do carbono praticamente não altera o valor da energia de ativação dos movimentos do POE (E<sub>A</sub> ≈ 0,6 eV). Os espectros de Impedância foram obtidos a temperatura ambiente na faixa de frequência entre 10μ e 1MHz. Observou-se uma redução de 90% no valor da impedância para as amostras preparadas (com solvente) com ultrassom em relação a agitação

magnética. Entretanto, os compósitos prensados apresentaram uma impedância ainda menor. Para as amostras preparadas pelos dois métodos a redução de uma ordem de grandeza na impedância ocorre simultaneamente com o aumento da contribuição dos paramagnetismos de Pauli e Curie, obtidos por RPE.

### ESTUDO DO NH<sub>4</sub>Br : Cu<sup>2+</sup> (CRESCIDO EM SOLUÇÃO BÁSICA) COM USO DE RPE

SANDRA MARA DOMICIANO, EDUARDO DI MAURO  
Universidade Estadual de Londrina

ALEXANDRE MALTA ROSSI  
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Cristais de brometo de amônia dopados com Cu<sup>2+</sup> e crescidos em solução básica (pH~8) foram estudados no intervalo de temperaturas maiores do que 5K e menores do que 300K com RPE na banda Q. Como anteriormente (1) já havíamos determinado que o NH<sub>4</sub>Br : Cu<sup>2+</sup> crescido em solução básica incorpora o centro paramagnético NH<sub>3</sub> - Cu<sup>2+</sup> - NH<sub>3</sub>, e que este centro é muito sensível as modificações que possam ocorrer na rede cristalina do brometo de amônia, pudemos constatar que: (a) as medidas de RPE realizadas acima de 235K, bem como as abaixo de 78K, mostraram claramente que o centro paramagnético NH<sub>3</sub> - Cu<sup>2+</sup> - NH<sub>3</sub> apresenta nestas regiões simetria tetragonal; (b) já as medidas de RPE realizadas no intervalo de temperaturas maiores do que 78K e menores do que 235K apresentaram simultaneamente duas simetrias (*tetragonal e rômica*). Como o NH<sub>4</sub>Br apresenta nesta região apenas simetria rômica, parece-nos muito provável que a simetria tetragonal encontrada nesta região se deve ao campo cristalino associado com os estados vibracionais excitados dos íons Br<sup>-</sup>. Estes movimentos vibracionais são rápidos o bastante para dar um campo efetivo tetragonal no íon Cu<sup>2+</sup>. Desde que o espectro rômico é resultado do estado fundamental dos bromos e o espectro tetragonal depende só de seus estados excitados, ambos coexistiriam nesta região. (1) E. Di Mauro e W. Sano, J. Phys.:Condens. Matter 6 (1994) L1-L4.

### ESTUDIO POR RESONANCIA CUADRUPOLEAR NUCLEAR DE <sup>35</sup>CL DEL BIS(4-CLOROFENIL)SULFOXIDE

T. OSAN, J. SCHNEIDER, C. SCHURRER, A. WOLFENSON, A. BRUNETTI

Fa.M.A.F. - Universidad Nacional de Cordoba - Argentina

En el contexto del estudio de fases incommensuradas cristales moleculares tipo bifenilo, se utilizo la tecnica de la Resonancia Cuadripolar Nuclear de <sup>35</sup>Cl (RCN) para caracterizar el compuesto bis(4-cloro fenil)sulfoxide (BCSX;(C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>Cl)<sub>2</sub>SO). Dicho compuesto constituye un sustituyente muy proximo a la variedad sulfona (SO<sub>2</sub>), la cual presenta una fase en donde los

angulos inter fenilos estan modulados de manera incommensurada con la red cristalina. Esta fase se origina a partir de la competencia de interacciones inter e intramoleculares de ordenes semejante. En el BCSX, el menor grado de oxidacion del atomo de azufre ligante entre los grupos fenilos constituye una perturbacion interna que afecta al balance de dichas interacciones. Se realizaron mediciones de los espectros de RCN y de los tiempos de relajacion spin-red  $T_1$  en funcion de la temperatura. Los resultados obtenidos sugieren que el BCSX presenta dos fases cristalinas que coexisten entre 80K y

300K, una de las cuales es estadisticamente mas probable para temperaturas mas altas. El diagrama de fases observado es interpretado en terminos fenomenologicos mediante la teoria de Landau. Por otra parte, no existe evidencia de incommensuracion estructural en todo el rango de temperaturas estudiado. En cambio, la posible existencia de desorden estructural parcial, afectando la conformacion o la orientacion molecular, es discutida.

---

## DESENVOLVIMENTO, CARACTERIZAÇÃO E PROPRIEDADES DE MATERIAIS (Instrumentação)

### DESENVOLVIMENTO, CARACTERIZAÇÃO E PROPRIEDADES DE MATERIAIS (Instrumentação/Materiais Amorfos)

– 12/06/97

#### RESULTADOS DO COMISSIONAMENTO DA LINHA DE ESPECTROSCOPIA DE ABSORÇÃO DE RAIOS-X (XANES, EXAFS) DO LNLS.

MARIA DO CARMO MARTINS ALVES, EDILSON TAMURA, MILTON ROCHA, VIVALDO MELLO JÚNIOR, VALÉRIE COMPAGNON-CAILLOL, JÚLIO CRIGINSKI CEZAR, HÉLIO TOLENTINO

*Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS*

A linha de luz dedicada à espectroscopia de absorção de raios-X (XANES & EXAFS) está em operação no LNLS e faz parte das sete linhas de luz que serão entregues aos usuários em julho de 1997. Esta estação experimental foi caracterizada utilizando um monocromador do tipo channel-cut e duas câmaras de ionização. Um detector de elétrons trabalhando em 1 atm de He também foi utilizado na caracterização da linha, bem como nos primeiros experimentos em ligas metálicas amorfas. A linha de luz apresentou um bom desempenho na faixa de energia de 4-10 keV. Serão apresentados os resultados do comissionamento da linha em termos da distribuição espectral, calibração e resolução em energia. O bom desempenho desta linha de luz é demonstrado através de exemplos de espectros de várias amostras padrão e das primeiras experiências em novos materiais. Esta técnica fornece informação sobre as propriedades estruturais e eletrônicas em uma grande variedade de materiais cristalinos e amorfos. Esta linha permite também realizar estudos de difração circular de raios-X possibilitando a investigação das propriedades magnéticas de metais e de terras raras bem como de outros compostos magnéticos cujas bordas de absorção sejam cobertas nesta estação. Uma grande comunidade de pesquisadores de instituições brasileiras e estrangeiras está interessada em utilizar esta linha de luz. Está prevista a realização de experiências nos seguintes materiais: filmes finos, ligas metálicas, vidros de semicondutores, catalisadores, materiais eletrocromáticos, cerâmicas e sistemas eletroquímicos. Esta linha de luz está sendo financiada com recursos do estado de São Paulo (FAPESP) e tem sido fortemente apoiada pelo LNLS.

#### CARACTERIZAÇÃO E PRIMEIROS RESULTADOS DA LINHA DE ESPALHAMENTO DE RAIOS-X A BAIXOS ÂNGULOS (SAXS) DO LNLS

G. KELLERMAN, C. BARBERATO

*Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS*

H. FISCHER

*Universidade Federal de Santa Catarina - UFSC*

M. A. SINGH

*Dept. of Physics, Queen's University, Kingston, ON, CANADA*

IRIS L. TORRIANI

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

A. F. CRAIEVICH

*Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS*

A montagem da linha de SAXS do LNLS foi concluída em 1996. Os testes de caracterização iniciaram-se em janeiro de 1997 e em fevereiro os primeiros espectros de espalhamento a baixo ângulo foram obtidos. A óptica da linha SAXS está constituída por um espelho para

focalização vertical e um cristal curvado elasticamente para monocromatização e focalização horizontal. Três conjuntos de fendas e tubos evacuados só utilizados para definir o feixe incidente e reduzir o espalhamento parasita assim como absorção pelo ar. Quase a totalidade do caminho do feixe consiste em tubos evacuados. A configuração standard da linha utiliza um cristal de silício (111) com ângulo de assimetria igual a  $11^\circ$  a qual permite obter comprimentos de onda entre 1,50 e 2,00 Å. A detecção da intensidade espalhada é feita com um detector sensível à posição unidimensional. Um detector bidimensional será instalado em breve. Com um comprimento de onda  $\lambda = 1,609$  Å, um detector unidimensional de 10cm de comprimento útil, distância amostra-detector de 1,75m e beam-stopper de 5mm, os limites da faixa de  $q$  (módulo do vetor de espalhamento) acessíveis só  $0,07 < q < 0,40$  Å<sup>-1</sup>. A dimensão da seção normal do feixe direto no plano de focalização (plano de detecção) é inferior a 1x1 mm<sup>2</sup>. No plano da amostra a seção é de aproximadamente 1mm vertical por 6mm horizontal e a resolução em ener-

gia é de  $3 \times 10^{-3}$  para a configuração standard. Foram realizados os cálculos de todos os parâmetros relevantes da linha de luz para todas as outras configurações possíveis. Com a estação de SAXS já caracterizada foram feitos estudos experimentais de espalhamento por amostras padrão de carbono vítreo, colágeno, mylar e outros polímeros. As intensidades dos espectros coletados com a energia nominal do anel de elétrons (1,37 GeV) e correntes de até 50 mA são altamente satisfatórias. Os resultados destes primeiros estudos serão apresentados e discutidos. A disponibilidade da linha de SAXS para uso da comunidade científica está prevista para julho de 1997.

Patrocinadores: FAPESP, CNPq.

#### Magnetic measurements over the internet

M. P. DE ALBUQUERQUE, L. C. SAMPAIO, A.

GESUALDI, M. VIANNA, A. TAKEUCHI

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF/CNPq.*

M. P. DE ALBUQUERQUE, E. LELIEVRE-BERNA

*Institute Laue Langevin (Grenoble/France)*

The recent evolution of network technologies has motivated us to associate a magnetization measurement system with the Internet (World Wide Web) possibilities. Our main purpose is to integrate the instrumentation of the experiment with remote monitoring and control through common web browsers. The capability of web browsers to be a standard interface with the users and remote servers is a main point associated to the internet. Software is the key to virtual instruments. We can define an instrumentation protocol, platform independent, working over the network tcp/ip protocol, in the application layer. Nevertheless, technologies behind these facilities are still too complex and changing very quickly. The Java programming language allow us to transfer data between a measurement-server and web-clients and create a virtual experiment. Among the advantages taken from this project, we can list the following: to increase and to improve experimental collaboration programs; to follow the experiment independently of our geographical location and of the presence of firewalls and the possibility to solve specific tasks, of the experimental system, with intelligent agents. Alongside the data acquisition over classical instrumentation we can also use a camera to take images of the experiment and use the main backbone of the internet to transfer them to the client or even to make teleconferences. At the ILL we have developed a Java Client-Server which presents the status of the polarized hot neutron normal-beam diffractometer on the intranet<sup>1</sup>. This package is a "real-time" WWW server which can be used for many applications. In particular, it is easily adapted on other CBPF and ILL instruments. A more generalized system is available to the magnetic-optical measurements in the magnetism laboratory of CBPF.

<sup>1</sup> - This instrument (D3) is extensively automated and used to measure the fourier components of magnetization densities - (<http://www.ill.fr>).

#### INVESTIGAÇÃO DE UM VIDRO DISSILICATO DE LÍTIO PELA ESPECTROSCOPIA DE FOTOELÉTRONS EXCITADOS POR RAIOS-X

PAULO C. SOARES JÚNIOR, EDGAR D. ZANOTTO,  
PEDRO A. P. NASCENTE

*Universidade Federal de São Carlos, Departamento de  
Engenharia de Materiais*

SANDRA G. C. DE CASTRO

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

As vitrocerâmicas são sólidos policristalinos preparados pela cristalização controlada de vidros. Uma compreensão dos mecanismos de nucleação e crescimento de cristais e de sua evolução microestrutural é muito importante. Um dos principais sistemas formadores de vitrocerâmicas é o lítio-silício-oxigênio. Os vidros deste sistema apresentam nucleação homogênea no volume e, portanto, servem como modelo para a compreensão de sistemas mais complexos. Alguns autores sugerem que o aparecimento de uma fase metaestável poderia explicar a discrepância entre as previsões da teoria clássica de nucleação e os resultados obtidos experimentalmente. Recentemente, Adams e de Jong [1], empregando a espectroscopia de fotoelétrons excitados por raios-X (XPS), analisaram um vidro dissilicato de lítio tratado a 450 °C durante diferentes períodos. A linha fotoelétrica Li 1s apresentou dois componentes ( $\approx 51,5$  e  $55,5$  eV), cujas intensidades variaram com tratamentos diferentes. Adams e de Jong [1] interpretaram estes resultados como uma mudança estrutural local com o tempo de nucleação. Esta mudança foi atribuída ao aparecimento de outra fase metaestável, supostamente o metassilicato de lítio, que desapareceu após tratamentos térmicos mais longos. Como esses resultados são controversos, o objetivo deste trabalho foi verificar a possível precipitação da fase metassilicato de lítio, usando a mesma técnica espectroscópica e tratamentos térmicos similares. Medimos, com alta resolução em energia, as linhas Si 2p, Li 1s e O 1s. Os nossos resultados mostraram que não houve variação nas energias de ligação dos dois componentes da linha Li 1s em função dos tempos de tratamento térmico, contrariamente ao observado por Adams e de Jong [1], indicando que não há formação de fases metaestáveis. Outrossim, identificamos a formação de carbonato de lítio na superfície, devido à sua exposição à atmosfera. [1] J.W. Adams and B.H.W.S. de Jong; *Mat. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. 321, 239-244 (1994).*

### Estudo por Difração de Raios-X e EXAFS dos Compostos Vitro-cerâmicos $\text{CaSiO}_3$ e $\text{CaMgSi}_2\text{O}_6$

VALMOR R. MASTELARO, EDGAR D. ZANOTTO  
*DEMa - UFSCar - São Carlos S.P.*

SILVIA L. CUFFINI, YVONNE P. MASCARENHAS  
*IFSC - USP - São Carlos S.P.*

NICOLAS LEQUEUX, ROBERT CORTES

*Laboratoire des Ceramiques et Materiaux Mineraux - Paris - França*

O objetivo deste trabalho é estudar as possíveis relações entre a estrutura local (primeiros vizinhos) ao redor de cátions modificadores (Ca, Pb, Ba, etc) e o mecanismo de nucleação em vidros silicatos. Foi proposto que, em vidros que apresentam nucleação homogênea, a estrutura local ao redor do cátion modificador é semelhante à existente em sua fase cristalina isoquímica, enquanto que, em vidros que somente nucleiam heterogeneamente, a estrutura é diferente da sua fase cristalina isoquímica. Neste trabalho apresentamos resultados sobre a estrutura local dos átomos de cálcio em dois diferentes sistemas minerais (amostra vítrea e totalmente cristalizada) que apresentam nucleação superficial: Wollastonita ( $\text{CaSiO}_3$ ) e Diopsideo ( $\text{CaMgSi}_2\text{O}_6$ ). As fases cristalinas, obtidas em altas e baixas temperaturas, foram inicialmente caracterizadas através da técnica de difração de Raios-X (DRX). Os resultados obtidos por DRX mostraram que para o Diopsideo não existe mudança de fase, apenas uma variação de intensidade em alguns picos foi observada. No caso da Wollastonita, observou-se diferentes fases: em altas temperaturas obteve-se a fase conhecida como Cyclowollastonita enquanto que em baixas temperaturas obteve-se a fase conhecida como Parawollastonita. As experiências de EXAFS realizadas na borda do átomo de cálcio mostraram que na Wollastonita a ordem local é bem diferente entre as duas fases cristalinas (natural e sintética); na fase vítrea, a ordem local é próxima a da fase cristalina mineral. No Diopsideo, a ordem local na fase cristalina obtida em alta temperatura é bem próxima a da fase cristalina mineral natural. Com relação à fase vítrea, apenas a primeira camada (ligações Ca-O) foi observada e tudo indica que existe uma diferença no número de coordenação entre a fase vítrea e suas fases cristalinas isoquímicas.

### NEW GLASSES BASED ON $\text{Ga}_2\text{S}_3$ - $\text{La}_2\text{S}_3$ FOR OPTICAL APPLICATION

J. A. MEDEIROS NETO, N. ARANHA

*Instituto de Física Gleb Wataghin-DEQ-UNICAMP*

The optical properties of praseodymium-doped glasses have attracted considerable attention recently for their potential application as a an efficient optical fiber amplifier operating in the region of second telecommunication window at 1.3 microns. Amongst the most promising contenders,  $\text{Pr}^{3+}$ -doped Gallium-Lanthanum

Sulfide (Ga:La:S) glass has been shown to provide lower phonon-energy and higher quantum efficiency as compared to their fluoride glasses counterpart. Recently, the spectral properties of chalcogenide glass prepared in the molar composition  $70\text{Ga}_2\text{S}_3$ - $30\text{La}_2\text{S}_3$  doped with  $\text{Er}^{3+}$  has been presented and prospect for new applications has been emerged. However, to date, there has been no report to successful production of this glass in optical fiber form. This is because the temperature range over which the glass viscosity is suitable for fiber drawing overlaps with the onset of crystallization. Thermal analyses shown that for the Ga:La:S glass system the minimum viscosity before the onset of crystallization is about  $10^{6.9}$  poise. Therefore any attempted to draw fibers from this glasses will result on further devitrification due to its high viscosity. However, there has been no realistic prospect for rare-earth doped chalcogenide Ga:La:S fiber fabrication. In this work we report a modified Ga:La:S glass which allowed improved extraordinary the thermal stability of these glasses without any modification on phonon energy when compared with the pure Ga:La:S glass and for the purpose of fiber fabrication these are by far the most stable glasses ever reported and therefore, the possibility to draw fiber from this system without any devitrification is easily achieved.

### EFEITO DA CONCENTRAÇÃO DE ÍONS DE $\text{Nd}^{3+}$ NA EMISSÃO 1.05 MICRONS EM VIDROS FLUORETOS DOPADOS COM $\text{Cr}^{3+}$

LILIA CORONATO COURROL, LAÉRCIO GOMES,  
NILSON DIAS VIEIRA JÚNIOR

*Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - CNEN-SP*

MICHAEL POULAIN

*Université de Rennes*

Os vidros fluoretos dopados com Cromo e Neodímio, são bons candidatos a meios laser ativos, na região de 1.05 microns, bombeados por lâmpada flash. Uma vez que os íons de  $\text{Nd}^{3+}$  apresentam um espectro estreito de absorção e pouca superposição com o bombeio largo das lâmpadas flash, a co-dopagem com íons de  $\text{Cr}^{3+}$  resulta em uma maior absorção da luz de excitação, uma vez que os íons de Cr, apresentam larga banda de absorção. A energia absorvida pelos íons de  $\text{Cr}^{3+}$ , é então efetivamente transferida para os íons de  $\text{Nd}^{3+}$ . Este trabalho pretende notificar a concentração ideal de íons de  $\text{Nd}^{3+}$  para obter maior emissão laser, em vidros fluoretos dopados com  $\text{Cr}^{3+}$ . Para isto, simulamos o bombeamento por lâmpada flash, em um sistema de emissão convencional e obtemos o número de fótons correspondente para este canal luminescente. A caracterização da transferência de energia entre íons de  $\text{Cr}^{3+}$  e  $\text{Nd}^{3+}$  também é analisada utilizando-se o método de Förster-Dexter que consiste na determinação do raio crítico de

interação a partir dos espectros de absorção do íon de cromo e o espectro de emissão do íon de neodímio. A partir do raio crítico de interação é possível se obter a probabilidade de transferência de energia. O sistema co-dopado é comparado com o sistema simplesmente dopado. Apoio: FAPESP

## DESENVOLVIMENTO, CARACTERIZAÇÃO E PROPRIEDADES DE MATERIAIS (Teoria) – 13/06/97

### TEORIA ESTATÍSTICA DAS VACÂNCIAS TÉRMICAS NA MODIFICAÇÃO DE ALTAS TEMPERATURAS DO FULERITO $C_{60}$

VIATCHESLAV IVANOVICH ZUBOV, JOSÉ NICODEMOS TEIXEIRA RABELO

*Universidade Federal de Goiás*

JESUS FELIX SANCHEZ ORTIZ

*Universidad Cayetano Heredia, Lima, Peru*

Estudamos vacâncias térmicas na modificação de altas temperaturas do fullerito  $C_{60}$  (que ocorre a  $T > 261.4K$  com rede fcc) e sua influência nas propriedades de equilíbrio termodinâmico considerando a forte anarmonicidade das vibrações da rede. Tratando o cristal com vacâncias como um sistema quase-binário, usando o método correlativo do campo não-simetrizado autoconsistente [1] e o potencial de interação de Girifalco [2] para o subsistema molecular obtemos a energia livre de Gibbs de formação de vacância. Esta se expressa em termos da energia livre de Helmholtz do cristal perfeito hipotético e o volume de sua célula elementar. Com esta função calculamos as características das vacâncias como entalpia, entropia e volume de formação, concentração de equilíbrio de vacâncias e as contribuições dos defeitos para as propriedades termodinâmicas do cristal. Investigamos a dependência destas funções com relação a temperatura a pressão normal. A energia livre de Gibbs, a entalpia e a entropia de formação de vacância decrescem com o aumento da temperatura. A baixas temperaturas, como na fase de ordenação orientacional, a concentração de vacância e seu efeito nas propriedades termodinâmicas do fullerito são desprezíveis mas crescem abruptamente com a temperatura. Na vizinhança do ponto de fusão, estimado em  $1400 - 1500K$  [1], e especialmente na região metastável as vacâncias contribuem notavelmente para a compressibilidade e o coeficiente de expansão térmica. Entretanto seu efeito nos calores específicos,  $80 - 90\%$  determinados pelos graus de liberdade intramoleculares, permanece pequeno. Concluímos que as vibrações da rede são a principal causa

da perda de estabilidade da modificação fcc do fullerito  $C_{60}$ , mas as vacâncias atenuam o espectro fonônico reduzindo sua temperatura. 1. V.I. Zubov, N.P. Tretiakov, J.F. Sanchez and A.A. Caparica, Phys. Rev. B53, 12080(1996). 2. L.F. Girifalco, J. Phys. Chem. 96, 858(1992).

### ESTUDO TEÓRICO DA PRESSÃO DE VAPOR SATURADO E ENTALPIA DE SUBLIMAÇÃO DOS FULERITOS $C_{60}$ E $C_{70}$

VIACHESLAV IVANOVICH ZUBOV, NIKOLAI PAVLOVICH TRETIAKOV, IGOR VIACHESLAVOVICH ZUBOV, JOSÉ NICODEMOS TEIXEIRA RABELO, JUAN MARQUES BARRIO

*Universidade Federal de Goiás*

JESUS FELIX SANCHEZ ORTIZ

*Universidad Cayetano Heredia, Lima, Peru*

Estudamos a pressão de vapor saturado e a entalpia de sublimação dos fulleritos mais difundidos,  $C_{60}$  e  $C_{70}$ . A baixas temperaturas, suas moléculas têm ordenação orientacional, enquanto a altas,  $T > 261.4K$  no  $C_{60}$  e  $T > 340K$  no  $C_{70}$ , giram quase livremente formando os chamados cristais plásticos com rede fcc. A pressão de vapor saturado das fases com ordenação orientacional é desprezível. Portanto consideramos apenas a modificação de alta temperatura de cada fullerito. Empregamos uma expansão virial para as fases gasosas e o método correlativo do campo não-simetrizado autoconsistente para os cristais [1]. Usamos o potencial intermolecular de Girifalco [2] para o  $C_{60}$  e o potencial de Verheijen et. al. [3] para o  $C_{70}$ . Os cálculos foram realizados em todo o intervalo desde o ponto de equilíbrio com as modificações com ordenação orientacional até a temperatura spinodal  $T_S$  dos sistemas bifásicos cristal-vapor. Para o  $C_{60}$  estimamos  $T_S \approx 1917K$ . Para o  $C_{70}$  os resultados são  $1,5 - 2,5\%$  diferentes. A dependência  $\log_{10} P_{sat}(T)$  é quase linear. A entalpia de sublimação do  $C_{60}$  decresce com o crescimento de  $T$  de  $172.9$  até  $140.5kJ/mol$  enquanto que os valores para  $C_{70}$  são cerca de  $5\%$  maiores. Nossos resultados para ambos os fulleritos concordam bem com os dados experimentais existentes entre  $600$  e  $990K$ . Usando um scaling estimamos os parâmetros do ponto triplo para o  $C_{60}$ :  $T_{tr} \approx 1460K$ ,  $P_{tr} \approx 740Torr$  e para o  $C_{70}$ :  $T_{tr} \approx 1500K$ ,  $P_{tr} \approx 655Torr$ .

1. V.I. Zubov, N.P. Tretiakov, J.F. Sanchez and A.A. Caparica, Phys. Rev. B53, 12080(1996)
2. L.F. Girifalco, J. Phys. Chem. 96, 858(1992).
3. M.A. Verheijen, H. Meekes, P. Bennema, et. al., Chem. Phys. 166, 287(1992).

## ORDEM DE MÉDIO ALCANCE EM VIDROS: PROPRIEDADES DINÂMICAS NA REGIÃO DE BAIXAS ENERGIAS.

SÉRGIO SOUTO

USP - FZEA - Departamento de Ciências Básicas

As estruturas vítreas são caracterizadas pela ausência de ordem de longa distância. Entretanto, estes sólidos não são sistemas inteiramente aleatórios. Existem evidências de ordem de curto e médio alcance. Na região de baixas energias, o comportamento das vibrações da estrutura amorfa é ainda mal compreendida e parece estar associada as estruturas de ordem de médio alcance (MRO), caracterizada por uma extensão  $R_c$ . Utilizamos a espectroscopia Raman na região de baixas energias afim de evidenciar as mudanças estruturais ocorridas devido a presença e a natureza do sal "dopante" nos vidros lítio-boratos ternários. Calculamos as densidades de estados de vibrações (DOSV) assumindo uma constante de acoplamento linear, que confirmamos ser verdadeira para o caso do vidro  $B_2O_3$ . As DOSV na região de baixas frequências dos vidros ternários apresentam um excesso de estados em relação aos vidros binários de mesma proporção em boro e oxigênio. Este excesso aumenta com a concentração do sal e o raio iônico do ânion. Este comportamento pode ser interpretado como um aumento na MRO. Propomos um modelo estrutural onde a adição do sal induz a dilatação da rede devido a acomodação do ânion e a redistribuição dos boros em coordenação quatro ( $B^{IV}$ ) devido à interação eletrostática com os ânions. Estes mecanismos induzem à formação de regiões de predominância em  $BO_3$  (entorno dos ânions) e regiões ordenadas, formadas por  $B^{IV}$ . Os valores de  $R_c$  sugerem que, nos vidros ternários, a MRO se limita a um grupamento *diborato*, porém nos vidros "dopados" com LiBr a ordem se estende à dois ciclos *diboratos* ou mesmo três no caso do LiI. A formação de agrupamentos de  $B^{IV}$  pode ser uma explicação para o aumento da condutividade iônica dos vidros ternários pela diminuição da energia de ativação. No caso do  $Li_2SO_4$ , parece haver uma interação do radical  $SO_4^{2-}$  com a matriz vítrea.

## INTERNAL STRUCTURE OF UNIT CELL AND LOCAL FIELD EFFECTS IN RAMAN SPECTROSCOPY OF ANISOTROPIC ORGANIC CRYSTALS

ALEXANDER GHINER, ANTONIO JEFERSON DE DEUS MORENO

UFMA

Usually the Raman scattering experimental data are relate directly to a spectrum of the vibrational modes of an elementary cell. However, the electromagnetic fields into the cell differ from the external macroscopic field of the incident radiation due to the interaction between the neighbouring cells. Therefore, nonlinear susceptibi-

lities and Raman scattering of a crystal will be different from those of the elementary cell. In distinction from the radiative phenomena the distribution of the dipole moment inside the elementary cell is essential for local field effects. We applied results of generalized method of integral equations approach to calculate the local field factors for linear and nonlinear Raman susceptibilities of the anisotropic crystals. The models with one, two and more point dipoles into unit cell were considered. Owing to smallness of the nonlinear polarization it occurs that the resonant frequencies shifts of the vibrational modes due to the local field effects in the first approximation may be neglected. However, intensity of the scattering and, what is even more important, the tensor properties of the Raman nonlinear susceptibilities change qualitatively in comparison with the case of an isolated elementary cell. The essential distinction between the results of one- and two- components models was found. The theoretical results are used for interpretation of the experimental data concerning the polarization dependencies of the Raman scattering in the organic nonlinear crystals alanin and monohidrated l-asparagin.

## POLARIZATION IN THE SELF-CONSISTENT EM-SCATTERING FROM A SET OF DIPOLE-PLANES

WLODZIMIERZ KELLER, DIONICARLOS SOARES DE VASCONCELOS

UFBA

The unpolarized EM-radiation incident on a crystal, represented by a set of dipole-planes, is usually considered as two plane polarized constituents  $\sigma$  and  $\pi$  which are scattered independently of one another. However, using a previously developed self-consistent modeling system for the packet of dipole-crystal planes we show that problem of interdependence of the two  $\sigma$  and  $\pi$ - constituents assumes much more complex facets. Starting from the two basic requirements of the above model: a) continuity of all the polarization vectors between any neighboring crystal planes and b) the geometrical similarity of all the fields produced by crystal planes, it is easily proved that these two above radiation constituents are truly independent only for one of the scattering dipole-planes and so if it is treated separately. Interlacing of these constituents may be well understood if we take into account that  $\sigma$ - constituent of the radiation is much more strongly reflected than  $\pi$ -constituent and, in consequence, the geometrical fields similarity requirement (b), which assumes that the reflection-transmission rates should the same for all dipole planes, cannot be satisfied. Details of more general approach to the above problem, in both X-ray and optical radiation regions, are being actually investigated in terms amplitude and phase- changes of the two  $\sigma$ - and  $\pi$ -constituents of EM interacting radiation.

## SEMICONDUCTORES (Crescimento e Caracterização: III-V, II-VI, SiGe)

Palestra Convidada – 11/06/97

### FROM ANDERSON LOCALIZATION TO QUANTUM CHAOS

BORIS ALTSHULER

*Princeton University and NEC Research Institute*

This talk will be devoted to the multiple connections between two problems. One is the Anderson localization of wave functions of a particle in a disordered potential and the other is the structure of spectra of Quantum Chaotic systems - systems with chaotic classical analog. From this point of view we will discuss properties of isolated metallic grains - quantum dots taking into account interactions between electrons.

## SEMICONDUCTORES (Crescimento e Caracterização) – 12/06/97

### CRESCIMENTO DE InGaP EM SUBSTRATOS PRE-GRAVADOS DE GaAs

MARIA P. P. DE CASTRO, N. C. FRATESCHI, J. BETTINI, M. M. G. DE CARVALHO

*UNICAMP*

A utilização de InGaP casado com GaAs para a substituição das ligas de AlGaAs nas camadas confinantes dos modos guiados de lasers semicondutores é de grande relevância. Com isso é possível uma redução na velocidade de recombinação na interface, a utilização de recrescimento e finalmente uma menor degradação do dispositivo. Na obtenção de confinamento de corrente numa área mínima de injeção nos lasers, algum esquema de epitaxia seletiva pode ser essencial. Em particular, com o crescimento de lasers em substratos pré-gravados pode-se tentar obter o controle do perfil de crescimento utilizando-se das propriedades de crescimento por epitaxia de feixes químicos (CBE) em diferentes planos cristalinos e a diferentes temperaturas. Dadas as dimensões das camadas confinantes, estas serão essencialmente responsáveis pelo perfil de injeção do dispositivo, daí a importância de estudarmos o crescimento de InGaP em substratos não planares. Neste trabalho apresentaremos resultados do crescimento por CBE de camadas de InGaP com parâmetro de rede casado com GaAs em estruturas pré-gravadas. Uma análise das taxas de crescimento em diversos planos em função da temperatura de crescimento será apresentada onde fica claro não ser a diferença um resultado apenas da diferença de fluxo molecular. Portanto propomos um estudo das propriedades de migração entre principal-

mente planos (111) e (100) em função da temperatura de crescimento. Como a migração superficial depende dos comprimentos de difusão, apresentaremos estimativas dos mesmos a partir do crescimento em estruturas de diferentes dimensões. Por fim, uma análise da possível mudança de composição causada pelas diferentes taxas de migração de In e Ga deverá ser discutida, dada a importância de manter-se as camadas crescidas em todos os planos com mínima tensão que seria causada pela diferença de parâmetro de rede.

### Espelho de Bragg de AlGaAsSb/AlAsSb Dopado com Telúrio com Alta Refletividade e Baixa Resistência

IVAN FREDERICO LUPIANO DIAS

*Universidade Estadual de Londrina*

BERNARD NABET, JEAN-CHRISTOPHE HARMAND

*CNET - Centre Nationale d'études de*

*Telecommunications/FRANCE TELECOM*

ANDREAS KOHL

*ALCATEL/France*

Espelhos de Bragg têm atraído muita atenção devido às propriedades que tornam esta estrutura interessante para a aplicação em dispositivos da optoeletrônica como Lasers de Emissão Superficial - VCSEL (Vertical-Cavity Surface-Emitting Lasers). Estruturas baseadas no sistema AlAs/GaAs tem sido empregadas com sucesso na fabricação de lasers verticais em intervalos de curtos comprimentos de onda (0.8  $\mu\text{m}$  a 1.0  $\mu\text{m}$ ). Para longos comprimentos de onda (1.3  $\mu\text{m}$  a 1.6  $\mu\text{m}$ ) diferentes sistemas de materiais semicondutores com casamento de parâmetro de rede ao InP tem sido experimentados. Contudo existem vários problemas para todos os sistemas testados. O sistema InGaAsP/InP e o sistema Al-

GaInAs/AlInAs apresentam um pequeno contraste de índice de refração ( $\Delta n \sim 0.3$ ) entre os diferentes materiais. O sistema AlGaAsSb/AlAsSb apresenta um grande contraste de índice de refração, mas ainda é um sistema relativamente desconhecido e apresenta problemas para preparação de amostras livres de deslocamentos. Assim, para faixas de grandes comprimentos de onda, ainda não está bem estabelecido qual é o sistema de material a ser utilizado na fabricação dos dispositivos VCSEL. Apresentamos aqui uma estrutura tipo espelho de Bragg formada por ligas de AlGaAsSb e AlAsSb dopadas com Telúrio (Te) com casamento de rede com substrato de InP. Uma refletividade de 99.8% com largura de "stop" banda de 190 nm centrada em  $1.51 \mu\text{m}$  foram obtidos. Observa-se um decréscimo de voltagem médio (voltage drop) por período de 44 mV a uma densidade de corrente de  $1 \text{ kA/cm}^2$ . A estrutura apresenta uma concentração de portadores média de  $3.510^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Os resultados obtidos demonstram que sistemas a base de ligas de antimônio poderão ser aproveitados para o desenvolvimento de lasers de emissão pela superfície na região de comprimento de onda de  $1.55 \mu\text{m}$ .

#### DETERMINAÇÃO DA ENERGIA DO GAP ÓTICO DO SILÍCIO POROSO POR ESPECTROSCOPIA FOTOCÚSTICA

A. V. BATISTA DA SILVA, I. PEPE

INSTITUTO DE FÍSICA UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA

A. FERREIRA DA SILVA\*, K. F. BERGGREN

LINKÖPING UNIVERSITY DEPARTMENT OF

PHYSICS AND MEASUREMENT TECHNOLOGY \*  
INSTITUTO NACIONAL DE PESQUISAS ESPACIAIS (INPE)

E. VEJE

OERSTED LABORATORY NIELS BOHR INSTITUTE

O Silício Poroso (PS) vem sendo amplamente estudado nos últimos anos, principalmente devido ao fato de apresentar uma forte fotoluminescência (PL) na porção visível do espectro ótico, a temperatura ambiente, em contraste com o silício cristalino. Tal característica, o torna um candidato preferencial para aplicações em detectores e dispositivos do estado sólido. Neste trabalho, o PS produzido por "etching" eletroquímico em ácido hidrofúrico [1,2], foi estudado através da espectroscopia fotoacústica (PAS), no intervalo de comprimento de onda 380-940 nm, correspondendo à região da absorção fundamental. A montagem experimental está descrita em artigo recente [3]. A partir dos dados experimentais a energia de gap ótico  $1.49 \pm 0.01 \text{ eV}$  foi determinada, por ajuste à equação de Pankove [4]. Este valor pode ser comparado ao encontrado por Andersen e Veje  $1.59 \pm 0.01 \text{ eV}$  para o PS [1], utilizando

fotoluminescência. Além disso, nosso espectro mostra outras diferentes componentes da estrutura de banda desse material, em forte concordância com o espectro de fotocondutividade de Andersen e Veje [2] para filmes de PS e com resultados, desses mesmos autores, para a fotoluminescência. [1] O. K. Andersen and E. Veje, Phys Rev. B 53, 15643 (1996) [2] O. K. Andersen, F.P. Romstad, N. Saksulv and E. Veje, 23rd International Conference on the Physics of Semiconductors (Berlin, 1996) [3] A. Ferreira da Silva, N. Veissid, C. Y. An, I. Pepe, N. Barros de Oliveira and A. V. Batista da Silva, Appl. Phys. Lett. 69, 1930 (1996) [4] J. I. Pankove, Optical Processes in Semiconductors (Dover, New York)

#### ASSIMETRIA E REFLEXÕES HÍBRIDAS NA DIFRAÇÃO MÚLTIPLA COM RADIAÇÃO SÍNCROTRON PARA O SISTEMA InGaP/GaAs(001)

MARCELO ASSAOKA HAYASHI, LUIS HUMBERTO AVANCI, LISANDRO PAVIE CARDOSO, JEFERSON

BETTINI, MAURO MONTEIRO GARCIA DE CARVALHO  
Instituto de Física Gleb Wataghin, UNICAMP, CP6165,  
13083-970, Campinas, SP, Brazil

SÉRGIO LUIZ MORELHÃO

Laboratório Nacional de Luz Síncrotron / LNLS, CP 6192,  
13083-970, Campinas, SP, Brazil

Neste trabalho, a difração múltipla de raios-X com radiação síncrotron é utilizada como técnica de caracterização do sistema InGaP/GaAs. Casos de difração múltipla em que três feixes estão difratando simultaneamente e que envolvem uma reflexão secundária difratando paralelamente aos planos primários, i.e., à superfície da amostra (Bragg-superfície) são importantes, pois fornecem informações sobre perfeição cristalina no plano da superfície da camada e/ou interface, quando existe uma. A interação entre as redes cristalinas da camada e do substrato, gera contribuições extras devido a reflexões híbridas nas varreduras Renninger, que acarretam assimetrias nessas varreduras, evidenciadas pelas características de alta intensidade, baixa divergência e polarização no plano da órbita, próprias da radiação síncrotron. Varreduras Renninger em geometria de alta resolução realizadas durante o comissionamento da estação 16.3, do Laboratório de radiação síncrotron de Daresbury, Warrington, Inglaterra, para a reflexão primária (002) do substrato (GaAs) e da camada (InGaP), mostram claramente o efeito das reflexões híbridas, que causa assimetria claramente observada em três casos de 4-feixes simultâneos ( $\overline{111}$ )( $\overline{113}$ ), (200)(202) e ( $3\overline{11}$ )( $3\overline{13}$ ). Além disto, a utilização da técnica do mapeamento de reflexões Bragg-superfície (MBSD) (Morelhão & Cardoso, J. Appl. Cryst. (1996) 29, 446-456) para o caso das secundárias ( $\overline{111}$ ) e (111)

evidenciam as relações entre a qualidade cristalina do substrato e da camada no plano da superfície de ambos, assim como na direção do crescimento da camada.

### DETERMINAÇÃO ÓPTICA DA ENERGIA DE GAP DIRETO E DA DIFUSIVIDADE TÉRMICA DO IODETO DE CHUMBO

A. FERREIRA, N. VEISSID, C. Y. NA

*Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais-INPE*

A. S. ALVES, E. MASCARENHAS, T. S. SILVA, H.

TSUZUKI, I. PEPE, O. NAKAMURA

*Instituto de Física-Universidade Federal da Bahia*

A potencial aplicação do  $PbI_2$  como detetor de luz visível, radiação gama e raio X faz deste material um excelente domínio de interesse. Além disso, suas propriedades físicas têm atraído a atenção de diferentes pesquisadores. O objetivo do presente trabalho é relatar os resultados obtidos para duas propriedades físicas importantes desse semicondutor: a energia de gap direto e a difusividade térmica. Em ambos os casos, utilizamos a técnica de espectroscopia fotoacústica para investigar tais propriedades. No primeiro caso, para obter o espectro fotoacústico da amostra, fizemos uma varredura em comprimento de onda, e utilizando o método da derivada, determinamos o gap do semicondutor; no segundo caso, obtivemos a fase do sinal fotoacústico em função da frequência de modulação, e através de um software (origin), determinamos a difusividade térmica do material. A amostra de  $PbI_2$  utilizada na pesquisa foi crescida pelo método de Bridgman. A energia de gap foi determinado como estando na seguinte faixa

$$2.301 \pm 0.038 \leq E_g \leq 2.356 \pm 0.037$$

e a difusividade térmica encontrada foi de  $\alpha_s = (0.025 \pm 0.004)cm^2/s$ , estas duas medidas tendo sido feitas à temperatura ambiente. Os valores encontrados para estas grandezas são comparáveis com os valores para outros semicondutores de importância tecnológica corrente.

#### Referências

- [1] A. Ferreira da Silva, N. Veissid, C. Y. An, I. Pepe, N. Barros de Oliveira and A. V. Batista da Silva, Appl. Phys. Lett. 69, 1930 (1996).
- [2] J. I. Pankove, Optical Processes in semiconductors (Dover, New York)

### PROPRIEDADES ELÉTRICAS DE CAMADAS EPITAXIAIS DE $Pb_{1-x}Sn_xTe$ COM $0 \leq x \leq 1$ CRESCIDAS POR MBE

EDUARDO ABRAMOF, SUKARNO OLAVO FERREIRA, PAULO HENRIQUE DE OLIVEIRA RAPPL, HUBERTO CLOSS, IRAJÁ NEWTON BANDEIRA  
*LAS - INPE*

Neste trabalho, as propriedades elétricas de camadas epitaxiais de  $Pb_{1-x}Sn_xTe$  com composição de  $Sn$  cobrindo toda a faixa foram investigadas. As amostras foram crescidas em substratos de  $(111)BaF_2$  em um sistema de epitaxia de feixe molecular - MBE usando fontes sólidas de  $PbTe$ ,  $SnTe$  e  $Te$ . Assim que a composição da liga varia de  $PbTe$  a  $SnTe$ , a concentração de buracos cresce exponencialmente de  $10^{17}$  a  $10^{19}cm^{-3}$  para as fontes ricas em  $Te$  e de  $10^{17}$  a  $10^{20}cm^{-3}$  para as fontes estequiométricas. A resistividade das amostras, que depende basicamente da concentração de buracos, mostra uma dependência exponencial com a temperatura com uma inclinação que decresce assim que  $x$  varia de 0 a 1. Para as amostras de  $Pb_{1-x}Sn_xTe$  com  $x$  na faixa de 0.35 a 0.7, a curva de resistividade apresenta um mínimo muito bem definido em baixas temperaturas. Este comportamento anômalo é suposto ser relacionado ao cruzamento de bandas neste material, onde o coeficiente de temperatura da energia do "gap" muda de sinal. As temperaturas onde o mínimo na resistividade ocorre, somente concordam com aquelas previstas pelo modelo de inversão de bandas para  $x \sim 0.4$ , apresentando um grande desvio para temperaturas menores assim que  $x$  aumenta.

### Caracterização das Propriedades Ópticas e Estruturais dos Filmes Finos de Sulfeto de Antimônio

JOÃO GIL DOS SANTOS, WALTER MAIGON  
PONTUSCHKA

*Universidade de São Paulo gilsantos@if.usp.br ou pontuschka@if.usp.br*

Os filmes finos de semicondutor amorfo sulfeto de antimônio ( $Sb_2S_3$ ), foram obtidos através da técnica de evaporação térmica onde o material foi depositado sobre substratos de vidros. Caracterizamos esses filmes finos através das técnicas de espectroscopia de transmissão óptica no visível, fotoluminescência e micro-Raman. O estudo da absorção óptica na região do visível permitiu determinar o gap óptico  $E_{gap} = 1,52$  eV. Na caracterização por espectroscopia Raman obtivemos informações concernentes às ligações do tipo: Sb-Sb, Sb-S e S-S. Os espectros de micro-Raman dos filmes finos a- $Sb_2S_3$ , apresentaram algumas bandas de absorção, onde a primeira está localizada em  $112\text{ cm}^{-1}$ , sendo uma consequência dos movimentos vibracionais das ligações químicas entre Sb-Sb, pertencente à unidade estrutural  $[(S_2)Sb - Sb(S_2)]$ . Outra banda de absorção está localizada em  $235\text{ cm}^{-1}$  que é decorrente das

vibrações da ligação Sb-S em conjunto com a unidade estrutural  $[Sb-S_3,(S_2)Sb(S_2)]$ . A vibração da ligação química S-S apresentou várias bandas de absorção localizadas em  $\nu_1=433\text{ cm}^{-1}$ ;  $\nu_2 = 493\text{ cm}^{-1}$ ;  $\nu_3 = 565\text{ cm}^{-1}$ ; e  $\nu_4 = 650\text{ cm}^{-1}$ , respectivamente. A presença da ligação S-S ocorre em filmes ricos em enxofre, nos quais a quantidade de enxofre excede 60 %. Quando a concentração de antimônio supera a do valor estequiométrico, as unidades moleculares com ligação do tipo Sb-Sb crescem às expensas das ligações Sb-S. Notamos nos espectros de luminescência obtidos a existência de uma relação de linearidade entre a banda de PL localizada na região de 5800 Å e a espessura dos filmes. Nos espectros de PL vimos que a intensidade da banda de PL é possivelmente uma transição de banda a banda, concluímos que a mesma é favorecida quando se adiciona excesso de antimônio em relação à proporção estequiométrica.

## SEMICONDUCTORES (Sistemas Mesoscópicos) – 12/06/97

### KONDO EFFECT ON TUNNELING CURRENTS IN A MESOSCOPIC RING

MARIA AUGUSTA DAVIDOVICH  
*Departamento de Física – PUC-Rio*

ENRIQUE V. ANDA  
*Instituto de Física – UFF*

J. R. IGLESIAS  
*Instituto de Física – UFRGS*

G. CHIAPPE

*Departamento de Física – Universidad de Buenos Aires*

We study the effect of the Kondo resonance on the current in a mesoscopic ring with a quantum dot inserted in one of its arms and crossed by a magnetic flux. The system is described by an Anderson impurity Hamiltonian with the electron-electron interaction restricted to the dot. We consider two different situations: the ring connected to two external contacts and an isolated ring. The Green function and the current as a function of the gate potential at the dot is calculated through a cumulant diagrammatic expansion in the "linear chain approximation". An exact cluster Green function, numerically calculated using a Lanczos method including the dot and the Green function of the one particle hamiltonian describing the rest of the ring and the contacts, are taken as the undressed propagator and the interaction between these two subsystems is the perturbation. The remarkable result is that even when the system is out of resonance at temperatures

below the Kondo temperature, the Abrikosov-Suhl resonance provides a channel for the electron to tunnel through the dot giving rise to persistent currents, for the isolated ring, and to Bohm-Aharonov oscillations, for the ring electrically connected. The results are discussed in detail as a function of the relevant parameters of the system. The Bohm-Aharonov oscillations are a consequence of the extreme sensitivity of the current to the desphasing produced between the electrons that circulate along the two arms of the ring. Therefore it could constitute a novel mechanism to detect, for the first time, the Kondo effect in a mesoscopic transport experiment.

### CHAOTIC SCATTERING AND QUANTUM TIME DELAY FLUCTUATIONS

CAIO H. LEWENKOPF

*UERJ*

RAUL O. VALLEJOS, ALFREDO M. OZORIO DE

*ALMEIDA*

*CBPF*

Over the past decade many studies were devoted to the understanding of quantum manifestations of classical chaos. This interest can be explained by the fact that this subject is intimately related to many different areas physics, like properties of complex systems, fundamental aspects of the correspondence principle, transport in ballistic mesoscopic systems, etc. Most of the theoretical studies concentrated on spectral properties of closed systems, accumulating a large body of numerical evidences of universality and some analytical understanding of this fact. Surprisingly few studies were devoted to open systems, and the scattering problem still lacks some solid fingerprints which serve to clearly distinguish integrable from chaotic classical scattering. In this work we present a simple scattering model having a classical analogue which may range from integrable to chaotic as its parameters are varied. The model serves to study fluctuation phenomena related to ballistic transport in quantum dots. We relate the fluctuations of the scattering matrix to the nature of the underlying classical dynamics. In particular, we show results concerning the correlations of the Wigner-Smith time delay. We discuss the semiclassical theories which relate quantum fluctuations to properties of different sets of classical trajectories: i) the trapped periodic orbits in the repeller ii) periodic trajectories of the iterated Poincaré scattering map and iii) open trajectories connecting ingoing and outgoing channels. We also test the predictions of random matrix theories, that is, the link between chaotic scattering and the ensembles of S-matrices (the Gaussian Orthogonal- (SGOE) and the Circular Orthogonal Ensemble (COE)).

## TRANSPORTE BALÍSTICO EM SISTEMAS MESOSCÓPICOS: CORREÇÕES À TEORIA DE PARTÍCULA INDEPENDENTE

CAIO H. LEWENKOPF

*Instituto de Física - UERJ*

EDUARDO R. MUCCIOLO

*Departamento de Física - PUC/Rio*

Com o recente avanço tecnológico em nanoestruturas, tornou-se possível o estudo experimental da correspondência entre caos clássico e a dinâmica eletrônica quântica em dispositivos eletrônicos balísticos. O exemplo mais comum desses sistemas são os chamados pontos quânticos, onde elétrons são confinados eletrostaticamente a pequenas regiões em interfaces de materiais semicondutores. A principal manifestação do comportamento caótico dos elétrons nessas estruturas se dá nas propriedades de transporte, mais especificamente nas flutuações da condutância. Apesar de seu grande sucesso em prever comportamento universal de correlatores da condutância (tanto em sistemas balísticos quanto desordenados), a teoria das matrizes aleatórias, por definição, não é apropriada para descrever algumas das características específicas desses sistemas. É desejável, por exemplo, entender-se o comprimento de autocorrelação da condutância em função da geometria de um ponto quântico. Além disso, há evidências recentes de que a teoria de partícula independente é insuficiente para se obter resultados quantitativamente corretos. Esse fato nos motivou a introdução de uma teoria efetiva visando levar em conta efeitos de muitos-corpos. Neste estudo apresentamos tal teoria no contexto do formalismo semiclássico de Gutzwiller (somadas de órbitas periódicas), apropriado para se investigar um sistema cujo limite clássico é caótico. Resultados preliminares nos permitem explicar alguns aspectos até agora intrigantes, como a grande correlação de alturas entre picos de condutância vizinhos no regime de bloqueio Coulombiano.

### Descrição semiclássica de fermions compostos num campo magnético

A. H. CASTRO NETO

*Department of Physics, University of California, Riverside*

E. R. MUCCIOLO

*Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro*

Através de um tratamento semiclássico baseado numa equação de transporte, nós estudamos propriedades de um sistema de fermions compostos aplicado ao problema do nível de Landau semi-preenchido. O vínculo entre as flutuações de densidade e o campo de Chern-Simons é levado em conta consistentemente. Os resultados reproduzem algumas características previamente obtidas por cálculos microscópicos baseados na apro-

ximação de fase aleatória (RPA), mas também vai além e obtem, por exemplo, a quantização da condutividade transversal quando a desordem é suficientemente fraca. Usando a aproximação de tempo de relaxação, a condutividade estática (para vetores de onda finitos) é calculada e usada na determinação do deslocamento de velocidades em experimentos com ondas acústicas de superfície. Finalmente, o papel das interações na estabilidade do sistema como um fluido de Fermi é revelado quando se considera o efeito de blindagem na equação de transporte.

### Flutuações estatísticas em fios quânticos desordenados nos regimes metálico e isolante

E. R. MUCCIOLO

*Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro*

R. A. JALABERT

*Université Louis Pasteur, IPCMS-GEMME, Strasbourg*

J. -L. PICHARD

*CEA, Service de Physique de l'Etat Condensé, Centre d'Études de Saclay*

Neste trabalho nós investigamos as propriedades estatísticas da matrix de espalhamento  $S$  que descreve o transporte eletrônico em sistemas quasi-unidimensionais desordenados (fios quânticos). Variando o grau de desordem e supondo que a temperatura é suficientemente baixa, nós estudamos os regimes metálico e localizado quando o número de modos propagantes nos contatos  $N \gg 1$  (quando o efeito de interações é menos pronunciado). Para desordem fraca, obtem-se que as flutuações (em função do nível de Fermi) nos autovalores de  $S$  são iguais àquelas (em função de um parâmetro externo) referentes a autovalores de hamiltonianos caóticos. Ou seja, correlatores em energia dos deslocamentos

de fase de  $S$  obedecem à universalidade predita pela teoria de matrizes aleatórias quando o sistema se encontra no regime difusivo ou metálico. Essa coincidência é formalmente investigada através de um modelo de movimento browniano dos autovalores de  $S$ . No regime localizado, quando a desordem é forte, essa universalidade deixa de ocorrer, sendo o transporte dominado por tunelamento ressonante. Propomos então um modelo simples, baseado em poucas hipóteses estatísticas, para explicar semi-quantitativamente as principais características desse regime não-universal. O principal conclusão é que os correlatores *logarítmicos* apresentam algum grau de predibilidade. Finalmente, uma estreita relação entre as propriedades estatísticas do tempos de atraso e da condutância também é encontrada. A relevância desses resultados para experimentos recentes com fios quânticos é discutida.

## SEMICONDUCTORES (Crescimento e Caracterização, Defeitos, Superfícies e Interfaces) — 12/06/97

### RESSONÂNCIA MAGNÉTICA DETECTADA ELETRICAMENTE APLICADA À MULTICAMADAS DE SILÍCIO E GERMÂNIO AMORFO

CARLOS FREDERICO DE OLIVEIRA GRAEFF

DFM-FFCLRP-USP

SEIJI MIYAZAKI

Hiroshima University

Multicamadas ultra finas de silício amorfo hidrogenado e materiais relacionados têm sido amplamente estudadas como uma nova categoria de superredes semicondutoras. Neste trabalho, as propriedades de transporte e recombinação de multicamadas de silício amorfo hidrogenado/germânio amorfo hidrogenado (a-Si:H/a-Ge:H) foram investigadas em função da largura da camada de a-Ge:H pela técnica de ressonância magnética detectada eletricamente (RMDE). O crescimento das multicamadas de a-Si:H(5 nm)/a-Ge:H(1, 2, e 4 nm) foi feito pela técnica de deposição química reativa (glow discharge) pela decomposição do  $SiH_4$  num ambiente com 10% de  $H_2$  e  $GeH_4$  num ambiente com 5% de  $H_2$  à 473 K. Para a camada de a-Ge:H com largura de 4 nm, o sinal de RMDE têm sinal positivo, ou seja a condutividade aumenta em ressonância, sendo composto por duas componentes. Este sinal é observado tanto quando a amostra se encontra no escuro quanto iluminada, identificada ao processo de hopping entre estados profundos num processo de condução perpendicular ao plano das multicamadas. Para as amostras cuja camada de a-Ge:H são mais finas que 4 nm, o sinal de RMDE tem o sinal negativo, ou seja a condutividade decresce em ressonância, sendo este sinal observado apenas sob iluminação. Este sinal também é composto por duas componentes, e identificado ao processo de recombinação dos portadores foto-gerados. Estes resultados indicam que a boa fotocondutividade no infravermelho observada nestas multicamadas pode ser explicada pela transferência de portadores do poço de a-Ge:H para a camada de a-Si:H.

Apoio financeiro: Fundação Alexander von Humboldt (Alemanha) e Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP).

### LINHAS DE DLTS PARA DEFEITOS COM DOIS ESTADOS DE CARGA

EDSON FERNANDO FERRARI

UNICAMP

MARLUS KOEHLER, IVO ALEXANDRE HÜMMELGEN

UFPR

A cinética de captura e emissão de elétrons em duas etapas por defeitos em semicondutores que têm dois estados de carga dá origem a espectros de DLTS ("Deep Level Transient Spectroscopy") que dificilmente podem ser interpretados pela teoria usual de defeitos localizados. Neste trabalho, apresentamos um modelo capaz de explicar as características incomuns destes espectros. Resolvemos o sistema de equações diferenciais acopladas que governam os dois períodos de captura e emissão de elétrons e encontramos a expressão das frações de ocupação de defeitos com um elétron (estado A) e com dois elétrons (estado B) tendo em consideração as condições estacionárias impostas pelo funcionamento do aparelho de DLTS. Mostramos que os defeitos com dois estados de carga podem apresentar três tipos de espectros de acordo com a razão das taxas de emissão e o predomínio de um dos três diferentes processos de emissão possíveis:

- (i) Quando a taxa de emissão do estado A é muito maior do que a taxa de emissão do estado B ( $e_A \gg e_B$ ), o sinal de DLTS total é dado por  $L \approx f_A^I(t_p)r_A + 2f_B^I(t_p)r_B$ , sendo  $f_A^I(t_p)$  e  $f_B^I(t_p)$  as frações de ocupação dos estados A e B, respectivamente, no fim do período de captura e  $r_A$  e  $r_B$  são as amplitudes normalizadas das linhas de DLTS correspondentes à emissão exponencial às taxas  $e_A$  e  $e_B$ , respectivamente. Esta relação foi aplicada para explicar o comportamento incomum com a variação do tempo de pulso  $t_p$  das linhas H4-A e H4-B associadas a um defeito com dois estados de carga U-positivos observados em CdTe do tipo p.
- (ii) Quando  $e_A \ll e_B$ , o sinal de DLTS total é dado por  $L \approx f_B^I(t_p)r_B + [f_A^I(t_p) + f_B^I(t_p)]r_A$ . Esta equação foi aplicada ao ajustamento dos espectros de DLTS devido à vacância de arsênio  $V_{As}$  em GaAs e ao centro DX relacionado com Ga em CdMnTe.
- (iii) Quando  $e_A \approx e_B$ , o sinal de DLTS total é dado por  $L \approx f_B^I(t_p) \left( r_B + \frac{e_A r_B - e_B r_A}{e_A - e_B} \right)$ . Esta equação foi aplicada para explicar o espectro de DLTS não-exponencial associado ao centro DX com U-negativo em GaSb:S. (Ref.: Phys. Rev. B, 15 Abril 1997)

### Electronic structure of Si(100) $2 \times 2$ -Ga surface

HUMPHREY TAH ANYELE

UFMA

CLARENCE MATTHAI

University of Wales College, Cardiff - Britain

Although GaAs offers the benefits of high speed optoelectronic devices, its high cost and mechanical properties have meant that it has mostly been used for specialist devices. Growing GaAs on Si makes it possible to

design more versatile integrated optical and electronic devices utilizing the excellent thermal and mechanical properties of Si substrates and the optoelectronic capabilities of GaAs.

STM and many other surface techniques have shown that at less than 0.1 monolayer (ML) of Ga on clean Si(100)  $2 \times 1$  surface, Ga atoms line up in rows parallel to the Si dimerization direction with a two unit cell periodicity. At higher densities, the metal configuration evolves from isolated rows to areas with local  $3 \times 2$  and  $2 \times 2$  structure, to a surface entirely terminated by a  $2 \times 2$  array at 0.5 ML. Though GaAs growth on Si is generally started with an As rather than a Ga-terminated surface, the behaviour of Ga on the Si surface can provide some insight into the influence of Ga on subsequent GaAs growth on Si despite the strong covalent As-Si bonds. Experiments have shown that for coverages up to 1 ML, Ga forms a well ordered overlayer on Si(100), suggesting that Ga-terminated Si(100) surfaces could be suitable starting point for GaAs epitaxy on Si [1].

We have employed a semi-empirical tight binding model in the Extended Huckel approximation to calculate the electronic structure of Si(100) $2 \times 2$ -Ga reconstructed surface using atomic positions of the paradimer model (i.e. Ga dimers situated parallel and in troughs of the Si dimers) [2]. We have performed local density of states calculation which reveal a broad surface state centred approximately 0.3eV above and two others below the Fermi level. On-site excess charge calculations reveal charge transfer from the Ga adatoms to the sub-surface layer. This is attributed to the elongation of the Si dimer back-bond in the optimized paradimer model when compared to the bulk bond length. This is the opposite case to the clean surface ( $2 \times 1$ ) structure where the contractions of the Si dimer back-bond contribute to the formation of  $\pi$  bonds between dimer atoms.

## References

- [1] B.Bourguignon, K.L.Carleton and S.R.Leone, Surf. Sci. 204, 455 (1988).  
 [2] H.Sakama, K.Murakami, K.Nishikata and A.Kawazu, Phys. Rev. B 50, 14977 (1994).

### ESTUDO DA MACROSSEGREGAÇÃO AXIAL E RADIAL EM CRISTAIS DE $Hg_{0.80}Cd_{0.20}Te$ OBTIDOS PELO MÉTODO DE BRIDGMAN VERTICAL.

ELIZABETH GODOY CÉZAR SALGADO, COSME ROBERTO MOREIRA DA SILVA  
 CTA/IAE/AMR-ITA

CHEN YING AN, ANTONIO HORÁCIO FRANZAN,  
 IRAJÁ NEWTON BANDEIRA  
 INPE/LAS

A liga pseudobinária  $Hg_{1-x}Cd_xTe$  é um semiconductor com banda de energia proibida estreita, cuja largura pode ser modulada para um dado comprimento de onda de corte através da variação de concentração do soluto  $CdTe$ . Este material tem sido utilizado na confecção de dispositivos eletro-ópticos para operação na faixa espectral de radiação infravermelha, em particular, nos intervalos de 3 a 5  $\mu m$  e de 11 a 14  $\mu m$ . A eficiência destes dispositivos depende da qualidade dos substratos fornecidos pelo cristal, sendo desejável um alto grau de homogeneidade no perfil de composição, tanto na direção longitudinal como na radial, além de baixa densidade de defeitos cristalinos. O controle da homogeneidade composicional durante o crescimento de cristais de ligas é dificultado pelas presenças dos efeitos de segregação e de convecção, sendo necessária, deste modo, a determinação dos parâmetros adequados de crescimento (velocidade, perfil térmico, dimensões do cristal) para que as consequências prejudiciais destes efeitos possam ser minimizadas durante a solidificação. Neste trabalho apresentam-se os perfis de composição radial e longitudinal dos cristais de  $Hg_{0.80}Cd_{0.20}Te$  crescidos através do método de Bridgman com diferentes velocidades de deslocamento do cadinho. Para uma velocidade em torno de 0,4mm/h, o perfil longitudinal resulta de uma solidificação sob regime de mistura completa na fase líquida, onde a variação máxima do perfil radial é de  $\Delta \sim 12\%$ . Por outro lado, para uma velocidade de 4 mm/h, permite-se estabelecer um regime de estado estacionário controlado por difusão, na qual a variação do perfil radial chega a atingir até  $\Delta \sim 45\%$ . Os perfis de composição foram determinados através de análise química via medidas de energia dispersiva de raios-X (EDS), com auxílio de um microscópio eletrônico de varredura.

### Isotermas e Regiões de Concavidade Durante o Crescimento Bridgman de Semicondutores

DJALMA MEDEIROS, JOÃO HERMES CLERICI,  
 RODRIGO CARVALHO BENEVIDES, PAULO ROGÉRIO DA SILVA, MAIKE WINDER FERLA DE SÁ, MAURÍCIO FABBRI

Universidade São Francisco

A geração de defeitos durante o crescimento de cristais semicondutores por solidificação direcionada em fornos Bridgman depende em grande parte da forma da interface líquido-sólido (LS). A forma de interface pode ser controlada pelo perfil térmico da zona adiabática do forno e pelo acoplamento forno-carga, e depende da relação entre as condutividades térmicas das fases sólida e líquida, e da velocidade de deslocamento da ampola. As trocas de energia forno-carga, quando dominadas por radiação e condução, são bem descritas por um

coeficiente efetivo, isotrópico, de transferência de calor. Em situações onde os efeitos convectivos e de segregação de soluto ou impurezas são atenuados, a interface LS é bem próxima de uma isoterma. Durante o crescimento de semicondutores, a razão entre o fluxo térmico condutivo e o fluxo advectivo devido a translação da carga (número de Peclet) é bastante grande, e pode-se supor que o campo térmico seja estacionário em um sistema de coordenadas em movimento com a carga. Neste trabalho, determinamos numericamente as isotermas resultantes da equação bidimensional advectivo-condutiva de transporte de calor em regime estacionário, na presença de um termo fonte descrito pelo coeficiente de transferência de calor forno-carga. Os resultados são apresentados de forma normalizada, em relação à velocidade de crescimento e ao número de Biot. Deste modo, é possível o posicionamento na zona adiabática de modo a manter a interface levemente concava em relação ao cristal, tendo-se em conta a razão entre as condutividades térmicas e o gradiente médio entre as zonas quente e fria. As simulações numéricas podem ser facilmente refeitas para o caso mais comum de fornos sem zonas controladas de aquecimento. As condições de validade do método são, essencialmente, (1) acoplamento térmico convectivo desprezível através do gap forno-ampola, e (2) carga ópticamente grossa para trocas de calor radiativo.

### Perfis de Segregação em Crescimentos Bridgman com Difusão na Fase Sólida

NANCI NAOMI ARAI

*Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais*

MAURÍCIO FABBRI

*Universidade São Francisco*

Os modelos de Scheil e de Smith-Tiller-Rutter (STR) são modificados de modo a incorporar correções devido à difusão na fase sólida. Embora menores em pelo menos um ordem de magnitude do que as taxas de transporte no melt, estes efeitos podem ser detectados em medidas locais de composição no cristal. Dependendo exponencialmente da temperatura, a difusão na fase sólida influencia sensivelmente apenas o coeficiente médio de distribuição em torno da interface líquido-sólido. Os perfis corrigidos de composição são gerados através de um algoritmo implícito de grades fixas com frente móvel, que resolve a equação de difusão completa em todo o domínio cristal-melt. Incorpora-se também os efeitos de atraso no movimento da interface em relação ao deslocamento forno-ampola, bem como os detalhes locais do diagrama de fase. Os cálculos unidimensionais podem ser feitos rapidamente em computadores pessoais comuns. Os resultados numéricos são fornecidos de forma normalizada, em relação aos modelos semi-analíticos de Scheil e STR. O ajuste de perfis experimentais, relativos a crescimentos em regime difusivo (sem convecção), é feito para o caso de cristais

PbTe-SnTe crescidos na faixa 1-10mm/h. Os resultados incluem novos valores para o coeficiente de distribuição e de difusão mútua na fase líquida. O efeito da difusão sólida é, naturalmente, maior no caso de crescimentos lentos, e as curvas correspondentes ao regime de Scheil, corrigidas, adaptam-se melhor ao perfil experimental previsto pelo diagrama de fase de equilíbrio.

### METAL-SEMICONDUCTOR TRANSITION

IN  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$

RONALDO MOTA, PAULO CESAR PIQUINI

*Departamento de Física, Universidade Federal de Santa Maria, 97119-900, Santa Maria, RS, Brazil*

ADALBERTO FAZZIO

*Instituto de Física, Universidade de São Paulo, CxP 66318, São Paulo, SP, Brazil*

In recent years, much attention has been devoted to understanding the nature of electronic localization accompanying metal-nonmetal transitions in transition metal oxides. In this class of composition-induced semiconductor-metal transitions,  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$  compounds exhibit the most unusual resistivity behavior. The electronic structure of  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ , across the metal-semiconductor transition, is investigated by considering an approximate model Hamiltonian that takes into account the hybridization of the Mn 3d and O 2p states. A Green's function technique is used to obtain the hybrid bands in the Hartree-Fock approximation. We simulate the pure crystal through the molecular cluster technique and all calculations are performed at the *ab initio* Hartree-Fock level followed by configuration interaction calculations to include the electron correlation effects. The calculations are performed using the GAMESS program. Our results for the electronic structure are compared with various electron spectroscopy techniques available. The model is used to discuss the role of Sr concentration and the p-d interaction on the observed metal-insulator phase transition in  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ . The earliest work on the electrical properties in these compounds concluded a semiconductor-metal transition for  $x$  around 0.2. It can be established that increase of hybridization, which occurs when the Sr-concentration is increased, is directly responsible for the phase transition. This work permits to establish a clearer picture of the electronic structure for this material. Considering hybridization thus provides valuable new insight into the mechanism of the metal-semiconductor transition in  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ .

**Characterization of distributed Bragg reflectors and vertical-cavity semiconductor structures by modulation spectroscopy**

RICARDO TRENTIN, JÚLIO ANTÔNIO NIERI DE TOLEDO SOARES, ALEXANDER LUZ SPERANDIO, ALAIN ANDRÉ QUIVY, ROLF ENDERLEIN AND JOSÉ ROBERTO LEITE

*Laboratório de Novos Materiais Semicondutores (LNMS), Instituto de Física, Universidade de São Paulo*

Vertical-cavity structures (VCS) are opening new avenues of fundamental physics research on photonic band structure and cavity quantum electrodynamics. VCS's have been used in lasers, enhanced photodiodes, light emitting diodes and many types of non-linear switches. The increasing complexity of these vertically integrated structures, containing sometimes tens of different layers, together with the precision required in their epitaxial growth, demand accurate characterization tools. Because of the short length of the active layer of the vertical-cavity surface emitting lasers (VCSEL), high-quality reflectors are essential to keep reasonable values for the optical gain, which is determined by the mirror reflectivity. Unlike the cleaved facets of conventional semiconductor edge lasers, the flatness and parallelism of the distributed Bragg reflectors (DBR) depend on the morphology of the grown layers. Thus, key parameters, such as threshold current density and differential quantum efficiency, will depend on the layer roughness and regularity. Material parameters that should be quantified include layer thicknesses and layer compositions. Fast and nondestructive characterization tools are desired for the development of state-of-art devices and manufacturable products. In this work, two analytical tools were applied to characterize DBR structures and VCS's grown in our laboratory on GaAs wafers by means of molecular beam epitaxy (MBE). Photoreflectance was used to determine alloy composition, layer thicknesses and sample quality. Reflectance spectroscopy was used to characterize the cavity resonance and mirror layers. Good agreement was found between theoretical calculations and measurements. The results demonstrate the suitability of photoreflectance and reflectance in analyzing these structures.

**CARACTERIZAÇÃO DE ESTRUTURAS SEMICONDUTORAS ATRAVÉS DE MEDIDAS DE CAPACITÂNCIA (PERFIL DE DISTRIBUIÇÃO ELETRÔNICA).**

ADENILSON JOSÉ CHIQUITO, SÉRGIO MEGULHÃO  
*Universidade Federal de São Carlos - UFSCar*

Medidas de capacitância em semicondutores para a obtenção da distribuição eletrônica ou de dopantes é uma técnica bastante conhecida na caracterização de semicondutores. Entretanto a sua utilização em estruturas semicondutoras com confinamento de portadores (como

poços quânticos e amostras com dopagem delta) foi proposta e efetivamente usada recentemente. Neste trabalho, apresentamos o estudo do perfil de distribuição eletrônica para algumas estruturas semicondutoras baseadas em GaAs, AlAs e AlGaAs (superredes delta dopadas e estruturas composicionais com poços quânticos múltiplos e com várias espessuras de barreiras) obtidas através da medida de capacitância. Observamos que a resolução da técnica CV nestas estruturas com confinamento de portadores é dada pela extensão espacial da função de onda confinada nos poços. Nas amostras com barreiras finas, foi possível observar a presença de minibandas, pela concentração eletrônica obtida. Foram também realizadas algumas simulações numéricas para a obtenção do comportamento da capacitância como função da polarização aplicada. Com base na comparação entre os resultados experimentais e os simulados, concluímos que a forma da curva CxV depende do poço de potencial confinante. Adicionalmente, medidas de capacitância termicamente estimulada foram realizadas em todas as amostras. Apenas na amostra com dopagem delta foi possível a verificação da presença de um nível de armadilhas com energia de ativação de 300meV.

**Caracterização Magnética de Filmes Finos de a:Si Dopados com Er<sup>3+</sup>**

MAURÍCIO S. SERCHELI, PASCOAL G. PAGLIUSO, CARLOS RETTORI

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

RICARDO ZANATTA, LUÍS A. NUNES

*Instituto de Física, USP, São Carlos - SP, Brasil.*

Recentemente, semicondutores dopados com terras raras têm despertado muito interesse no desenvolvimento de dispositivos fotônicos (integração entre dispositivos ópticos e eletrônicos). Um semicondutor de grande interesse será o filme fino de Si dopado com Er<sup>3+</sup>. Devido a que, com esse dopante, ocorre uma transição de 1,54μm, correspondente ao comprimento de onda de menor atenuação em fibras ópticas. Neste trabalho, será apresentada a caracterização magnética destes materiais. Foram crescidos filmes finos, sobre substrato de quartzo, de a:Si dopados com Er<sup>3+</sup>, através do método de "rf sputtering". Utilizamos um magnetômetro SQUID, com um campo de 5000G entre 3K e 300K, para determinar a curva de susceptibilidade magnética. Através da lei de Curie, podemos determinar a concentração de Er<sup>3+</sup> de cada filme. A análise da magnetização do filme é feita levando-se em consideração a magnetização do seu próprio substrato. Para tanto, removemos cuidadosamente o filme em solução concentrada de HCl (8,15 molar) com H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, com a finalidade de oxidar o Érbio metálico remanescente. Analisando a subtração das duas curvas, pôde-se obter as concentrações de Er<sup>3+</sup> de 3,8% para o filme SiErN, e 2,3% para o filme SiErO.

Estes valores estão de acordo com as concentrações nominais de filmes evaporados.

### ESTUDO E CARACTERIZAÇÃO DE PONTOS QUÂNTICOS SEMICONDUCTORES ATRAVÉS DE MICROSCOPIA ELETRÔNICA DE TRANSMISSÃO.

S. G. RODRIGUES, E. PETIPTREZ, P. P.

GONZALEZ-BORRERO, P. BASMAJI, E. MAREGA JR  
Departamento de Física e Ciência dos Materiais, IFSC,  
USP -São Carlos

O estudo de estruturas semicondutoras com confinamento multidimensional para aplicações em dispositivos tem sido feito há muitos anos. Tais estruturas como fios quânticos e pontos quânticos (QDs) são pre-requisitos para aplicações optoeletrônicas de alta eficiência. Nosso trabalho é o de caracterização de QDs de InAs/GaAs e InGaAs/GaAs crescidos por MBE (Molecular Beam Epitaxy). Os QDs podem ser observados através de microscopia eletrônica de transmissão (TEM), para identificar sua geometria e alinhamento, que necessita de uma preparação especial das amostras. A técnica para este tipo de amostra consiste basicamente nas seguintes etapas: clivagem do material, desgaste do material, Dimpling e Ion Milling. Deve-se fazer um tratamentos diferentes dependendo da visualização: plane-view ou cross-section. Para visualização de plane-view o material é cortado em pequenos discos ( $\phi=3\text{mm}$ ); para as de cross-section primeiro são cortadas fatias, as quais são coladas com epoxy uma ao lado da outra, após isso, corta-se em formato de disco. Agora, o material passa pelo processo de dimpling, que consiste em fazer uma cavidade esférica no mesmo afim de obter uma área fina ( $10\mu\text{m}$ ). O processo de Ion milling consiste no bombardeamento da amostra por um raio de íons; a mesma sofre desgaste até que o centro da cavidade seja perfurada, criando uma região de área fina ao redor do orifício. Nesta região é feita a observação através do microscópio eletrônico de transmissão.

### Propriedades dinâmicas em heteroestruturas de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ estressadas

FRANCESCO LANCIOTTI JR, PAULO SÉRGIO PIZANI  
UFSCar

J. GROENEN, R. CARLES, G. LANDA

Laboratoire de Physique des Solides, Université Paul Sabatier

M. GENDRY

Laboratoire d'Electronique (URA CNRS 848), Ecole Centrale de Lyon

Através do uso da espectroscopia Raman procura-se evidenciar a transferência de carga efetiva ( $e_T^*$ ) entre os compostos binários finais InAs e GaAs na solução sólida  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , com especial interesse no caso onde estão

presentes estresses externos. O sistema em estudo é constituído de heteroestruturas de  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , para  $x$  variando de 0 à 1, crescidas por MBE sobre substrato de  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$  orientado na direção (100). Este sistema apresenta estresse compressivo para  $x < 0.53$  e distensivo para  $x > 0.53$ . Considera-se que a distribuição dos íons na rede segue o princípio adotado no modelo random element isodisplacement ao descrever os compostos ternários do tipo  $A_xB_{1-x}C$ . O modelo admite que os íons de índio e de arsênico estão distribuídos aleatoriamente na sub-rede dos ânions e que os ânions iguais vibram em fase e com amplitudes idênticas contra a sub-rede dos cátions. O aspecto quantitativo da aleatoriedade é levado em conta utilizando-se  $x$  (fração das posições na sub-rede dos ânions ocupadas por índio) como parâmetro. Além disso, considera-se uma dependência da carga efetiva com a concentração  $x$  bem como a já conhecida dependência da frequência com a deformação ao se definir a expressão para a constante dielétrica:

$$\epsilon(\omega) = \overline{\epsilon_\infty} + e_{T,1}^{*2}(x) \cdot n_1(x) / \mu_1 \cdot V_1 \cdot (\omega_{T,1}^2(\epsilon) - \omega^2 - i \cdot \omega \cdot \gamma_1) + e_{T,2}^{*2}(1-x) \cdot n_2(1-x) / \mu_2 \cdot V_2 \cdot (\omega_{T,2}^2(\epsilon) - \omega^2 - i \cdot \omega \cdot \gamma_2)$$

Nesta expressão os índices 1 e 2 indicam os compostos finais,  $\gamma_i$  é a constante de amortecimento,  $\epsilon$  é a deformação,  $n_i(x)$  é o número de osciladores,  $\mu_i$  massa reduzida,  $V_i$  é o volume da célula unitária e  $\overline{\epsilon_\infty} = x \cdot \epsilon_{\infty,1} + (1-x) \cdot \epsilon_{\infty,2}$ . Os valores das cargas efetivas dos compostos na solução sólida para qualquer concentração de índio são estimados diretamente a partir de um ajuste dos valores experimentais obtidos dos espectros Raman. Isto é feito utilizando-se  $\text{Im} \left( \frac{-1}{\epsilon(\omega)} \right)$  como uma função de ajuste. Esta função descreve duas lorentzianas centradas nas frequências longitudinais ópticas e a carga efetiva entra como um parâmetro ajustável. Uma comparação entre os resultados experimentais e o modelo teórico é apresentada e discutida em termos de transferências de carga entre as ligações  $\text{Ga}-\text{As}$  e  $\text{In}-\text{As}$ .

### OPTIMIZATION OF MBE-GROWN OF DISTRIBUTED BRAGG REFLECTORS FOR THE FABRICATION OF OPTICAL DEVICES.

A. L. SPERANDIO, A. A. QUIVY, J. R. LEITE  
Universidade de São Paulo, Instituto de Física,  
Laboratório de Novos Materiais Semicondutores, CP  
66318, 05315-970 São Paulo, Brazil

Molecular beam epitaxy (MBE) is for sure one of the best techniques for growing Fabry-Perot Resonators as it provides samples with very sharp interfaces and with highly precise control of the composition and thickness of the deposited layers. In this work, we are reporting on the growth and characterization of the distributed

Bragg reflectors (DBRs) made of ten alternated pairs of  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$  superlattices. The thickness of each epitaxial layer was calculated in order to represent a quarter of the nominal laser wavelength ( $\lambda=980\text{nm}$ ) inside the material, which corresponds to the minimum of energy absorption of optical fibers used for high-speed data transfer. The Al content of both materials was varied between 0 and 1 in order to optimize the total reflectivity (which should be maximum for AlAs/GaAs pairs) and the crystalline quality of the layers which generally decrease with increasing Al content. The growth conditions (substrate temperature, growth interruption, As/Ga flux ratio) of single  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$  quantum wells were optimized by photoluminescence (PL) measurements, using the absolute intensity and the full width at half maximum (FWHM) of the excitonic peak. Total reflectance measurements showed that the AlAs/GaAs DBRs were of best quality, with the stop band exactly centered around  $\lambda$ . This is mostly due to the fact that AlAs/GaAs DBRs have a stronger attenuation per pair (the difference of refractive index is maximum) and can be grown faster, as a result of the higher growth rate of binary alloys with respect to ternary ones. In these conditions, the thickness and alloy fluctuations of each layer can be minimized. The next step is now to grow and test a complete micro-cavity laser structure.

#### PROJETO E MONTAGEM DE UMA PONTA DE PROVA DE MERCÚRIO PARA CARACTERIZAÇÃO DE ESTRUTURAS SEMICONDUTORAS.

A. J. CHIQUITO, S. MEGULHÃO, E. DIAGONEL, R. RODRIGUES

*Universidade Federal de São Carlos - UFSCar*

Todos os processos de caracterização elétrica de semicondutores necessitam de contatos elétricos (em geral metálicos), os quais são convencionalmente fabricados por meio de deposição metálica em ambiente de alto vácuo. Propomos, neste trabalho, a utilização de um contato de mercúrio metálico (Hg) para medidas elétricas em semicondutores nas quais é necessário um contato retificador (contato Schottky), como no caso de medidas de capacitância para a determinação do perfil de distribuição eletrônica. O uso de um contato temporário como este, foi motivado pela medida de capacitância em semicondutores com alta concentração eletrônica, nas quais a máxima profundidade que pode ser estudada pela técnica CV é dada pela penetração do campo elétrico no material. Para contornar este problema, usamos um processo que faz uso de uma medida CV combinada com a corrosão da superfície do semicondutor, para aumentar o alcance da medida de capa-

citância. O uso de um contato temporário de mercúrio torna este processo extremamente versátil, pois não faz uso de processos complicados de evaporação em ambiente de alto vácuo. O contato de mercúrio é realizado através de uma ponta de prova construída em Teflon, vidro e aço com uma área de  $0.24\text{mm}^2$ . Através de parafusos micrométricos o mercúrio é abaixado até entrar em contato com a superfície do semicondutor. A reprodutibilidade da área do contato pode ser verificada pela própria reprodutibilidade das medidas de capacitância, propriedade esta dependente da área do contato retificador. Foram feitos vários testes com o protótipo, o qual mostrou uma ótima performance na obtenção das medidas (em torno de 8%). O mercúrio utilizado em nossas medidas foi tratado quimicamente com soluções ácidas para livrá-lo de óxidos, os quais podem alterar as propriedades elétricas do contato Schottky.

#### SIMULAÇÃO VIA MONTE CARLO PARA UMA DISTRIBUIÇÃO DE CARGAS EM EQUILÍBRIO ELETROSTÁTICO.

ARLENE CRISTINA AGUILAR, PAULO DANIEL EMMEL  
*Departamento de Física - UFSCar*

A distribuição de cargas em equilíbrio eletrostático em um material com resistividade finita corresponde à configuração de energia potencial eletrostática (E.P.) mínima. A solução analítica para este problema torna-se inviável à medida que o número de cargas elementares aumenta. Neste trabalho utiliza-se o método de simulação Monte Carlo, que gera números aleatórios e através destes determinamos as posições das  $N$  cargas, sendo possível assim calcular a E.P. classicamente. A seguir mudamos a configurações do sistema deslocando uma carga escolhida arbitrariamente e comparamos a E.P. com a anteriormente calculada, selecionando sempre a configuração de menor energia. O cálculo é repetido até a convergência da E.P.

Foram utilizados em materiais na forma de fio, superfície quadrada e cubo, obtendo configurações que apresentam algum tipo de simetria permitida pela forma do material utilizado.

Obtivemos configurações de equilíbrio diferentes para o mesmo número de cargas, correspondentes a mínimos relativos da E.P. (configurações pseudo-fundamentais), no caso de um cubo, verificamos que as cargas se situam na superfície, como era de se esperar. Simulamos uma distribuição contínua de cargas aumentando-se quantidade de cargas.

### ESTUDO DE PASSIVAÇÃO DE IMPUREZAS RASAS EM InP COM PLASMA DE HIDROGÊNIO

DARI DE OLIVEIRA TOGINHO FILHO, FERNANDO IIKAWA

*IFGW-Unicamp*

ÂNGELO LUIS GOBBI, MÁRIO TOSI FURTADO, AYRTON ANDRÉ BERNUSSI, WILSON CARVALHO JUNIOR

*CPqD-Telebras*

A incorporação de hidrogênio em semicondutores provoca passivação de estados de impurezas rasas e profundas, e de defeitos. A passivação destes estados tem como consequência a diminuição da densidade de portadores livres, aumento de mobilidade e da eficiência radiativa. O objetivo deste trabalho é utilizar as propriedades da passivação com hidrogênio para controlar a dopagem em heteroestruturas de sistemas de baixa dimensionalidade com gás bidimensional. Neste trabalho será apresentado um estudo para a otimização das condições de passivação em InP dopados com impurezas rasas. As amostras utilizadas são substratos de InP:Zn. A concentração dos dopantes é da ordem de  $10^{18}/\text{cm}^3$ . A introdução do hidrogênio é feita pela técnica PECVD operando em 30KHz. Para evitar a degradação da superfície de InP durante a exposição ao plasma, as amostras são cobertas com uma camada de  $\text{SiO}_2$  com espessura entre 10 e 20 nm, que permite a penetração de H. A análise das amostras foi feita através de medidas C-V (Polaron) e medidas óticas. Em amostras de InP:Zn observamos a redução da concentração de  $10^{18}/\text{cm}^3$  para  $10^{16}/\text{cm}^3$ , a qual foi atribuída ao efeito de passivação do aceitador Zn. Observamos também que a medida que aumenta a temperatura da amostra e o tempo de exposição ocorre a redução na concentração de portadores livres chegando nas regiões mais profundas. As medidas de fotorefletância mostram uma acentuada redução da largura de linha de absorção na região do "gap", devido a diminuição da densidade de centros espalhadores como os atribuídos ao Zn ionizado.

### Caracterização de $\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}:\text{Si}$ Crescido por MBE

EDSON LAURETO, DARI DE OLIVEIRA TOGINHO FILHO, SIDNEY ALVES LOURENÇO, RENATO CENTENARO SANTAELLA, HIROMI IWAMOTO, JOSÉ LEONIL DUARTE, IVAN FREDERICO LUPIANO DIAS  
*Universidade Estadual de Londrina*  
JEAN-CHRISTOPHE HARMAND  
*CNET - Centre Nationale d'études de Telecommunications/FRANCE TELECOM*

Foi preparado, e caracterizado elétrica e ópticamente, um conjunto de amostras da liga  $\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}$  sobre substrato de InP, no qual se variou a intensidade da dopagem de Silício. Foram realizadas medidas de Raios-X, fotorefletância a 300 K e a 77 K, fotoluminescência

a 2 K (utilizando baixa potência de excitação) e de concentração de portadores pela técnica de efeito Hall a temperatura ambiente. As camadas de AlInAs possuem 1  $\mu\text{m}$  de espessura, e foram obtidas por um sistema de MBE (Molecular Beam Epitaxy). As medidas de Raios-X confirmaram o casamento de rede da camada com o substrato de InP. Com diferentes temperaturas da célula de Silício (dopante), foram obtidas concentrações de portadores desde  $1,1 \cdot 10^{18}$  até  $1 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , medidas através da técnica de Efeito Hall a 300 K. Os espectros de fotorefletância (PR) a 300 K são caracterizados por um forte sinal do substrato de InP (o qual é bastante definido nas medidas de PR a 77 K), seguido por oscilações tipo Franz-Keldysh oriundas da camada dopada de AlInAs. Através dessas oscilações foi possível calcular o campo elétrico interno (built-in) nas camadas. Com os dados das medidas de fotoluminescência (PL) a 2 K, foi verificado que o espectro de todas as amostras consiste de duas bandas largas de luminescência próximas do gap. A primeira, centrada em 1.38 eV, está relacionada a uma transição envolvendo um nível de impureza dentro do gap. A segunda banda, centrada em 1,465 eV no espectro da amostra menos dopada, sofre um avanço para maiores energias a medida que a intensidade da dopagem aumenta. Este resultado sugere o preenchimento progressivo da banda de condução da liga (band filling) com o aumento da dopagem.

### CONCENTRATION DEPENDENCE OF Si-DOPED GaAs LAYERS GROWN BY MOLECULAR BEAM EPITAXY ON (311)A SUBSTRATES.

M. FRIZZARINI, A. L. SPERANDIO, E. C. F. DA SILVA, A. A. QUIVY, J. R. LEITE  
*Universidade de São Paulo, Instituto de Física, Laboratório de Novos Materiais Semicondutores, CP 66318, 05315-970 São Paulo, Brazil*

Molecular beam epitaxy (MBE) is one of the best tools for growing III-V compounds of high crystalline, optical and electrical quality. This technique is particularly well suited to the growth of low dimensional structures that require abrupt interfaces, precise alloy concentration and well controlled doping. Recently, it has been shown that Si evaporation on top of (311)A GaAs substrates could yield a p-type conduction. That comes from the peculiar surface properties of these substrates that are very sensible to the growth conditions and allow the Si atoms to enter the As sites when the As flux from the Knudsen cell is low enough. p-type materials obtained in that way have several advantages with respect to usual Be-doped samples, as Si material is much purer and diffuses much less in the host material than beryllium. In this work, we systematically studied and compared Si-doped layers simultaneously

grown on top of (311)A and (100) GaAs substrates. Low-temperature photoluminescence (PL) and room-temperature Hall measurements were used to investigate the optical properties, doping type, free-carriers concentration and mobilities of our samples. Transport measurements on the (311)A samples showed that they all were p type, demonstrating the efficiency of the Si incorporation into the As sites. The auto-compensation effect occurs much later (i.e. at higher Si concentration) than for usual n-type Si doping in (100) substrates. For both kinds of substrates, the behavior of the PL spectra indicates that, at low dopant concentration, the Si atoms enter As and Ga sites, leading to a competition between n- and p-type conductivity and a decrease of the mobility.

#### Electronic Structure of Acceptor Impurities in Diamond and 3C-SiC

H. W. LEITE ALVES, J. L. A. ALVES

*Depto. de Ciências Naturais, FUNREI - Fundação de Ensino Superior de São João del Rei, São João del Rei - MG*

J. R. LEITE

*Depto. de Física dos Materiais e Mecânica - Instituto de Física - Universidade de São Paulo, São Paulo - SP*

The implementation of CVD controlled growth of 3C-SiC and Diamond, during the last decade, started a rapid development of these compounds as semiconductors for high-temperature, high-power and radiation-resistant device technology. Despite the fact that there is a common sense that Boron should be the impurity responsible for the p-type activity on these materials, little is known about the microscopic nature of these centers. In this work, we calculated the electronic structure of the single acceptor impurities in both 3C-SiC and Diamond, i. e., the Boron and Aluminum impurities, at both interstitial and substitutional sites, to understand the microscopic models and the mechanisms of the p-type conduction on these materials. To do that, we have used the molecular cluster model within the framework of the *ab initio* LCAO-MO Hartree-Fock method in the Gaussian92 code. We also have used effective core potential approximation for the core electrons and double zeta basis set. We also include the dependence of our results with the cluster size, by using both 17- and 71-atoms clusters. Our results show a good agreement with both experimental findings and plane-wave calculations for the perfect 3C-SiC and Diamond lattices. In the case of both hosts, our results show that the p-type activity is due only to the presence of the B impurity, while for the Al impurity, it has a deep acceptor character (FAPEMIG, CNPq).

#### NUMERICAL SIMULATIONS OF THE EARLY STAGES OF s/Si INTERFACE GROWTH

BORKO D. STOVSIĆ, ERONIDES F. DA SILVA  
*Departamento de Física-UFPE*

A better understanding of the silicon oxidation process, especially in the early stage relevant for thin SiO<sub>2</sub> film formation, represents one of the basic requirements for technological advances of microelectronic devices and materials. Silicon oxidation has been the focus of interest in major research efforts since the mid-sixties when the first model was proposed to explain the linear-parabolic behavior. Subsequent theoretical advances have called attention to the so-called "anomalous oxidation region" of oxide thickness less than 200 Å, where the linear-parabolic model fails to explain the experimental data. Recently, several attempts have been made to model the silicon oxidation process taking into account fractal geometry of bulk SiO<sub>2</sub> and the SiO<sub>2</sub>/Si interface. Although existing phenomenological and more basic theories rather successfully describe the growth of silicon dioxide films for most of the existing experimental data, they are all based on defining a large number of independent variable parameters. The aim of this work is to establish the basic ingredients relevant for the experimentally observed thermal SiO<sub>2</sub> growth kinetics, focusing on very thin SiO<sub>2</sub> films. We perform computer simulations, based on a simple Metropolis type algorithm, for simulating the oxygen diffusion process. It turns out that at the very beginning of simulation an oxidation front of several lattice constants is rapidly formed. Thereafter, the front retains its depth, and moves at a decreasing rate towards the interior. The oxidation rate in the early stages is thus governed by two processes: the rapid formation of the front, and its subsequent diffusion.

The self-affine microscopic structure of the oxidation front observed in the simulations suggests that an adequate theoretical description should take into account the fractal nature of the SiO<sub>2</sub>/Si interface. The results arising from the simulations are in excellent agreement with experimental data, and other existing theoretical approaches. Consideration of other relevant parameters such as pressure, temperature, and crystal orientation, is the subject of current research. The numerical simulations also provide means to study the fractal structure of the oxidation front on the microscopic scale, with possible relevance for future experimental work.

(CNPq)

**ESTUDO POR RESSONÂNCIA  
PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA DA  
DENSIDADE DE LIGAÇÕES PENDENTES  
EM FILMES DE CARBETO DE SILÍCIO**

MARCOS FERNANDES DA CUNHA, FERNANDO  
PELEGRINI

UFG

ROGÉRIO JUNQUEIRA PRADO, M. P. C. CARREÑO,  
INÉS PEREYRA

USP

A perspectiva de aplicações tecnológicas de ligas de carbeto de silício amorfo hidrogenado,  $a\text{-Si}_{1-x}\text{C}_x\text{:H}$ , tem estimulado o desenvolvimento de várias técnicas de fabricação pois a variação da concentração ( $x$ ) permite a obtenção de ligas com baixa condutividade elétrica e alto gap ótico. Durante o processo de preparação das ligas ocorre, entretanto, além da deposição de radicais de carbono e silício, a deposição de radicais do tipo  $\text{CH}_n$ . Uma densidade de spins (ligações pendentes) da ordem de  $10^{19}/\text{cm}^3$  torna inviável a utilização da liga, assim formada, para a fabricação de dispositivos eletrônicos. A densidade dessas ligações pendentes, caracterizadas por um fator  $g \approx 2$ , pode ser avaliada por ressonância paramagnética eletrônica. Neste trabalho, empregando um espectrômetro BRUKER ESP-300, operando com micro-ondas com frequências em banda-X e banda-Q, procuramos avaliar a concentração de ligações pendentes em filmes de carbeto de silício amorfo hidrogenado (mistura de  $\text{SiH}_4$  e  $\text{CH}_4$ ), preparados por deposição química a vapor assistida por plasma. Para as diversas amostras investigadas, com diferentes espessuras, preparadas em diferentes condições, tais como: fluxos de  $\text{SiH}_4$  e  $\text{CH}_4$ , percentual de  $\text{CH}_4$  na câmara de deposição e pressão de deposição, determinamos o fator- $g$  e a intensidade do sinal das ligações pendentes, correlacionando-os com as condições de preparação. A análise dos resultados mostra que amostras preparadas com maior fluxo de silano e maior pressão de deposição apresentam menor densidade de ligações pendentes. Além disto, a densidade de ligações pendentes para a maior parte das amostras é inferior a  $10^{19}/\text{cm}^3$ , qualificando-as assim para aplicações tecnológicas.

**IMPACT IONIZATION AND SOLAR CELL  
CHARACTERISTICS**

PAULO NUBILE, SÉRGIO RICARDO FURTADO

INPE

Besides photogeneration, another mechanism which generates minority carriers in solar cells is the impact ionization. High energy electrons in the conduction band makes a transition to lower energy in the same band delivering the exceeding energy to electrons in the valence band. If the hot electrons energy,  $E_n$ , is such that  $E_n > 2E_g$ , the electrons in the valence band can be promoted to the conduction band, generating charged carriers and improving the device efficiency.

Depending on the average probability that the impact ionization occurs, the solar cell short circuit current, open circuit voltage and efficiency can be dramatically improved. The impact ionization in solar cells occurs when near ultraviolet light is absorbed by the material. As the absorption coefficient for this wavelength is very high, the photon is absorbed very near the surface and the impact ionization generated carrier recombines in the surface. This work analyses the impact ionization effects in the parameters of real solar cell devices, considering their physical and technological aspects. A red shift of the optimum band gap is observed for the analyzed parameters for AM0 and AM1 radiance spectra, used to evaluate impact ionization effects for both terrestrial and space use solar cells. Surface recombination effects were also included in the original theory to correct the efficiency figures for real devices. As the impact ionization probability is mainly affected by the photons absorption process, we observed that indirect bandgap materials are more effective to generate carriers by impact ionization. These optical properties were considered to calculate the efficiency of Ge, Si, GaAs and InP homojunction monocrystalline solar cells. The influence of the junction depth was studied for Si and GaAs solar cells. Solar cells used in the space environment (AM0) receive 18% more ultraviolet radiation than solar cells used in the terrestrial environment. It means that space use solar cells and their characteristics are more sensitive to impact ionization effects.

**PREPARAÇÃO QUÍMICA DE  
SUPERFÍCIES DE GaAs NOS PLANOS  
(n11)A E B.**

M. V. ALVES, S. G. RODRIGUES, P. BASMAJI, D. I.  
LUBYSHEV, E. MAREGA JR

Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São  
Paulo

O crescimento de heteroestruturas a partir de substratos de GaAs orientados em planos (n11) com  $n=1,2,3,5$  e 7, tem um grande interesse em comparação com a orientação (100), devido a possibilidade de observação de novas propriedades ópticas e de transporte. Nestas orientações foi detectado a formação direta de fios quânticos de AlAs/GaAs, num gás bidimensional e tunelamento ressonante<sup>1-3</sup>. A parte crítica do crescimento através da técnica de MBE é a determinação dos lados polares A e B e a formação passiva de óxido durante o ataque químico sobre a superfície sem rugosidade. Neste trabalho determinamos a composição química dos líquidos reagentes que atacam apenas um dos lados A ou B da superfície e o reagente para o posterior re-polimento da superfície antes do crescimento. A micromorfologia da superfície foi analisada com um microscópio eletrônico de varredura e o tipo e características das superfícies após o ataque foram estudadas

para todas as soluções. Foram obtidas superfícies com qualidade de espelho para temperaturas das soluções de 30-40°C. (1) R. Nortzel, N.N. Ledentsov, L. Daweritz, K. Ploog, Phys. Rev. B, 45(1992)p. 3507. (2) A. G. Davies, J.E.F. Rfost, D.A. Ritchie, D.C. Peacock, R. Newbury, E.H. Linield, M. Pepper, G.A.C. Jones, J. Cryst. Growth, 111(1992)p. 318. (3) M. Henini, R.K. Hayden, E.C. Valadarez, L. Eaves, G. Hill, M.A. Pate, Semicond. Sci. Technol.,7(1992)p. 267.

### CRESCIMENTO SELETIVO DE FIOS QUÂNTICOS DE $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ POR MOCVD.

ROBERTO R. PANEPUCCI

*Instituto de Física Gleb Wataghin, UNICAMP*

MARK L. OSOWSKI, E. REUTER, LI-JEN CHOU, K. C. HSIEH, JAMES J. COLEMAN, ILESANMI ADESIDA  
*Univ. of Illinois at Urbana-Champaign*

Fios quânticos e pontos quânticos apresentam propriedades ópticas muito atraentes para aplicações em dispositivos optoeletrônicos. Isto se deve principalmente ao aumento da densidade de estados nessas estruturas. Entretanto, é necessário manter a qualidade óptica da região ativa para não degradar a eficiência dos dispositivos. Métodos de fabricação de nanoestruturas semicondutoras que envolvem corrosão de heteroestruturas sofrem com a exposição da região ativa da estrutura à atmosfera. O crescimento epitaxial seletivo é um método alternativo no qual determinadas partes da amostra são cobertas por um material sobre o qual não ocorre crescimento. Na área exposta do substrato ocorre epitaxia normal da heteroestrutura tornando possível obter estruturas com dimensões nanométricas totalmente cobertas. Neste trabalho utilizamos uma máscara de  $\text{SiO}_2$  depositado por PECVD e fabricada utilizando litografia por feixe de elétrons seguida por corrosão em solução de HF. O crescimento foi realizado num reator vertical por deposição química a vapor de metalorgânicos à pressão atmosférica. Múltiplos poços de  $\text{In}_2\text{Ga}_x\text{As}/\text{GaAs}$  foram crescidos sobre GaAs. A caracterização espacial da fotoluminescência em uma matriz de fios quânticos fabricados por esta técnica será mostrada, bem como a caracterização por microscopia eletrônica de transmissão. Um modelo para o crescimento epitaxial baseado no transporte de reagentes da fase gasosa para a superfície por difusão foi desenvolvido. Os resultados de simulações obtidas com este modelo serão discutidos e uma comparação será feita com os resultados experimentais.

### PASSIVAÇÃO DE SI e GE

PASCHOAL RIZZO, WILMA MACHADO SOARES  
SANTOS, EDUARDO BESSA FILHO  
*UFRJ*

Cristais de silício e germânio são utilizados em detectores semicondutores para a análise de radiações  $\gamma$  e X. Os resultados finais de um detector estão relacionados à qualidade da superfície e da junção p-n. Diferentes técnicas de passivação foram investigadas e aplicadas na recuperação de detectores Si(Li) e Ge(HP) do tipo "Pop-Top".

Impurezas superficiais geram um aumento da corrente de fuga. O ruído produzido por flutuações da corrente de geração e da corrente superficial, componentes da corrente de fuga, deteriora a resolução do detector. Dependendo do tipo de contaminação, as superfícies podem se comportar como se possuíssem canais do tipo n ou p, que agem como junções danificadas distorcendo o campo elétrico, e as cargas geradas pela radiação incidente, só são parcialmente coletadas na região depleta do detector.

Em junções p-n a corrente de geração é devida aos pares elétron-buracos produzidos por centros de geração-recombinação no interior da região de depleção. Em junções com interfaces dos tipos Si-SiO<sub>2</sub> e Ge-GeO<sub>x</sub>, tais centros produzem uma recombinação devido as cargas na camada de óxido.

Para eliminar as impurezas superficiais aplicamos os processos de "warm-up" e "clean-up", assim como outros inerentes a necessidade de cada detector.

Processos de passivação com HF foram aplicados em um detector Si(Li) pertencente ao CENA-Piracicaba, foram utilizadas proporções variáveis de 1% a 25%. Em dois detectores Ge(HP) do Peletron da USP fizemos um "etch" com (HNO<sub>3</sub>+HF) durante um minuto e em sequência um "etch" usando HF.

Após a aplicação destas técnicas, o detector Si(Li) recuperou suas condições originais, -1500 V com resolução de 400 eV para o raio X de energia 30,97 keV da linha K <sub>$\alpha$ 2</sub> do <sup>133</sup>Cs. Um detector Ge(HP) operou com -2600 V e resolução de 1,94 keV para o raio gama de 59,54 keV do <sup>241</sup>Am e o outro detector Ge(HP) apresentou resolução de 2,7 keV para o raio gama de 1,33 MeV do <sup>60</sup>Co e -3000 V.

### Semicondutores HgI<sub>2</sub>, PbI<sub>2</sub> e PbHgI<sub>2</sub>: Propriedades Óticas e Elétricas e Aplicabilidade

FRANCISCO E. G. GUIMARÃES, JOSÉ RICARDO  
SABINO, ÉRIKA REGINA MANOEL, ANTONIO  
CARLOS HERNANDES

*Instituto de Física de São Carlos - FCM - USP*

O Iodeto de Mercúrio e o Iodeto de Chumbo são semicondutores não cúbicos que possuem uma banda de energia proibida relativamente grande de 2,1 e 2,3 eV, respectivamente. Acrescenta-se a esta propriedade a alta energia de ligação e a pequena largura de linha dos excitons no volume, o que os torna candidatos à observação da condensação de Bose-Einstein nestes materiais. Neste trabalho, as propriedades óticas e elétricas

dos semicondutores  $HgI_2$ ,  $PbI_2$  e  $PbHgl_2$  são apresentadas em relação ao método de crescimento e a qualidade cristalina dos compostos, como impurezas e estequiometria. Na caracterização utilizamos fotoluminescência à baixa temperatura e medidas de resistividade elétrica em função da temperatura. Especial atenção foi dirigida às propriedades dos excitons nestes cristais não cúbicos, que apresentam emissões com pequena largura de linha (1 meV). Isto demonstra que neste trabalho encontramos as condições necessárias para a purificação dos materiais crescidos pelos métodos PVT e Bridgman. Após poucos ciclos de purificação, foram obtidas amostras com boa qualidade cristalina e baixa concentração de impurezas. Além disso, mostraremos resultados únicos do crescimento do sistema diluído  $PbHgl_2$  ( $x < 0.05$ ). As medidas de PL mostram que o Hg incorpora-se no cristal de  $PbI_2$  como átomos intersticiais, o que é demonstrado pelo deslocamento das energias dos excitons para altas energias, indicando uma deformação da matriz de  $PbI_2$ . Para concentrações de Hg superiores a 0.05%, este é segregado na forma  $Hgl_2$  durante o processo de crescimento do cristal.

#### INITIAL OXIDATION OF THE HYDROGENATED Si < 111 > SURFACE

ROGÉRIO J. BAIERLE, MARÍLIA CALDAS  
Instituto de Física - Universidade de São Paulo

We study the formation of a complex surface defect, the clustering of Oxygen atoms at the hydrogenated Si < 111 > surface. The study is relevant by itself, and also to the understanding of the Si/SiO<sub>2</sub> interface: It is often speculated that the final interface structure may depend on the history of the growth process, and thus the initial stages of surface oxidation are of special interest. Theoretical studies in the usual first-principles supercell approaches can be carried out for the incorporation of oxygen monolayers, however, for the very initial stages of oxidation, they are specially difficult because of the need to focus on isolated surface defects, which would demand unusually large supercells. To be able to perform this investigation, we use a self-consistent, semiempirical Hartree-Fock technique, reparametrized to give a good description of structural and vibrational properties for both bulk Si and quartz, for O-defects in Si, and small relevant molecules (MNDO/Crystal). We then simulate the surface through nanocrystal cluster models (with 50 and 134 atoms), including four Si layers, and a surface layer of Hydrogen atoms. We allow relaxation of the three top layers, in the case of the free Si-H surface; the defect is then studied at the center of the surface, allowing relaxation of up to second neighbors. We find that subsurface incorporation at the bond-interstitial site is preferred over a surface Si-OH structure, and we simulate the incorporation of one up to three subsurface O-atoms. We obtain Si-H stretching frequencies within a few percent of the experimental va-

lues, and find a shift to higher energies related to subsurface O-atoms. We obtain a very definite trend in the total energy of the defect with increasing number of O-atoms, which allows us to conclude that the initial stages of oxidation, for the H-Si < 111 > surface, proceeds through island formation.

#### CARACTERIZAÇÃO DE GaAs - n POR FOTOACÚSTICA

ANTONIO PINTO NETO

UFMA

JERIAS ALVES BATISTA

UNICAMP

ANGELO LUIS GOBBI

CPQD - TELEBRAS

Caracterizamos amostras de GaAs - n dopadas com silício ( $n = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ) por espectroscopia fotoacústica. Medimos o sinal fotoacústico (intensidade e fase) em função da frequência de modulação da luz para diferentes valores de potência da luz incidente. Nosso sistema de medidas é composto de uma célula de dois feixes na configuração de transmissão; microfone do tipo de membrana a condensador; um lock-in e, como fonte de luz, um laser de argônio. Todo o sistema de aquisição é automatizado. Utilizamos amostras de substrato de GaAs - n cuja superfícies polidas foram modificadas via corrosão por íons reativos com diferentes potências (100, 200 e 300 W) tendo como gás o hidrogênio, e uma amostra padrão (sem modificação na superfície). Determinou-se o modelo de geração do sinal, bem como os termos de fonte nas equações de difusão do calor e dos portadores fotoinjetados (difusão térmica, recombinação não radioativa no volume e recombinação não radioativa nas superfícies). Separando-se os diferentes mecanismos de recombinação, ajustou-se na equação da fase, quando apenas os mecanismos de recombinação não radioativo no volume e na superfície são termos dominantes, determinou-se: a difusividade térmica; o tempo de recombinação não radioativo; o coeficiente de difusão dos portadores majoritários ou minoritários fotoinjetados e sua variação com a intensidade da luz incidente; a modificação na velocidade de recombinação na superfície modificada, devido aos diferentes valores de potência utilizado, bem como o efeito de recozimento nas amostras. Utilizou-se o algoritmo de Levenberg-Marquardt para ajustar os parâmetros. Nossos resultados mostram como a velocidade de recombinação na superfície decai com a potência de hidrogênio utilizada e os valores de retorno após o recozimento.

## SEMICONDUCTORES (Sistemas Mesoscópicos, Dopagem Planar, Tunelamento Ressonante e Dispositivos) – 13/06/97

### GÁS DE ELÉTRONS BIDIMENSIONAL NA PRESENÇA DE UM VÓRTICE

CARLOS ALBERTO ARAGÃO DE CARVALHO,

EDUARDO SOUZA FRAGA

UFRJ

RICARDO MORITZ CAVALCANTI

PUC-Rio

A influência exercida pela presença de vórtices magnéticos sobre sistemas eletrônicos bidimensionais vem-se tornando um tema de crescente interesse, tanto teórico quanto experimental. No estudo de sistemas de Efeito Hall Quântico Fracionário, é comum a utilização da abordagem (heurística) de férmions compostos (elétron + fluxo magnético). Modelos de supercondutividade “anyônica” podem ser mapeados no problema de uma partícula carregada movendo-se em um campo magnético aleatório. Campos magnéticos aleatórios também podem ser gerados, na prática, colocando-se um supercondutor desordenado do tipo II num campo magnético uniforme: as linhas de fluxo induzidas são aprisionadas pelos defeitos no supercondutor, formando uma rede desordenada de vórtices. Logo, é de grande importância o estudo da influência de um ou mais vórtices no espectro de um gás de elétrons 2D. Neste trabalho, consideramos um gás de elétrons 2D, na presença de um vórtice, com ou sem um campo magnético uniforme de fundo. Tal sistema é descrito por uma Hamiltoniana de Pauli, sendo o perfil do vórtice da forma  $B_V \theta(a - r)$ . Encontramos as soluções para a equação de autovalores exatamente, dentro e fora do vórtice, e fazemos sua junção numericamente. Fazemos um estudo sistemático do espectro como função do fluxo magnético no vórtice. Confirmando os resultados de Aharonov e Casher [Phys. Rev. A 19, 2461 (1979)], obtemos a forma explícita dos modos nulos (i.e., com  $E = 0$ ). Na ausência de um campo de fundo, estes são os únicos modos de quadrado integrável. Na presença de um campo de fundo, encontramos, além destes, outros modos cuja energia difere dos níveis de Landau. Pretendemos, ainda, investigar o efeito de um vórtice sobre a condutividade Hall do sistema.

### DOPAGEM DELTA EM SUPER-REDES SEMICONDUCTORAS SUBMETIDAS A CAMPOS MAGNÉTICOS

ANTÔNIO TADEU LINO

Universidade Federal de Uberlândia

LUÍSA MARIA RIBEIRO SCOLFARO, JOSÉ ROBERTO

LEITE

IFUSP

Utilizamos o formalismo da densidade local e aproximação da massa efetiva para descrever os estados eletrônicos de dopagem delta múltipla tipo n em GaAs e de super-redes de GaAs/GaAlAs com dopagem delta de silício no centro do poço de GaAs. Este tipo de estrutura pode ser obtido por crescimento epitaxial de mono-camadas alterando-se convenientemente o fluxo e o tipo de material desejado. Estudaremos estruturas com espessura da camada dopante da ordem de 2 angstroms e período da ordem de centenas de angstroms submetidas a campos magnéticos intensos, variando de 0 a 20 Tesla. Nosso modelo assume que a camada dopante gera um potencial tipo V e os elétrons liberados pelos doadores formam um gás bidimensional que blinda o potencial das cargas positivas. O campo magnético, perpendicular ao eixo de crescimento, foi tomado na direção y para o qual foi assumido o gauge  $A=(Bz,0,0)$ . As funções de onda são soluções da equação de Schrodinger unidimensional e o potencial coulombiano gerado é consistente com a equação de Poisson. Para satisfazer o teorema de Bloch, nós adotamos a versão de Wigner-Seitz-Slater do método celular, preenchendo o espaço com células unidimensionais e as condições de contorno para a continuidade da função de onda e sua primeira derivada são impostas nos limites da célula.

### CHARACTERIZATION OF THE TEMPORAL BEHAVIOR OF THE ELECTRON AND PHONON POPULATIONS IN A SASER

JOSÉ WEBERSZPIL, SERGIO S. MAKLER, ENRIQUE V. ANDA

Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense-UFF, Niterói-RJ

MIKHAIL I. VASILEVSKIY

Faculty of Appl. Phys., N. Novgorod University, Nizhni Novgorod, Russia

As described in previous works, a SASER is a quantum generator of ultra short wavelength coherent phonons. It is designed in such way to make longitudinal optical (LO) phonons to resonate with the two lowest electron levels inside the well of a double barrier heterostructure (DBHS). The dynamics of the system is studied by solving the kinetic equations that govern the population balance. The input and the output currents were calculated by solving a tight-binding Hamiltonian that includes the electron and phonon degrees of freedom and the interaction between them. Near the condition of

the SASER action, when the energy difference between the two lowest electron levels is close to the LO-phonon energy, polaronic effects are enhanced. The anticrossing of the excited and the satellite peaks is observed showing the formation of two polaronic branches. We derived analytic expressions for the emitter and the collector currents that permit to obtain a set of points sufficient large to perform a reliable dynamical characterization.

We have characterized the temporal behavior of the input and output currents, the electron and phonons populations as well as the SASER intensity. In a wide region of the applied potential  $V$  these quantities converge to the steady state values. Nevertheless, in a small region, depending on the parameters of the DBHS, an instability appears and the quantities already mentioned oscillate without damping. For each value of  $V$  the temporal series were studied by calculating the correlation functions, the power spectra, the return map, the fluctuation functions and the Lyapunov exponents. Our analysis shows that the instability region seems to be critical or chaotic.

### ELECTRON TRANSPORT IN $\delta$ -DOPED QUANTUM BARRIERS

J. M. SHI, G. A. FARIAS, V. N. FERIRE  
*UFC*

P. M. KOENRAAD, J. H. WOLTER  
*Eindhoven University of Technology, The Netherlands*  
F. M. PEETERS  
*Universiteit Antwerpen (UIA), Belgium*

A systematic study is presented of electronic low temperature transport properties of a heavily Si  $\delta$ -doped layer in a GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs quantum barrier in which several electronic subbands are populated. Introducing a quantum barrier into a  $\delta$ -doped GaAs makes it easy to control the energy gaps between different electronic subbands, and results in an increase in electron mobility. The effective confinement potential and the Fermi energy of the system, the energies, the wave functions, and the electron densities of the discrete subbands have been obtained as a function of the material parameters of the samples by self-consistently solving the coupled Poisson and Schrödinger equations. The quantum mobility as well as the transport mobility of electrons which are located at the different subbands have been calculated by the inclusion of both intra- and inter-subband scatterings. The electron-electron screening effects on the scattering potential are included within the random-phase approximation and also within the Thomas-Fermi approximation. We find that the electron mobility increases with the subband number, which is due to not only to the overlap of the electron wave functions with the ionized donors but also to the Fermi velocity in each subband and the electron-electron screening. A detailed comparison is performed

with the experimental results and good agreement is reached. We find that the effect of the barriers is more pronounced on the electron populations than on the electron mobilities in the different subbands, and the random-phase approximation is better than the Thomas-Fermi approximation to describe the electron-electron screening in the present structures.

### Two Bands Monte Carlo Method Applied to Electron Transport in GaAs

L. G. DE O. MESSIAS, E. MAREGA JR, P. BASMAJI  
*Departamento de Física e Ciência dos Materiais*  
*IFSC/USP*

The physics of electron transport in GaAs is being investigated by Monte Carlo method. The principle of Monte Carlo consist in the determination of distribution function of the electron in momentum space. This motion is characterized by a drift in the electric field followed by a scattering processes<sup>[1-3]</sup>. As a first approach, the modeling of the semiconductor device takes into account non-parabolic band structure, that include  $\Gamma$ -X bands<sup>[1]</sup>. In semiconductors, there are several kinds of the scattering processes that are possible. In this simple model we used the following processes<sup>[1-2]</sup>: Band I - Polar optical, Acoustic and Intervalley. Band II - Polar optical, Acoustic, Intervalley and Intravalley (scattering among the six valleys of Band II)<sup>[4]</sup>. The space charge effects is being include by coupling the Monte Carlo simulation with two-dimensional Poisson equation. We applied this method to a MOSFET structure and determine the drift velocity, distribution function,  $I_d$  and mean energy.

#### Bibliography:

- 1 - W. Fawcett, A. D. Boardman and S. Swain, *J. Phys. Chem. Solids* **31**, 1963 (1970).
- 2 - C. Jacoboni and L. Reggiani, *Rev. Mod. Phys.*, **53**, 493 (1981).
- 3 - C. Moglestue, *IEEE Trans. on Computer-Aided Design CAD-5*, 326 (1986).
- 4 - R. W. Hockney and J. W. Eastwood, *Computer Simulation Using Particles*. New York: McGraw Hill.

### Two Dimensional Numerical Analysis Using Globally Convergent Algorithm Applied to MOSFET

L. G. DE O. MESSIAS, E. MAREGA JR, P. BASMAJI  
*Departamento de Física e Ciência dos Materiais*  
*IFSC/USP*

The numerical modeling of Semiconductors devices has become an important tool in the interpretation of experimental results and theoretical analysis<sup>[1]</sup>. Although there are a large number of analytical models, limited to some specific situations<sup>[2]</sup>. When the simplifications are removed these models are become more complicated, and to solve the Poisson equation it's necessary utilized

numerical simulations. A good description of the electrical behavior of semiconductor devices requires the solution of three coupled nonlinear differential equations (drift diffusion model): Poisson's equation and electron and hole current continuity equations. The solution of these equations, poses a formidable numerical problem. In 1990 Korman and Mayergoyz<sup>[3]</sup> show an iterative method for solving the discretized steady-state semiconductor device. This method uses Gummel's block iteration technique to decouple the nonlinear Poisson and electron-hole current continuity equations<sup>[3]</sup>. The current continuity equations is written in self-adjoint form utilizing Slotboom variables, defined as:

$$n = n_i \cdot u \cdot \exp(\Phi/V_T) \quad u = \exp(-\Psi_n/V_T)$$

$$p = n_i \cdot v \cdot \exp(-\Phi/V_T) \quad v = \exp(\Psi_p/V_T)$$

The great advantage of use the Slotboom variables are that, the current continuity equations has linear differential operators with respect  $u$  and  $v$ . Using the fixed point iteration method to solution all three partial differential equations, the convergence is guaranteed for any initial guess. When the set coupled equations are solved the electric characteristics of the device, I-V curves, can be obtained.

#### Bibliography:

- 1 - S. Selberherr, Analysis and Simulation of Semiconductor Devices (Springer, New York, 1984)
- 2 - P. Lin and C. Wu, IEEE Trans. Electron Devices **ED-34**, 1947 (1987)
- 3 - C. E. Korman and I. D. Mayergoyz, J. Appl. Phys. (3) **68**, 1324 (1990)

### CURRENT-LEAKAGE INVESTIGATION IN InGaAsP/InP MULTI-QUANTUM WELL BURIED HETEROSTRUCTURE LASERS

AYRTON ANDRÉ BERNUSSI, WILSON DE CARVALHO  
JUNIOR

CPqD-Telebras

HENRYK TEMKIN

Electrical Engineering Department, Texas Tech University,  
Lubbock

Electrical derivative (IdV/dI-I) measurements have been used to investigate current leakage paths, series resistance, ideality factor and current saturation in semiconductor laser diodes. The sensibility of this technique combined with an equivalent circuit model demonstrated to be a powerful tool to characterize buried heterostructure lasers. In this work we investigated the electrical properties of strained and lattice-matched InGaAsP/InP multi-quantum well lasers emitting at 1300 nm grown by low pressure metalorganic vapor

phase epitaxy (MOVPE). Devices used here were capped mesa buried heterostructures (CMBH) formed by MOVPE regrowth with p-n-i-n current-blocking InP layers, where the InP semiinsulating layer was doped with Fe. The equivalent circuit model consisted of a) an ideal heterojunction diode in parallel with a Zener diode, representing the active region, b) an ideal homojunction diode, representing a non-linear leakage, c) a linear resistor, representing a linear leakage through the blocking layers, and d) a linear resistor, representing the contact resistance. The calculated electrical derivative characteristics were compared to the experimental data for MQW laser structures with different strain values at different heat sink temperatures. A good agreement between experimental IxV data and the equivalent circuit model was obtained. Our results suggested two well defined leakage paths. The first one dominates for currents below 0.1 mA, and it was attributed to the linear leakage through the blocking layers. For currents above 0.1 mA the leakage mechanism is due to the homojunction diode and it was found to be strongly temperature dependent. Despite the presence of both leakage paths their strength does not significantly affect laser IxV characteristics at usual operation conditions (I>1mA). The obtained results also indicate that the leakage mechanisms are not influenced by the presence of biaxial strain in the active region of the analyzed devices.

### CONDUÇÃO POR SALTOS EM UM SISTEMA BIDIMENSIONAL

CARLA P. LACERDA, SIMONE M. DE MEDEIROS,  
PAULO S. SOARES GUIMARÃES, JOSÉ F. SAMPAIO,  
MARCUS V. BAETA MOREIRA, ALFREDO GONTIJO  
DE OLIVEIRA

Universidade Federal de Minas Gerais

A existência da transição metal-isolante em sistemas bidimensionais continua um problema controverso. Os resultados teóricos indicam que a resistividade elétrica de um sistema bidimensional sempre aumenta a medida que a temperatura tende para zero, ou seja, não se prevê um comportamento metálico puro. Portanto uma verdadeira transição metal-isolante não pode existir em um sistema bidimensional. Porém, resultados experimentais recentes<sup>1</sup> mostram que a transição pode ocorrer ao menos sob certas condições. Mostramos recentemente<sup>2</sup> evidências de uma transição isolante-metal em um sistema quasi-bidimensional, GaAs com dopagem planar de Si. A transição é observada a medida que a amostra é submetida a crescentes doses de luz. Os elétrons foto-gerados são aprisionados no poço de potencial quasi-bidimensional, separados espacialmente das impurezas e defeitos doadores pelo campo elétrico intrínseco da

amostra. A concentração e a mobilidade dos portadores de carga cresce monotonicamente com a dose de luz. Mesmo com a amostra ainda no regime isolante, o número de elétrons que toma parte no processo de condução por saltos ("hopping") pode ser ajustado pela dose de luz a que a amostra foi submetida. Neste trabalho, estudamos os mecanismos de condução por saltos em GaAs com dopagem planar de Si, para diferentes doses de luz. Medidas da resistividade em função da temperatura podem ser ajustadas por  $R \propto \exp(T_0/T)^s$ , onde  $s$  é um parâmetro entre zero e um. A partir desses ajustes obtemos informações sobre a densidade de estados de impurezas no nível de Fermi e seguimos o seu comportamento a medida que o número de elétrons que participam do processo de saltos aumenta.

- [1] S.V. Kravchenko et al, Phys Rev. B 51, 7038 (1995).  
 [2] S.M. de Medeiros et al, apresentado na 8th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics, Águas de Lindóia, SP, 2-7/02/97.

#### CARACTERIZAÇÃO IV A ALTO CAMPO EM AMOSTRAS DE GAAS COM DOPAGEM PLANAR E EM LIGAS ALGAAS/GAAS.

RERO MARQUES RUBINGER, ALFREDO GONTIJO DE OLIVEIRA  
 UFMG  
 JOSÉ CARLOS BEZERRA  
 PUC-MG

Os materiais GaAs- $\delta$ Si e AlGaAs/GaAs sob efeito de campo elétrico fraco tem resposta linear ao mesmo. Ao se aumentar o campo aplicado a resposta passa a ser não linear e a depender da estrutura de níveis e bandas das amostras. Os elétrons acelerados pelo campo elétrico são conhecidos na literatura como "Hot-elétrons" por se encontrarem em temperatura muito superior à do sólido em que se encontram. A energia fornecida aos elétrons pelo campo faz com que estes ocupem níveis de defeitos, sejam ionizados dos mesmos, façam transições tipo vale  $\Gamma$  - vale L, entre muitos outros efeitos. Dependendo do tipo de defeitos (imperfeições cristalográficas e impurezas) presentes no interior do gap vários tipos de efeitos de geração/recombinação podem acontecer. Tais efeitos provocam mudanças no comportamento aparentemente ôhmico do material, podendo ocorrer em certas regiões de campo efeitos de resistência diferencial negativa. Vários dispositivos eletrônicos que operam em alta frequência tais como o Diodo Gunn e o Diodo Tunel são resultado da utilização de tais propriedades. O presente trabalho consiste na determinação do caráter de amostras GaAs- $\delta$ Si e AlGaAs/GaAs crescidas por MBE (Epitaxia por Feixe Molecular) através de medidas IV a alto campo bem como na obtenção de características dos portadores de carga tais como concentração e mo-

bilidade. Observamos que devido as diferenças de mobilidade para os portadores de diferentes sub-bandas do  $\delta$ Si várias mudanças na linearidade da resposta IV podem ser identificadas. As propriedades foram estudadas à várias temperaturas e pode-se observar mudanças em função da ocupação dos níveis de defeitos.

#### GÁS BIDIMENSIONAL DE ELÉTRONS EM UM CAMPO MAGNÉTICO PERIÓDICO

HUMBERTO A. CARMONA

Universidade Federal de São Carlos, Departamento de Engenharia de Materiais, Centro de Caracterização e Desenvolvimento de Materiais

ANDREY GEIM

Catholic University of Nijmegen

ALAN NOGARET, PETER MAIN  
 University of Nottingham

Gases Bidimensionais de Elétrons (2DEG) de alta mobilidade formados em heteroestruturas semicondutoras permitem que o movimento eletrônico seja balístico através de distâncias da ordem de vários microns. Nesse trabalho é estudado o movimento de elétrons de alta mobilidade (livre caminho médio  $\approx 10 \mu m$ ) em um campo magnético periódico na escala de  $1 \mu m$ . O campo magnético periódico é formado pela presença de uma grade de fitas supercondutoras (Pb) fabricadas na superfície da heteroestrutura onde forma o 2DEG, utilizando-se litografia por feixe de elétrons. O mecanismo responsável pela modulação espacial no campo magnético envolve o "pinning" de fluxo nos defeitos de um supercondutor e ocorre para filmes que são mais finos que o diâmetro dos vórtices no supercondutor ( $\approx 12 \mu m$  no caso de Pb). Tal sistema apresenta oscilações na sua resistividade como função de um campo magnético aplicado perpendicularmente ao 2DEG. Essas oscilações são periódicas com o inverso do campo magnético aplicado e acontecem quando o diâmetro da órbita ciclotrônica dos elétrons no 2DEG coincide com o período do campo magnético modulado. Inevitavelmente uma modulação eletrostática também é presente 2DEG devido à uma contração diferencial entre as fitas supercondutoras e a superfície da heteroestrutura. Essa modulação elétrica também origina efeitos na resistividade da amostra [1]. Entretanto, em nosso experimento somos capazes de distinguir sem ambigüidade entre os efeitos do campo elétrico periódico e do campo magnético periódico. Encontramos que um modelo semiclássico do movimento dos elétrons nesse sistema pode descrever quantitativamente o experimento, as oscilações observadas sendo equivalentes às oscilações de Weiss [1] para o caso de um campo magnético periódico. [1]D. Weiss, K. Von Klitzing, K. Ploog e G. Neimann;

Europhys. Lett. 8, 179 (1989).

### TRANSPORTE DEPENDENTE DO TEMPO EM SISTEMAS MESOSCÓPICOS

EDUARDO SOARES RODRIGUES, ENRIQUE

VICTORIANO ANDA

*Instituto de Física - Universidade Federal Fluminense*

HUGO NICOLAS NAZARENO

*Centro Internacional de Física da Matéria Condensada -  
Universidade de Brasília*

Estudamos a dependência temporal da corrente mesoscópica instalada num sistema constituído por um "dot" quântico fortemente correlacionado, quando submetido a uma perturbação considerada instantânea modelada como uma população eletrônica de forma gaussiana localizada num dos contatos do sistema no instante inicial. Esta disposição pretende simular o populamento produzido na banda de condução de um semicondutor, através da excitação elétrica ou eletromagnética do sistema. A corrente é estudada resolvendo numericamente a equação de Schrödinger dependente do tempo, para o qual é utilizado um algoritmo com conhecida estabilidade numérica.

A interação coulombiana é restrita ao "dot" e se supõe que seja local. As equações dinâmicas são resolvidas na aproximação Hubbard III autoconsistente, o qual requer um aprimoramento dos algoritmos numéricos que permitam incluir efeitos não lineares. Estudamos no sistema, o efeito do bloqueamento de Coulomb dinâmico dependendo da polarização dos elétrons incidentes e da localização espacial do pacote de ondas eletrônico incidente, analisando a propagação dela ao longo da amostra. Os efeitos não lineares são considerados explicitamente estudando várias dinâmicas possíveis em função das condições iniciais e dos parâmetros do sistema, como a largura das barreiras que fazem a conexão do "dot" quântico com os seus contatos.

Estamos aplicando o mesmo algoritmo para sistemas cuja matriz dinâmica depende explicitamente do tempo como é um sistema de dupla barreira de potencial na presença de um campo elétrico dependente do tempo e circuitos fechados que encerram fluxo quando o campo magnético que o produz é uma função do tempo.

### UNIVERSAL CONDUCTANCE FLUCTUATIONS IN A NONPLANAR WIRES WITH A TWO-DIMENSIONAL ELECTRON GAS .

J. C. ROSSI

*Universidade Federal de São Carlos*

G. M. GUSEV, N. LA SCALA JR, D. I. LUBYSHEV,  
P. BASMAJI

*Instituto de Física de São Carlos, 13560-970, Universidade  
de São Paulo, SP*

J. C. PORTAL, D. K. MAUDE

*CNRS-LCMI, F-38042, Grenoble, France and*

*INSA-Toulouse, 31077, France*

The transport in a random magnetic field has lately attracted intensive attention, due in large part to its relevance to the properties of the half-filled Landau level. There have been some recent investigations of conductance fluctuations of mesoscopic samples with a random magnetic potential [1]. It has been predicted, that in a random magnetic field the amplitude of conductance fluctuations is still of the order of  $e^2/h$ , although the correlation properties will depend on the specific realization of the random magnetic potential. Electrons confined to a nonplanar GaAs/AlGaAs heterojunction experience a random magnetic field  $B$ , since two dimensional electron gas (2DEG) is sensitive only to the normal component of  $B$ . This can be used as a model system to study a transport in samples with a random magnetic flux. In this work we study universal conductance fluctuations in samples fabricated by molecular beam epitaxy overgrowth of GaAs and AlGaAs materials on pre-patterned GaAs substrate. Pre-patterning consists of wires produced by electron beam lithography at the center of a conventional Hall bar. Magnetoresistance at  $T=50$  mK was measured in magnetic fields up to 15 T, for different angles ( between the field and the normal substrate plane using an in situ rotation of the sample. I. V. Fal'ko, Phys.Rev.B, 50, 17406 (1994).

### QUANTUM TRANSPORT IN PERIODICALLY $\delta$ -DOPED GaAs

L. C. D. GONÇALVES, A. B. HENRIQUES, N. F.  
OLIVEIRA JR

*Instituto de Física, Universidade de São Paulo*

P. L. DE SOUZA, B. YAVICH

*Centro de Estudos em Telecomunicações, Pontifícia  
Universidade Católica/RJ*

In semiconductors doped periodically with sheets of Si, electrons are released from Si atoms to the conduction band, forming a degenerate carrier system. The electrons are confined by a periodical space charge potential which splits the continuous conduction band energy spectrum into a set of minibands. In this work the quantum lifetime of carriers in individual minibands of GaAs periodically  $\delta$ -doped with Si was obtained from Shubnikov-de Haas measurements at 4.2K in magnetic fields of intensities 0-14 Teslas. The samples studied had a carrier concentration of about  $2.5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$  per doping period, and a doping period in the range 40Å-1000Å. The quantum oscillations in the magnetoresistance associated with individual minibands were

separated from the rest of the spectrum by Fourier techniques, and from the lineshape of the isolated oscillations the quantum lifetime was determined.

The lifetime of the superlattice Bloch states were calculated by using the Fermi golden rule and taking the electron-ionized impurity Coulomb interaction to be the scattering mechanism. The screening of the Coulomb centers was taken into account within the random phase approximation. Results of the theory are in fair agreement with the experimental results, which show that the quantum lifetime increases with the miniband index. It is observed that when the doping period is made shorter, the quantum lifetime of carriers in any given miniband first increases slightly and then decreases very rapidly towards short superlattice periods. Such behavior correlates with the mean distance between the charge in the miniband and the donor atoms. These results contribute to establish the optimum sample parameters which will output maximum conductance in periodically  $\delta$ -doped semiconductors.

#### COMPORTAMENTO DAS DENSIDADES DE CARGA FIXA ( $Q_{ox}$ ) E INTERFACIAL ( $Q_{it}$ ), EM ESTRUTURAS $Al/SiO_2/Si$ EXPOSTAS À RADIAÇÃO IONIZANTE

ARMANDO T. NETO, ELDER A. DE VASCONCELOS,  
ERONIDES F. DA SILVA JR  
Departamento de Física-UFPE

Devido à sua grande importância para o desenvolvimento das tecnologias de fabricação de circuitos integrados avançados, estruturas de dispositivos do tipo Metal/Óxido/Semiconductor (MOS) são objeto de intensa pesquisa em termos de suas propriedades físicas, elétricas e dos filmes finos que a constituem. Para isto desenvolvemos os processos de fabricação destas estruturas em substratos de silício tipo p e tipo n. Os dispositivos foram caracterizados utilizando-se as técnicas de Elipsometria, C x V a altas (1 MHz) e baixas (Quasi-estática) frequências, e Injeção de portadores. Neste trabalho apresentamos resultados para o comportamento das densidades de carga  $Q_{ox}$  e  $Q_{it}$  geradas nas vizinhanças da interface  $S_iO_2/S_i$  quando estruturas MOS são expostas a doses de radiação ionizante (raios-x) de até 500 Mrad (Si). A presença destes defeitos próximo à interface  $S_iO_2/S_i$  é analisada em função da estrutura dos dispositivos, seu tamanho, espessura do  $S_iO_2/S_i$ , e da dose de radiação ionizante proveniente de uma fonte de raios-x usada para simular o ambiente de funcionamento dos dispositivos. Como consequência destes experimentos, encontramos que as densidades de carga fixa e interfacial e suas variações estão correlacionadas às armadilhas de interface e à densidade total de portadores no substrato de silício, assim como às

variações observadas na concentração aparente de dopantes. Os resultados experimentais sugerem a possibilidade de tunelamento de portadores de carga através da interface  $S_iO_2/S_i$  e sua ocupação de estados associados a defeitos interfaciais provenientes destas distribuições de carga. Discutiremos os mecanismos físicos associados e outros efeitos observados no decorrer destes experimentos.

(RHAÉ, FINEP)

#### Investigation of the real semiconductor laser structure by photoreflectance method

RICARDO TRENTIN, JÚLIO ANTÔNIO NIERI DE TOLEDO SOARES, ROLF ENDERLEIN, JOSÉ ROBERTO LEITE

Universidade de São Paulo, 05389-970 São Paulo, Brazil,  
Fax: (11) 818-6381

ALEXANDER IVANOVICH BELOGOROKHOV, LUBOV IVANOVNA BELOGOROKHOVA, VLADIMIR VDOVIN  
Moscow State University, Physics Department, Leninsky Gory, Moscow 119899, Russia, Fax: 7(095) 438-7664  
E-mail: abelog@glas.apc.org

In this work we perform an experimental study of a GaInP/AlGaInP QW laser structure by means of photoreflectance spectroscopy (PRS). This method is a powerful and non-destructive technique to analyze the electronic properties of layered microstructures. The laser structure has been grown on GaAs substrate, with a GaAs contact layer on top. GaAs exhibits deep electronic levels, called DX-centers, DX-centers also arise in GaAs under hydrostatic pressure and can trap thermally activated carriers. The optical ionization energy of the centers is much higher than the observed thermal ionization energy. This leads to the observation of long-time photoconductivity at low temperatures with characteristic relaxation times of up to several days. In order to protect the active QW region from the penetration of DX-centers, the QW has been covered by a thin epilayer of AlGaInP quaternary compound with the gradient of Al contents. The layer also acts as a mirror for photons excited within the active QW region of the LS. We also may expect that, due to the presence of structural defects near an interface, the strain will be relaxed within the layer. Transmission Electron Microscopy (TEM) provide evidence of the structural perfection of the laser structure above. The TEM data show that the layers are ordered in the (311) direction. The PR measurements are done using a standard PR set-up with  $Ar^+$  laser (488 nm) as the pump beam, an halogen tungsten filament lamp as the probe beam. For this work the spectra was taken at room and liquid

nitrogen temperatures. The PR measurements are performed on two LS, a complete one and another with the contact layer removed. The signal taken from the front-side is compared to that from the substrate side to isolate the signal coming from the LS itself. In the front-side spectra, interference patterns are observed below the emission energy of the laser. Above we find spectral features which are attributed to optical transitions of the active laser region.

### DEGENERESCÊNCIA DAS EXCITAÇÕES DE BORDA NA HIERARQUIA DO EFEITO HALL QUÂNTICO FRACIONÁRIO

CARLOS MÉNDEZ, GUILLERMO ZEMBA, JORGE SIMONIN

*Centro Atômico Bariloche, 8400 Bariloche, Argentina*

Quando é considerada o gauge simétrico, as excitações de borda neutras no efeito Hall quântico fracionário podem ser classificadas de acordo a quanto seu momento angular total difere em relação ao momento angular total do estado fundamental. Pode se comprovar que as degenerescências das excitações de borda neutras para o fator de preenchimento  $\nu = 1$ , correspondentes a uma diferença de momento angular total  $\Delta M = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$ , são iguais a  $1, 1, 2, 3, 5, \dots$  respectivamente. Também pode se demonstrar que as degenerescências dos estados tipo Laughlin, que correspondem  $\nu = 1/(2m+1) = 1/3, 1/5, \dots$ , são iguais às do caso  $\nu = 1$ . No entanto, para outros preenchimentos, teorias abelianas de Chern-Simons predizem degenerescências diferentes das previstas por modelos minimais  $W_{1+\infty}$ .

Por outro lado, Jain propôs funções de onda que generalizam as funções propostas por Laughlin a fatores de preenchimento  $\nu = p/(2mp+1)$ . Uma característica muito importante destas funções de onda é que estabelecem uma correspondência entre o caso inteiro e o fracionário, não só para o estado fundamental, mas também para as excitações. Fazendo este tipo de correspondência, podemos ver que as degenerescências das excitações de borda neutras para  $\nu = p/(2mp+1)$  são iguais às de  $\nu = p$ .

Os resultados por nós obtidos, mediante a resolução exata de sistemas de até 10 elétrons, confirmam que as excitações de borda neutras estão bem descritas pelas funções de onda de Jain. Entretanto, as degenerescências obtidas deixam ainda duas alternativas possíveis: estão de acordo com as teorias abelianas de Chern-Simons, se as excitações neutras no interior do sistema têm um gap de energia, ou com os modelos minimais  $W_{1+\infty}$ , no caso em que as excitações no interior não tenham um gap de energia.

### NEW RESULTS IN PHOTOLUMINESCENCE-EXCITATION MEASUREMENTS FROM Be SINGLE DELTA-DOPED GaAs LAYERS

A. LEVINE, E. C. F. DA SILVA

*Instituto de Física da Universidade de São Paulo*

I. F. L. DIAS, E. LAURETTO

*Departamento de Física da Universidade de Londrina*

J. B. B. DE OLIVEIRA, E. A. MENESES

*Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas*

A. G. OLIVEIRA

*Departamento de Física da Universidade Federal de Minas Gerais*

Semiconductors with  $\delta$ -like layers of dopant atoms have attracted great attention for both fundamental and applied perspectives. The incorporation and spatial distribution of the dopant atoms has been investigated by secondary-ion mass spectroscopy, capacitance profiling and direct imaging by high-resolution transmission electron microscopy. Information on the electronic structure of these systems has been obtained from e.g. photoluminescence (PL) measurements and self-consistent field calculations. Information of the quasi Fermi-level energy position derived from the onset of the absorption in photoluminescence-excitation (PLE) measurements have also been reported on n-type delta doped GaAs layers. However, there is to date no information about the electronic structure of Be single  $\delta$ -doped GaAs layers derived from PLE measurements. In this work we will report for the first time PLE measurements on Be single  $\delta$ -doped GaAs layers.

We have investigated three samples with different Be concentration in the  $\delta$ -doped plane, grown by molecular beam epitaxy. The PLE spectra of the analyzed samples showed a strong feature located below the GaAs fundamental edge when the signal was detected in the energy range of the luminescence associated with the two-dimensional hole gas (2DHG). The observed features are blue shifted from the photoluminescence peaks associated with the 2DHG due to band filling effects. For p-type single  $\delta$ -doped layers, the lowest hole subbands are occupied by holes. As a consequence, transitions from the lowest hole subbands are forbidden in the absorption spectra, whereas for the PL, the transition to the vacant levels gives rise to the band-to-band recombination. Since the hole subbands are occupied by holes up to the quasi Fermi-level energy, we associate the observed features in the PLE spectra with the absorption onset of the  $\delta$ -doped structure. Moreover, for excitation above the GaAs bandgap, modulation of the luminescence intensity was observed in the

PLE spectra. Such a behavior reflects the influence of LO-phonon scattering on the recombination process of the photoexcited electrons with the 2DHG.

**CARACTERÍSTICAS E ESTRUTURA  
ELETRÔNICA DE HEMT  
PSEUDOMÓRFICA (PRESENÇA DE  
STRAIN E CANAL  $\delta$ -DOPADO)**

JOSÉ EDUARDO MANZOLI

*Ciência e Engenharia de Materiais - IFSC, IQSC, EESC - USP*

MURILO ARAUJO ROMERO

*Departamento de Engenharia Elétrica - EESC - USP*

OSCAR HIPÓLITO

*Departamento do Núcleo de Pesquisas Tecnológicas -  
Universidade de Mogi das Cruzes*

Transistores de Alta Mobilidade Eletrônica (High Electron Mobility Transistors - HEMTs) de AlInAs/GaInAs sobre InP serão a base da terceira geração de circuitos monolíticos de microondas. Apresentam excelente performance de RF, exibindo figuras de ruído da ordem de 0.5 dB e 1.2 dB em 18 GHz e 60 GHz, respectivamente, as menores entre todos os transistores operando em microondas e ondas milimétricas. Este excelente desempenho se deve a grande descontinuidade da banda de condução entre o AlInAs e o canal de GaInAs, o que aumenta o confinamento dos elétrons, melhorando as propriedades eletrônicas. Além disso, diferentes frações de Índio empregadas nos materiais, com seus parâmetros de rede cristalinos distintos, provocam tensões (stress) biaxiais nas heteroestruturas oferecendo um grau de liberdade a mais na engenharia de novos materiais semicondutores para aplicações em áreas tecnológicas estratégicas. Neste trabalho utilizamos um procedimento auto-consistente, já aplicado em outras heteroestruturas [1], incluindo efeitos de strain (esforço) para o modelamento de uma pHEMT com uma heteroestrutura específica [2]. Este dispositivo apresenta uma  $\delta$ -dopagem no centro do poço de InGaAs e a interface estressada está fora deste poço. A formulação é validada através de comparação com a caracterização elétrica. Com este estudo apresentamos uma ferramenta numérica teórica versátil através da qual é possível prever características e realizar estudos variando dados como a localização da dopagem delta e da interface estressada a fim de otimizar o dispositivo para aplicações desejadas.

Agradecemos a Julia Brown/Hughes Co., a FAPESP pelo suporte financeiro e ao Centro Nacional de Supercomputação da UFRGS.

[1]J. E. Manzoli, presented at the 1996 Material Research Society - Fall Meeting, Boston, MA, 1996.

[2]J. Brown, Hughes Corporation - personal communication.

**ELECTRONIC PROPERTIES OF  
GaAs/InGaAs/AlGaAs DELTA-DOPED  
QUANTUM WELLS**

EDUARDO KOJY TAKAHASHI, ANTONIO TADEU LINO  
*Universidade Federal de Uberlândia*

Recently a great interest has been devoted to GaAs/InGaAs/AlGaAs heterostructure, due to its superior performance in technological applications, such as high-electron mobility transistors (HEMTs), which are extremely useful devices for high-frequency microelectronics. Some experimental results are available in the literature concerning to the optical and electronic transport properties in modulation-doped case. On the other hand, the delta-doping technique has been successfully used in molecular beam epitaxy to confine the dopants to a single atomic layer in the well. In such systems the quasi two-dimensional electron gas is subject to the double confining potential caused by the hetero-interfaces and the ionized impurity sheet. In this work we performed self-consistent calculations of the electronic structure of Si  $\delta$ -doped GaAs/InGaAs/AlGaAs quantum wells for In concentrations of 0.2 and 0.25 and Al concentrations of 0.2 and 0.3. We have considered a variety of well widths and  $\delta$ -doping concentrations. The influence of the donor sheet position inside the well on the electronic structure of this system is analyzed by considering the planar doping at the centre, between the centre and one interface, and at the interface. The calculations were carried out within the local density approximation (LDA) and the effective mass theory, with many-body effects taken into account.

**FABRICATION OF INDEPENDENT  
CONTACTS TO TWO CLOSELY SPACED  
 $\delta$ -DOPED GaAs LAYERS.**

G. M. GUSEV, A. A. QUIVY, J. R. LEITE

*Instituto de Física da Universidade de São Paulo, DFMT,  
C.P. 66318, 05389-970, São Paulo, SP*

J. C. ROSSI

*Universidade Federal de São Carlos, SP*

Recently the combination of Schottky front and backgates have been used to fabricate independent contacts to two closely spaced quantum wells with electron gas [1]. The disadvantage of this method was that backgates were formed on the back side of a wafer that had been thinned to 50  $\mu\text{m}$ , and voltages in the range of 100 V had been applied in order to fully deplete the lower two-dimensional electron gas (2DEG). However the fabrication of such a kind of structure is desirable to study the coupling between two 2DEG, equilibrium tunneling and electron-electron drag. In this work we suggest a new method for the fabrication of backside contacts. The method includes the molecular-beam-epitaxy overgrowth of two closely spaced GaAs  $\delta$  layers on top of a pre-patterned GaAs film containing another single  $\delta$ -doped layer. The pre-pattern consists of stri-

pes with such a  $\delta$  layer, which can be used after overgrowth as a backside gate whose separation is  $0.3 \mu\text{m}$  from the lower 2DEG. To apply voltage independently to front and backgates we are able to measure tunneling current between closely spaced layers. To pass current only through the lower 2DEG we are able to measure voltage across the higher electron layer which is caused by electron-electron drag. Preliminary results of equilibrium tunneling between two  $\delta$  layers are presented.

1. J.P.Eisenstein, L.N.Pfeifer, K.W.West, Appl.Phys.Lett., 57, 2324 (1990)

### SYSTEMATIC STUDY OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF Si DELTA-DOPED InGaAs/GaAs

PABLO DAMASCENO BORGES, EDUARDO KOJY  
TAKAHASHI

*Universidade Federal de Uberlândia*

The delta-doping technique has been used widely to introduce carrier confinement effects and potential barrier modulation to obtain high-density and high-mobility quasi-two dimensional electron gas system. Recently, there has been a growing interest in combining the delta-doping technique with compositional quantum wells in order to obtain an extra degree of band structure engineering. From a technological point of view the InGaAs/GaAs structure has present some advantage on AlGaAs/GaAs heterostructure such as a higher mobility in InGaAs than GaAs well. In this work we report to the self-consistent calculations of the electronic structure of the n-type  $\delta$ -doped InGaAs/GaAs quantum wells for an alloy composition of  $x = 0.22$  and well widths ranging from 1 to 30 nm. The position of the donor sheet was also varied inside the well. Although there is a controversy about its strain-conduction-band offset ratio, we have used in our calculations the value  $Q_c = 0.64$  obtained by recent optical investigations in this material. The calculations were performed within the framework of the local density approximation (LDA) and the effective mass theory. Results of the electronic subband energies, potential profiles, Fermi

energy and electronic charge densities are presented and they are used to compare with recent experimental results.

### MODELAMENTO DA DENSIDADE DE CARGAS NO TRANSÍSTOR HEMT CECILIA WETTERLE RODRIGUES, MEGUMI SAITO USP

Neste trabalho foi realizado o modelamento da densidade de cargas bidimensional do sistema metal-liga dopada-semicondutor presente nos transistores HEMT. O modelamento é iniciado atribuindo ao potencial do sistema um valor arbitrário. Utilizando este potencial de entrada obtemos, através da resolução da Equação da Massa Efetiva os autovalores e os autovetores de energia para o poço de potencial presente no semicondutor. Utilizando os autovalores e os autovetores podemos obter o nível de Fermi e o potencial do sistema. Para isto, atribuímos ao nível de Fermi um valor arbitrário. Obtemos, a seguir, para cada ponto do sistema o potencial e suas derivadas através do Método das Diferenças Finitas e da Equação de Poisson. Obtido o potencial, verificar se na interface entre a liga e o metal, a diferença entre o nível de Fermi e o potencial obtido é igual a diferença entre a função trabalho do metal e a afinidade eletrônica da liga. Caso esta condição de contorno não seja satisfeita, variar o nível de Fermi e obter novamente o potencial e suas derivadas. Este ciclo deve ser repetido até que a condição de contorno seja satisfeita. Comparar, então, o potencial obtido para cada ponto do sistema com o potencial de entrada, isto é, verificar se o cálculo convergiu. Caso os potenciais sejam iguais, encerramos os cálculos. Caso contrário, construímos um novo potencial de entrada formado por uma mistura do potencial de saída e do antigo potencial de entrada e recomeçamos os cálculos. Convergidos os cálculos, teremos obtido os autovalores e o nível de Fermi e poderemos calcular a densidade de cargas no gás bidimensional de elétrons.

## SEMICONDUCTORES (Pontos e Fios Quânticos)

### SEMICONDUCTORES (Fios e Pontos Quânticos e Estrutura Eletrônica) – 11/06/97

#### SELF-CONSISTENT SIMULATION OF CHARGING EFFECTS IN SELF-ASSEMBLED QUANTUM DOTS

LEONARDO R. C. FONSECA, JEAN-PIERRE LEBURTON, RICHARD M. MARTIN  
*University of Illinois at Urbana-Champaign*

We have performed a self-consistent simulation of charging effects in strained InAs-GaAs self-assembled quantum dots. The number of electrons in the dot ( $\sim 5$ ) is controlled by applying voltage to a metal gate on the top of a complete multilayer device. We have determined the position of the differential capacitance peaks as a function of gate voltage and compared those positions obtained in the Hartree approximation with the LDA and LSDA treatments of the exchange correlation potential. In order to determine the electron occupation number in the dot which minimizes the total energy of the system, we have adopted the concept of transition state from atomic physics. We have shown that, not only the transition state approach allows a more rigorous use of the Kohn-Sham formalism in cases where the number of electrons in the dot is quantized, but also it has computational advantages since it avoids the numerical oscillations observed at low temperature for gate voltages near the differential capacitance peaks, typical of self-consistent methods which allow non-integral occupations determined by the Fermi function. We have used this methodology to determine the charging energies of a quantum dot as a function of the dot diameter, and compared those values with the respective eigenvalues measured from the Fermi level.

#### ESTADOS DE ENERGIA EM PONTOS QUANTICOS ESFÉRICOS GRADUADOS

DE  $GaAs/Al_{0.30}Ga_{0.70}As/GaAs$ .

JIAN-MIN SHI, JOSÉ RIBEIRO FILHO, RAIMUNDO NOGUEIRA DA COSTA FILHO, VALDER NOGUEIRA FREIRE, GIL DE AQUINO FARIAS  
*UFCE*

Devido aos recentes avanços tecnológicos, tornou-se possível construir estruturas semicondutoras de baixa dimensionalidade que possuem estados de energia confinados. Entre estas estruturas, os sistemas quasi-zero-

dimensionais, ou seja, os pontos quânticos (PQ). Devido as suas propriedades físicas e suas larga aplicação tecnológica os PQ's tem despertado um grande interesse tanto do ponto de vista experimental como teórico[1]. Nestas estruturas os números de elétrons é pequeno e o espaçamento dos níveis de energia é grande (da ordem de 1 meV) causado pelo confinamento das funções de onda no PQ. As propriedades de transporte nos pontos quânticos é influenciada não somente pelos efeitos de confinamento quântico, mas também pela existência de interfaces e superfícies rugosas. Neste trabalho apresentamos um estudo sobre a influência da interface sobre os estados de energia de elétrons e buracos em pontos quânticos esféricos de  $GaAs/Al_{0.30}Ga_{0.70}As/GaAs$ . A descrição da interface destes sistemas segue o modelo proposto por Freire, Auto e Farias[3], para sistemas quasi-bidimensionais. A dependência espacial do potencial e da massa efetiva dos portadores em pontos quânticos graduados só obtidos assumindo uma variação linear da fração molar de alumínio na região da interface de largura constante. Mostramos que para um ponto quântico de 50Å uma interface de apenas 6Å os estados eletrônicos excitados só eliminados.

[1] W.T. Masselink, Y.C. Chang, H. Morkoç, D.C. Reynolds, C.W. Litton, K.K. Bajaj, and P.W. Yu, *Solid-State Electron.* **26**, 205(1986).

[2] J.P. Leburton, D. Jovanovic, and I. Adesida, in the *Proceedings of the Twenty-First International Symposium on Compound Semiconductors*, pp 813-818, San Diego, CA, USA, 18-22 Sept. 1994(Bristol, UK: IOP Publishing 1995).

[3] V.N. Freire, M.M. Auto, and G.A. Farias, *Superlatt. Microstruct.* **1**, 17,(1992).

#### DINÂMICA DE PORTADORES FOTOEXCITADOS EM PONTOS QUÂNTICOS DE CdTe

M. L. REDIGOLO, A. M. DE PAULA, L. C. BARBOSA, C. L. CESAR, C. H. DE BRITO CRUZ  
*Unicamp*

Vidros dopados com nanocristais semicondutores são materiais promissores para aplicações em dispositivos ópticos devido às suas propriedades ópticas não lineares e tempos de respostas ultra-rápidos. Medidas de absorção transiente em pontos quânticos de CdTe crescidos em nosso laboratório mostraram que os portadores fotoexcitados nos níveis confinados de energia decaem rapidamente para níveis de *traps* (impurezas e ou defeitos) numa escala de tempo de femtossegundos [H. L. Fragnito *et al.*, *J. Phys. Condens. Matter* **5**, A179

(1993)]. Neste trabalho apresentamos medidas de fotoluminescência resolvida no tempo na escala de nanossegundos e estudamos a dinâmica dos portadores nos estados de *traps* em pontos quânticos de CdTe. Mostramos resultados em função da temperatura da amostra (13 K à 300 K) medidos para várias energias, correspondentes a diferentes picos observados no espectro de fotoluminescência. A fotoluminescência resolvida espectralmente mostra basicamente três picos, um pico mais intenso que apresenta um deslocamento Stokes quando comparado com o espectro de absorção, e dois picos à 170 meV e 270 meV abaixo do pico principal, respectivamente. Estes picos são tentativamente associados à vacâncias de Cd. Os espectros com resolução temporal mostram um decaimento bi-exponencial com tempos variando de 20 ns a algumas dezenas de microssegundos. Os picos de mais baixa energia apresentam decaimentos mais lentos.

### FOTOLUMINESCÊNCIA E ABSORÇÃO ÓPTICA EM PONTOS QUÂNTICOS DE CdTe

WALTER A. ARELLANO, C. L. CESAR, L. C. BARBOSA, ANA M. DE PAULA  
*Unicamp*

Apresentamos estudos das propriedades ópticas de pontos quânticos de CdTe em vidros dopados, através de medidas de fotoluminescência e absorção óptica. Estudamos duas séries de amostras crescidas com diferentes processos de tratamento térmico, uma série obtida com uma etapa única de tratamento à 560 °C e uma série obtida com duas etapas de tratamento, a primeira à 460 °C e a segunda à 540 °C. Mostramos espectros obtidos à baixa temperatura (15 K) e à temperatura ambiente (300 K). A comparação dos espectros de absorção nessas duas temperaturas permitiram o cálculo do alargamento não-homogêneo (devido a distribuição de tamanho dos pontos quânticos) e do alargamento homogêneo (devido principalmente à interação dos elétrons com fônons da rede cristalina). Os resultados mostram que as amostras crescidas com dois tratamentos térmicos apresentam distribuições de tamanho bem estreitas (desvio padrão de 5,8 %) e melhores qualidades ópticas que as amostras crescidas com apenas um tratamento. O alargamento homogêneo diminui à medida que aumenta o raio do ponto quântico, indicando um maior acoplamento elétron-fônon para pontos quânticos menores. Obtivemos também, através das energias dos picos de fotoluminescência e absorção, medidas do deslocamento Stokes em função do raio do ponto quântico para as amostras crescidas com dois tratamentos térmicos. O deslocamento Stokes aumenta à medida que diminui o raio dos pontos quânticos.

### ONE-PHONON RESONANT RAMAN SCATTERING IN A MAGNETIC FIELD

VICTOR LOPEZ RICHARD

*Universidade Federal de São Carlos, Departamento de Física.*

JULIO DRAKE

*Departamento de Física General, Universidad de La Habana*

CARLOS TRALLERO-GINER

*Departamento de Física Teórica, Universidad de La Habana*

GILMAR EUGENIO MARQUES

*Universidade Federal de São Carlos, Departamento de Física*

The electronic states of zinc-blende type semiconductors in a magnetic field yields rather a sum of product of Bloch and harmonic oscillator wave functions which shows a high degree of admixture for the valence band states, as mostly produced by the strong coupling between hole states. A realistic model for the electronic structure of heavy and light hole states may be given by the Luttinger-Kohn Hamiltonian model. This is a good description for the electronic states in semiconductors where the spin-orbit and the band gap energies are large (say  $E_g, \Delta \geq 300 \text{ meV}$ ). For such a situation, the full  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  Kane-Weiller Hamiltonian  $8 \times 8$  model can be separated into two  $2 \times 2$  matrices for conduction and SO bands, or the so called parabolic models, and a  $4 \times 4$  matrix for heavy- and light-hole states, or the Luttinger-Kohn model. In the present work, we are going to use the Luttinger-Kohn model for the valence states and the parabolic model for the conduction states, to calculate the one-phonon Raman scattering efficiency, in the presence of a magnetic field  $(0, 0, B_0)$ , for those III-V semiconductors with values of  $E_g$  and  $\Delta$  in the above range. The Raman profiles are calculated as a function of both the magnetic field and laser frequency for two distinct forms of the electron-phonon interaction: the Fröhlich interaction and the deformation potential interaction. For both cases of the electron-phonon interaction, the Raman intensity shows a set of incoming and outgoing wave resonances corresponding to different interband magneto-optical transitions. The influence of the nonparabolicity on the Raman tensor as well as the anisotropic behavior of the Landau ladders is analyzed in terms of the magnetic field and of the  $z$ -component of the hole wave-vector. The explicit expressions for the Raman scattering efficiency as a function magnetic field, laser frequency and Luttinger parameters are presented. The life-time broadening contribution from the Fröhlich interaction of the intermediate electron and hole states has been calculated exactly in this model. Based on these grounds, the essential features of very recent magneto Raman experiments can be explained.

### Electronic and Structural Properties of 3C-SiC(100) Surfaces

H. W. LEITE ALVES, J. L. A. ALVES

*Depto. de Ciências Naturais, FUNREI - Fundação de  
Ensino Superior de São João del Rei, São João del Rei -  
MG*

J. R. LEITE

*Depto. de Física dos Materiais e Mecânica - Instituto de  
Física - Universidade de São Paulo, São Paulo - SP*

The recent interest on silicon carbide(SiC) surfaces and interfaces is based on the fact that, due to its lattice parameter be very close to the III-V nitrides, SiC is the most promising substrate for heteroepitaxial growth of such materials. From the experimental point of view, while for Si-terminated surfaces reconstruction pattern is well known, the same does not occur for C-terminated surfaces. To understand the nature of these surfaces, we have studied the relaxation of the (100) surfaces of the cubic SiC(3C-SiC) by applying the Molecular Cluster Model within the framework of the *ab initio* LCAO-MO

Unrestricted Hartree-Fock method to clusters representative of these surfaces. In these clusters, the atoms at the edge of the clusters, which have been connected to further atoms in the extended system, are connected to hydrogen atoms to prevent artificial dangling bonds on the surface. The calculations were carried out with effective core potential approximation for the core electrons and double zeta basis set. Our results shown that, for Si-terminated surfaces, the  $(2 \times 1)$  pattern is the most stable one, while for C-terminated surfaces, its termination is consistent to staggered rows of unusual nearly triply-bonded C dimers bridging underlayer Si dimers in a  $c(2 \times 2)$  pattern. These results are in agreement with recent experimental findings, and we speculate about the initial steps for the GaN growth, including the adsorption of Ga and N atoms over the reconstructed surfaces(FAPEMIG, CNPq).

## SEMICONDUCTORES (Superredes)

### SEMICONDUCTORES (Superredes e Poços Quânticos) – 11/06/97

#### ONE DIMENSIONAL CHARACTER OF ELECTRON TRANSPORT IN DOPED GaAs/AlAs SUPERLATTICES

YU. A. PUSEP, A. J. CHIQUITO, S. MERGULHÃO, J.  
C. GALZERANI

*Departamento de Física, Universidade Federal de São  
Carlos, C.P.676, 13565-905 São Carlos, SP, Brazil*

We have investigated the vertical transport in the doped GaAs/AlAs SL's with broad minibands by FTIR reflection spectroscopy. No external electric field which could disturb the SL periodic potential was applied to the samples. Instead of the expected plateau-like behavior of the vertical conductivity predicted by the theory to occur when the Fermi level enters a minigap between two minibands, the metal-to-dielectric transition was found, which is the characteristic feature of the 1D transport. This result can be explained if the random fluctuations of the superlattice periodicity will be taken into consideration. Such fluctuations can cause the spatial localization of electrons living the 1D conducting channels to transfer electrons, where the nominal periodicity is conserved. The evidence of the localized electron states was obtained by examination of the temperature dependence of the capacitance of the Schottky devices fabricated with the SL's under investigation. In order to explain the experimental results the simple two-miniband model with the localized electron states in the lowest miniband and with free electrons in the high-lying second one has been developed. This model allows the qualitative explanation of the influences of the doping level and of the width of the miniband on number of thermalized electrons contributing to the temperature dependence of a capacitance.

#### Medidas de magnetofotoluminescência em poços quânticos assimétricos

A. J. C. CARDOSO, P. C. MORAIS  
*UnB*

Heteroestruturas moduladas por dopagem são excelentes candidatas para o estudo de efeitos de muitos corpos em sistemas bidimensionais, uma vez que apresentam a possibilidade de controle ótico da densidade do gás de elétrons (buracos) bidimensional. A densidade do gás bidimensional pode ser variada ótica-

mente, desde um valor nominalmente nulo até o seu valor máximo. Os sistemas investigados estão baseados em heteroestruturas de GaAs-AlGaAs e InP-InGaAs. Os poços quânticos assimétricos são obtidos quando a dopagem é feita em apenas um dos lados da heteroestrutura. Essa característica tem possibilitado mobilidades mais elevadas para os portadores, principalmente devido à maior separação entre o plasma e a interface invertida. No presente trabalho investigamos o efeito do campo magnético, aplicado paralelamente à direção de crescimento, sobre o controle ótico da densidade de um gás de elétrons bidimensional de único componente. A aplicação de campo magnético ocasiona mudanças significativas no confinamento dos portadores bidimensionais. Tem-se, no plano perpendicular à direção do campo aplicado, a quantização dos níveis de energia. Conseqüentemente, a função densidade de estados bidimensional é alterada, assim como modificam-se as propriedades óticas do plasma bidimensional. Apresentaremos medidas de fotoluminescência em poços quânticos de GaAs-AlGaAs, submetidos a diversos valores da intensidade de excitação ótica e de campo magnético aplicado. O estudo das modificações do controle ótico da densidade do gás de elétrons bidimensional, em função do campo magnético aplicado, permite uma melhor compreensão tanto dos efeitos de correlação e de troca, observados na energia de renormalização do "gap", como do mecanismo de transferência de cargas entre camadas da heteroestrutura, sobretudo o tunelamento dos elétrons através de uma barreira.

#### DEPOPULAÇÃO INDUZIDA PELO CAMPO MAGNÉTICO PLANAR

ADEMIR RICART ALVES

*Universidade Federal de Viçosa*

PAULO S. SOARES GUIMARÃES, LUIZ A. CURY,

MARCUS V. BAETA MOREIRA

*Universidade Federal de Minas Gerais*

LUÍSA M. R. SCOLFARO

*Universidade de São Paulo*

Teoricamente, mostra-se que um campo magnético aplicado paralelamente (campo planar) às interfaces de um poço quântico leva à depopulação das sub-bandas mais elevadas<sup>1</sup>. O efeito, que se deve ao aumento da massa efetiva (densidade de estados) e ao deslocamento diamagnético provocados pelo campo, tem sido investigado basicamente por meio de medidas de transporte elétrico<sup>2</sup>. Os cálculos mostram que a depopulação eletrônica pelo campo planar é pouco acentuada, só se tornando apreciável para campos elevados ( $B > 10T$ )

em sistemas especialmente projetados, nos quais a sub-banda ocupada de maior energia se encontra apenas a alguns meV abaixo da energia de Fermi.

Neste trabalho estudamos o efeito de depopulação, via campo magnético planar (até  $15T$ ), da segunda sub-banda eletrônica ( $e_2$ ) do gás de elétrons bidimensional confinado em um poço quântico assimétrico do tipo n-AlGaAs/InGaAs/GaAs, no qual a energia de Fermi localiza-se entre 5 e 8 meV acima de  $e_2$ . Para isso, realizamos medidas elétricas e ópticas estabelecendo pela primeira vez uma relação direta entre elas. Mostramos que a intensidade da magnetofotoluminescência envolvendo  $e_2$  e a magnetoresistência da amostra são igualmente reduzidas com o aumento do campo magnético planar. Tal redução é atenuada com o aumento da temperatura, que tende a repor os elétrons em  $e_2$ . Para uma amostra em que apenas uma sub-banda é populada, o efeito não é observado. Além disso, cálculos autoconsistentes mostram que a variação da densidade eletrônica de  $e_2$  com o campo planar apresenta o mesmo comportamento decrescente, na mesma faixa de campos magnéticos. Portanto, mostramos que, para amostras apropriadas, o efeito de depopulação magnética pode ser plenamente verificado por meio de medidas ópticas.

[1] F.Stern and W.E.Howard, Phys.Rev. B 163,816 (1967); A.S.Chaves, G.M.Oliveira, V.M.S.Gomes and J.R.Leite, Superlatt.Microstr. 3, 231 (1987).

[2] T.Englert, J.C.Maan, D.C.Tsui, A.C.Gossard, Solid State Comm., 45, 989 (1983).

#### Carrier diffusion investigation using photoluminescence imaging in *InGaAs - InP* quantum wells

A. F. G. MONTE, P. C. MORAIS, J. M. R. CRUZ  
*UnB*  
 H. M. COX  
*AT&T Bell Laboratories*

Among several parameters used for semiconductor transport characterization the carrier diffusion length is one of the most important. Besides its broad application in advanced optoelectronic and electronic technology the carrier diffusion length of a semiconductor material is especially important in the design and operation of photovoltaic operating devices. There are a few conventional techniques used for measuring carrier diffusion length in semiconductors. A new spectroscopic technique, based on the imaging of the photoluminescent regions of optically excited quantum wells, is used to study the transport phenomena and obtain the carrier diffusion length in a two-component plasma. The spotlight under illumination generates carriers that diffuse and recombine outside the spot. We scan spatially the photoluminescence image by measuring the local spectrally-integrated photoluminescence intensity. This technique is of considerable practical interest since

it is based on the surface scanning of the photoluminescent area under illumination. The advantages of this technique over other conventional ones is that the photoluminescent image does not require either using electrical contacts or a special growth geometry of samples in order to obtain the diffusion length and the local density of carriers. The samples we have used were grown by VLE, being lattice matched *InGaAs/InP* quantum wells with well thickness varying from 7.5 nm up to 200 nm. We found that the bidimensional diffusion of carriers depends upon the radiative recombination mechanism which changes spatially from the region of high density (spot of the laser) to the region of low density. The results describe the well thickness dependence of carrier diffusion and may provide a method for determining the ambipolar carrier diffusion length in *InGaAs* layers.

#### EFEITOS DE HIBRIDIZAÇÃO $\Gamma$ - $X$ NAS TRANSIÇÕES SUB-BANDA DE PORTADORES EM POÇOS QUÂNTICOS TIPO I

IVAN C. DA CUNHA LIMA  
*USF, UERJ*  
 GERALD WEBER  
*USF*  
 T. L. REINECKE

*Naval Research Laboratory, Washington D.C.*

A hibridização ou 'mistura' de estados eletrônicos associados com os vales  $\Gamma$  e  $X$  de heteroestruturas de GaAs-AlAs e AlGaAs-AlAs tem sido objeto de estudo continuado nos últimos anos. Tal interesse se deve a evidências experimentais de transferência  $\Gamma$  para  $X$  de portadores fotoexcitados em super-redes tipo II e, mais recentemente, também em super-redes tipo I com campo elétrico [M. Hosoda *et al*, Phys. Rev. Lett. 75, 4500 (1995)]. Neste trabalho calculamos taxas de espalhamento de portadores devido a emissão de fônons óticos (confinados e de interface) para as transições  $\Gamma \rightarrow \Gamma$  levando em consideração a hibridização  $\Gamma$ - $X$ . Os tempos são obtidos usando a regra de ouro de Fermi e a interação elétron-fônon (Fröhlich) é descrita por um modelo de continuidade dielétrico. Nós mostramos que os tempos de transição intersub-banda aumentam para larguras de poço quântico onde a segunda sub-banda de GaAs está próxima ao vale  $X$  da barreira de AlAs, e que este aumento tem uma forte dependência com o parâmetro de hibridização. Estes resultados sugerem que a hibridização pode afetar o transporte e relaxação de portadores e que medidas de tempos de transição podem ser usadas para estimar a hibridização da segunda sub-banda. Financiamento: Faperj, Fapesp (95/9437-2) e CNPq (522789/96-0).

**NÍVEIS DE ENERGIA EM POÇOS QUÂNTICOS  $Si/SiO_2$  TENDO COMO BARREIRAS SUPER-REDES  $Si/SiO_2$**

JEANLEX SOARES DE SOUSA, JOSÉ ALEXANDER KING FREIRE, GIL DE AQUINO FARIAS, VALDER NOGUEIRA FREIRE

*Universidade Federal do Ceará*

ERONIDES FELISBERTO DA SILVA JÚNIOR

*Universidade Federal de Pernambuco*

Recentemente TSU sugeriu que poços quânticos  $Si/SiO_2$  tendo como barreiras super-redes  $Si/SiO_2$  poderiam ser crescidos e ter propriedades bastante interessantes do ponto de vista da eletrônica e optoeletrônica [1]. Neste trabalho nós calculamos os níveis de energia nestes poços quânticos. Eles são obtidos considerando a aproximação da densidade de carga uniforme nas camadas de acumulação, e resolvendo as equações de Schroedinger de forma numérica através de um esquema de passos múltiplos. Como a camada  $SiO_2$  tem que ser muito fina para que possa permanecer cristalina, obtemos inicialmente informações sobre as propriedades de tunelamento dos elétrons através das super-redes  $Si/SiO_2$ . Para isto estudamos as propriedades de transmissão de elétrons através de múltiplas barreiras  $Si/SiO_2$ . Determinamos a influência da espessura e do número de barreiras, que são formadas pelo óxido de silício, nas propriedades de transmissão dos elétrons. Esta informação é fundamental para que se possa determinar o número de barreiras na super-rede  $Si/SiO_2$  para confinamento do elétron no poço. Obtemos que, para uma redução acentuada na transmissão dos elétrons através de um certo número de barreiras múltiplas, há uma relação entre o número máximo de barreiras necessárias e a espessura das mesmas. Em relação aos cálculos relativos ao poço  $Si/SiO_2$ , demonstramos que, além da largura da região de silício que determina o poço, as espessuras das regiões  $SiO_2$  e a largura das super-redes  $Si/SiO_2$  são também importantes para a determinação dos níveis de energia. Variamos as espessuras dos constituintes das super-redes e o número da camadas das mesmas. Concluímos que estes parâmetros podem ser escolhidos de forma a obter a menor penetração das funções de onda dos elétrons além das super-redes  $Si/SiO_2$ , o que é importante para a delimitação dos níveis de energia do poço quântico. Concluímos que nosso estudo teórico confirma a possibilidade sugerida por Tsu [1] para utilização de poços quânticos  $Si/SiO_2$  tendo como barreiras super-redes  $Si/SiO_2$  em optoeletrônica.

[1] Raphael Tsu, Nature 364, 19 (1993)

**INFRARED TRANSMISSION OF  $PbTe/Pb_{1-x}Sn_xTe$  MULTI-QUANTUM WELLS**

SUKARNO OLAVO FERREIRA, EDUARDO ABRAMOF, PAULO HENRIQUE DE OLIVEIRA RAPPL, HUBERTO

CLOSS, PAULO MOTISUKE, IRAJÁ NEWTON BANDEIRA, ERASMO A. DE ANDRADA E SILVA  
*LAS - INPE*

In this work we investigate the infrared transmission of multi-quantum well (MQW) samples consisting of 100 repetitions of  $PbTe/Pb_{1-x}Sn_xTe$  layers. The samples were grown by molecular beam epitaxy on (111) $BaF_2$  substrates at 200°C, using solid sources of  $PbTe$  and  $SnTe$ . The Sn composition of the individual layers was determined by the ratio of beam fluxes of the two sources and checked by X-ray diffraction on calibration samples. The growth rate was controlled "in situ" by reflection high energy electron diffraction (RHEED) oscillations. High resolution X-ray diffraction (HRXRD) were used to characterize the samples after growth, giving information about the crystalline quality and the periodicity. The transmission spectra were measured at temperatures between 77 and 300 K using a Fourier transform spectrometer operating from 2.5 to 22  $\mu m$ . The MQW spectra were fitted by the transfer matrix method using the thickness and complex index of refraction of the individual layers as input parameter. Before measuring the MQW samples, the transmission of the single layers was fitted using a two-band K.p model that includes the effects of the non-parabolic energy bands for the determination of the index of refraction. The position and absorption intensity of the MQW transition energies were used as adjusting parameters and the values obtained by the fitting procedure were compared with the ones calculated using the envelope function approximation. The calculated and measured energies agreed within 5 meV.

**SEMICONDUCTORES (Super-redes, Poços, Fios e Pontos Quânticos) – 11/06/97**

**POÇO QUÂNTICO PARABÓLICO SUBMETIDO À CAMPOS MAGNÉTICO E ELÉTRICO CRUZADOS**

ROSANA BULOS SANTIAGO

*UERJ*

LUIZ GALLISA GUIMARÃES

*UFRJ*

Estudamos as propriedades eletrônicas do sistema de poço quântico parabólico finito de  $GaAs - (Ga, Al)As$  submetido à campos elétrico e magnéticos cruzados. O campo elétrico é aplicado na direção de crescimento da heteroestrutura enquanto que o campo magnético é perpendicular a este. Este sistema apresenta no limite de campos magnéticos intensos um confinamento

tipo barreira ciclotrônica com uma estrutura de níveis eletrônicos muito semelhante ao espectro de níveis de Landau. Na situação oposta, campos magnéticos fracos, o comportamento dominante para os níveis é gerido pelo carácter confinante do poço quântico parabólico. Porém por se tratar de um poço finito, para certo regime de campo elétrico efeitos de tunelamento (níveis meta-estáveis) se fazem presentes. Por outro lado, fora dessas situações limites existe um regime de valores de campo (principalmente magnético) no qual a estrutura do potencial efetivo confinante é uma estrutura de poço duplo com uma barreira conectando estes poços. Esta situação é bastante semelhante a um modelo unidimensional para o potencial eletrônico de moléculas diatômicas. Desta forma, devido a esta analogia esperamos que a estrutura dos níveis energéticos deva se assemelhar ao espectro eletrônico de moléculas diatômicas, isto é, o espectro tenha uma forte dependência com o tunelamento através da barreira que une os dois poços. Matematicamente, o espectro é solução de uma equação transcendental descrita por funções hipergeométricas confluentes (funções cilíndricas de Weber), de modo que para evitar problemas numéricos no trato dessas funções, estamos adotando inicialmente uma abordagem semi-clássica (método WKB) para estudar este problema. Esperamos em um futuro breve re-estudarmos estes resultados sem a necessidade de métodos aproximativos.

### EFEITOS DE NÃO-PARABOLICIDADE NAS TAXAS DE TRANSIÇÃO DE PORTADORES QUENTES EM POÇOS QUÂNTICOS

AUGUSTO M. ALCALDE

*Universidade Estadual de Campinas*

GERALD WEBER

*Universidade São Francisco*

Foram calculadas as taxas de transição intra e intersub-banda devido à emissão de fônons confinados e de interface em poços quânticos de GaAs-AlGaAs, com inclusão de não-parabolicidade da banda de condução envolvendo estados com energias cinéticas altas (portadores quentes).

Encontramos que para as transições intrasub-banda e intersub-banda devido à emissão de fônons confinados, as taxas de transição aumentam significativamente incrementadas, em particular para sub-bandas correspondentes a níveis de energia mais altos e situações de grande confinamento eletrônico. O comportamento observado se explica devido ao incremento da densidade final de estados e do *overlap* entre as funções de onda eletrônicas e o potencial do fônon. Este comportamento ocorre apesar de que os fônons emitidos possuem um vetor de onda maior do que na aproximação parabólica. Para transições produzidas por emissão de fônons de interface, se observa que em geral estes são reduzidas devido aos efeitos da não-parabolicidade. Isto ocorre

devido à redução da integral de *overlap* elétron-fônon quando as funções de onda eletrônicas se afastam das interfaces, onde os modos vibracionais são máximos.

Nossos resultados mostram que as taxas de transição elétron-fônon são significativamente sensíveis à estrutura eletrônica, especialmente para transições envolvendo estados de energia mais alta, e portanto um conhecimento detalhado da estrutura das sub-bandas de energia é claramente importante.

Finalmente, mostramos que os nossos resultados podem ser interpretados em termos do vector de onda de fônon ou equivalentemente do acoplamento elétron-fônon de Frölich, da densidade de estados finais e do *overlap* elétron-fônon.

### EFEITOS DO TAMANHO E DISPERSÃO NO CONFINAMENTO QUÂNTICO EM VIDROS DOPADOS COM QD DE PbTe

RAUL F. CUEVAS, L. C. BARBOSA

*IFGW/UNICAMP*

O. L. ALVES

*IQ/UNICAMP*

A. F. CRAIEVICH

*LNLS*

H. M. DE PAULA, C. L. CESAR

*IFGW/UNICAMP*

Nos estudamos os efeitos do confinamento quântico em vidros dopados com quantum dots (QD) de PbTe analisando a dispersão de tamanho e seus efeitos na energia do éxton. Baseado no modelo  $k \cdot p$  e assumindo que a distribuição de tamanho é do tipo Gaussiana calculamos o parâmetro  $\xi = D/R_0$  que é definido como a dispersão de tamanho e  $E_c$  que é a energia de confinamento para um QD de raio  $R_0$ . Os resultados mostraram que a 600 °C, conforme aumenta o tempo do tratamento a dispersão de tamanho  $\xi(\%)$  diminui 6,2; 8,8. A 620 e 650 °C esta tendência não é mais observada, sendo 7,0; 8,0 e 5,4; 7,9, respectivamente. Com base a estes resultados poderíamos dizer que a tratamentos térmicos muito longos e a temperaturas muito altas o crescimento monotônico dos microcristais deixa de ser válido, o qual provavelmente deva-se ao início de um processo de crescimento competitivo dos QD, de modo que os cristais maiores crescem em detrimento dos menores, com a continuidade do processo um número cada vez maior de QD apresentaram raios abaixo de um tamanho crítico, causando um agregamento e fazendo com que os raios medios dos QD estaveis alcancem maiores raios. Em uma descrição quantitativa da dependência do tamanho dos QD da energia do éxton, utilizamos o modelo "tight binding" que leva em conta a não parabolicidade das bandas do "bulk" cujos efeitos são mais relevantes para os QD. Os raios dos QD foram medidos para a amostra tratada a 650 °C utilizando a tecnica SAXS e correlacionados com a energia do éxton calculada seguindo o modelo "tight binding" e a aproximação

da massa efetiva para efeito de comparação.  
CNPq/PADCT/FAPESP

**POLARON EFFECT ON  
NEGATIVELY-CHARGED SHALLOW  
DONORS IN A QUANTUM WELL**

J. M. SHI, G. A. FARIAS, V. N. FREIRE

*UFC*

G. Q. HAI

*UFSCarlos*

F. M. PEETERS

*Universiteit Antwerpen (UIA), Belgium*

We present a theoretical study of the polaron effect on the states of a negatively-charged shallow donor ( $D^-$ ) in a GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  quantum well, which is formed by a shallow donor ( $D^0$ ) trapping an extra electron in semiconductors.  $D^-$  centers are one of the simplest many-body electronic systems, which can not be solved exactly. Therefore, they can be used as a test for theoretical descriptions. Using a variational approach including electron-electron correlations, we have obtained the wave function and the energy levels of the  $D^-$  states as well as the shallow donor states in the absence of the electron-phonon interaction. Our major attention is focused on the  $D^-$  center in weakly polar semiconductors. Within second-order perturbation theory, the polaron correction to the  $D^-$ ,  $D^0$  centers as well as the free electron in the lowest subband of the quantum well have been calculated. The knowledge of these three systems is essential to describe the binding energy of the  $D^-$  centers. Both upper and lower bounds to the energy shift of the ground state, and also to the  $D^-$  transition energy, have been derived for the first time by the use of an effective expansion of the formula for the polaron energy shift. The results show a stronger polaron effect in these systems than for two independent single-electron systems due to the effective electron-electron interaction. The polaron correction to the  $D^-$  level depends strongly on the properties of the electron-phonon interaction and/or the relative position of the two electrons. The  $D^-$  binding energy is increased dramatically due to the polaron effect in the strong confinement quantum wells, while this effect on the  $D^-$  transition energy is relatively small.

**SHALLOW DONOR STATES IN A GRADED  
SPHERICAL QUANTUM DOT**

J. M. SHI, V. N. FREIRE, G. A. FARIAS

*UFC*

We present a theoretical study of the interface-roughness effects on the shallow donor states in a GaAs/ $\text{As}_x\text{Ga}_{1-x}\text{GaAs}$  single spherical quantum dot. A variational approach is used to obtain the energy levels and the wave functions of the shallow donor as function of the radius and barrier height of the dot, the width

of the interface, as well as the position of the donor. In the actual calculation, roughness of the interfaces is simulated by the interfacial Al molar fraction variation, and the effects of the electron effective mass discontinuity and band nonparabolicity are also included. A detailed comparison of our results is performed with those obtained in the corresponding structures having sharp interfaces and/or for the electron having an uniform effective mass in the parabolic band. We found that: (1) the effect of interface roughness enhances the energies of the donor states, and this effect becomes important when the interface has a 10 Å width for a dot having Al concentration  $x = 0.3$  and a radius 100 Å in which the energy shift of the ground state due to this effect is about 5 meV which is observable in experiments; (2) the interface-roughness influence is weaker for the case of the donor located at the dot center than for the case without any impurities because of the Coulomb interaction attracting the electron far away from the interfaces, while this situation is becoming opposite when the donor moving close to the interface; and (3) the effect of the discontinuity of the electron effective mass (of nonparabolicity) is also important in the weak (strong) confinement quantum dots.

**PHOTOLUMINESCENCE SPECTRA  
ASSOCIATED TO SHALLOW ACCEPTORS  
IN GaAs LOW-DIMENSIONAL SYSTEMS.**

CARLOS ALBERTO DUQUE

*Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia*

NELSON PORRAS-MONTENEGRO

*Universidad del Valle, Cali, Colombia*

Understanding the electronic and impurity properties in semiconductor heterostructures has attracted both experimental and theoretical attention in the last two decades due to the wide-ranging potential applications of these structures in electronic devices. In particular, in the past few years, a considerable effort has been made in the study of the properties of impurity states in low-dimensional semiconducting structures having quantum confinement in one, two, or three dimensions. Recently, Hiruma et al. [1] have performed the optical characterization of GaAs quantum-wire microcrystals grown by organometallic vapor-phase epitaxy. A typical microcrystals would have a hexagonal-like cross section which would decrease in a stepped fashion. As the carriers are confined in a quantum-wire-shaped microcrystal surrounded by air, a modeling of the system with an infinite confining potential should be realistic. In this work we present, therefore, a theoretical study of the acceptor-related photoluminescence spectra in GaAs low-dimensional system, with finite cylindrical shape (Length =  $L$  and radius =  $R$ ). The reference frame is located at the center of the system. The acceptor states are described within a variational scheme in the effective-mass approximation. Photolumines-

cence spectra associated with acceptors are calculated for a homogeneous distribution of impurities, located at  $(\rho_i, z_i)$ , and considering an infinite-confinement potential model. We found three well defined structures in the theoretical photoluminescence spectra associated with transitions from the first conduction level in the electron gas to acceptors located at: 1)  $(0,0)$ , 2)  $\rho_i > R - 5a^*$  with  $|z_i| < L/2 - 5a^*$  or  $\rho_i < R - 5a^*$  with  $|z_i| > L/2 - 5a^*$ , and 3)  $\rho_i > R - 5a^*$  with  $|z_i| > L/2 - 5a^*$  or  $\rho_i < R - 5a^*$  with  $|z_i| > L/2 - 5a^*$ . Our results are in good agreement with previous experimental work in quantum dots [1] and theoretical results, in infinite cylindrical quantum-well wires, obtained by Oliveira et al. [2].

#### References

- [1] K. Hiruma, T. Katsuyama, K. Ogawa, M. Koguchi, and H. Kakibayashi, *Appl. Phys. Lett.* 59, 431 (1991).  
 [2] L. E. Oliveira, N. Porras-Montenegro, and A. Latgé, *Phys. Rev.* B47, 13864 (1993).

### THERMAL PROPERTIES OF A LIGHTLY DOPED AND COMPENSATED QUANTUM WELL, BY MONTE CARLO SIMULATION.

R. M. SERRA, J. R. LEITE

*Instituto de Física - USP*

P. D. EMMEL

*Departamento de Física - UFSCar*

We consider a lightly doped and partially compensated quantum well, with shallow donors as major impurities, at low temperatures. We utilize the Monte Carlo Simulation to obtain a random distribution of impurities and the occupation numbers of electrons bound to donors. The model used is the Semiclassical Impurity Band<sup>[1]</sup>, where the electrons bound to neutral donors receive a quantum treatment while the properties of ionized impurities are calculated classically. Due to the low density of donors considered ( $n_D = 10^{10} \text{cm}^{-2}$ ) we can neglect the superposition of electron wave functions. Baranovskii et al<sup>[2,3]</sup>, showed that the dominant contribution for the thermodynamics of a impurity system is determined by electronic transition between pairs of donors (neutral and ionized) localized one near the other. At low temperatures this interaction shows a dipole-dipole characteristic. Based in this interaction, the occupation numbers of system change as the temperature increase, as result of the transfer of electrons between donors pairs. Thus, we can compute the evolutional the thermal properties of the system with temperature raise. We obtain the thermal energy and the density of electronic states per donor as function of the temperature. This calculation is performed several times, so as to obtain mean values of the thermal properties of the system.

As an application of the simulation method we calculate the electronic specific heat and compare with results obtained by self-consistent<sup>[4]</sup> method, in which is

made a homogeneous distribution of impurities.

#### References.

1. E. A. de Andrada e Silva e I. C. da Cunha Lima. *Phys. Rev. B* 39, 10101 (1989).
2. S. D. Baranovskii, A. A. Uzakov e A. L. Efros, *Soviet. Phys. JETP* 56, 422 (1982).
3. S. D. Baranovskii, B. I. Sklovskii e A. L. Efros, *Soviet. Phys. JETP* 51, 199 (1980).
4. R. M. Serra e P. D. Emmel, *8<sup>th</sup> Brazilian Workshop on Semiconductor Physics (Brazilian Journal of Physics)* (1997).

### OPTICAL SPECTRA OF QUASI-PERIODIC SEMICONDUCTOR SUPERLATTICE

M. S. VASCONCELOS, E. L. ALBUQUERQUE, A. M. MARIZ

*Universidade Federal do Rio Grande do Norte*

Although the electronic properties of semiconductor superlattice and multi-quantum-wells have attracted enormous attention in the last decade, considerably less effort has been done on the optical properties of these artificial specimens. In particular, these properties in a new class of artificial crystal, the so-called quasi-periodic structures, seem to have important interesting features. These quasi-crystals are formed by the superposition of two (or more) incommensurate periods, so that they can be defined as intermediate systems between a periodic crystal and the random amorphous solids. On other hand, the propagation of light in quasi-periodic layered materials could provide an excellent way to probe experimentally localized states. The reason for that is because localization phenomenon is essentially due to the wave nature of the electronic states, and thus could be found in any wave phenomena. It is the aim of this work to present the optical spectra of multiple layers in a quasi-periodic arrangement forming a Cantor set. Using a transfer matrix approach, to simplify the algebra which is otherwise much involved, we find the reflectance and transmission theoretical expressions for quasi-periodic structures which obey the Fibonacci, Thue-Morse and Double-period substitucional sequence. Then, we present numerical calculations of these spectra which show, among other interesting properties, a rich structure of self-similarity, which a series of scaling point in the reflection (and transmission) pattern, physically characterized by a dip (peak) of the reflectance (transmission) spectrum. Of course, these scale points form themselves another Cantor set. A comparison with the spectra found in periodic structure is also done, with more interesting features to understand the physical properties of these quasi-periodic structures.

**PLASMON-POLARITON SPECTRA IN  
QUASI-PERIODIC SEMICONDUCTOR  
SUPERLATTICES WITH A  
TWO-DIMENSIONAL ELECTRON GAS**

M. S. VASCONCELOS, E. L. ALBUQUERQUE

*Universidade Federal do Rio Grande do Norte*

As a result of recent advances in experimental techniques, the investigation of the properties of collective excitations, such as plasmon-polariton modes, in multilayered systems is currently the focus of much attention. In particular, the physical properties of a new class of artificial layered media, the so-called quasi-periodic superlattice, have also attracted a lot of attention recently. It is the aim of this work to carry out a comparative theoretical analysis for the spectra of plasmon-polaritons of a multiple semiconductor layers in the periodic arrangement and in a quasi-periodic arrangement obeying substitutional sequences such as Fibonacci, Thue-Morse and Double-period. These substitutional sequences are described in terms of a series of generations that obey their peculiar recursion relations. To set up these quasi-periodic superlattices we consider two building blocks  $\alpha$  and  $\beta$ , where each block consists of a two-dimensional electron gas (2DEG) charge sheet and a layer of medium **A** or **B**, which may have different thickness  $a$  and  $b$ , and dielectric function  $\epsilon_A(\omega)$  and  $\epsilon_B(\omega)$ . They may also have a volume density of charge. We consider a semi-infinite superlattice structure where the cartesian axes are chosen in such a way that the  $z$ -axis is normal to the plane of the layers. The structure is terminated at the plane  $z = 0$ , with the half-space  $z < 0$  filled with a material that has a frequency-independent dielectric function  $\epsilon_S$ . In order to find the bulk and surface plasmon-polariton spectra, we use a convenient description of the spectra based on a transfer matrix treatment to simplify the algebra, with a model frequency-dependent dielectric function, including the effect of retardation. Numerical results are then presented with interesting features of the quasi-periodicity of the superlattices.

**Carrier capture time in semiconductor  
quantum wires**

MARIA CAROLINA DE OLIVEIRA AGUIAR, GUSTAVO  
ARNALDO NARVAEZ, JOSÉ ANTÔNIO BRUM  
*UNICAMP*

Several methods have been employed to fabricate semiconductor quantum wires (QWRs) in the last years. One class of QWRs confinement is obtained through the quantum mechanical effects in classically unbound systems. Among these systems are the T-shaped, v-groove and Wiggled QWRs. Some of these systems have already shown lasing capabilities. The carrier capture time in these systems is one of the fundamental properties which determine their potentiality for optical applications. We calculate the carrier capture time for

classically unbound QWRs. We apply our calculations for T-shaped QWRs. We assume that the carriers are first injected in the two-dimensional (2D) continuum and rapidly relax to the 2D ground state (2D-GS). The carriers relax from the 2D-GS to the 1D states through optical phonon emission when energetically favorable or through acoustic phonon emission otherwise. The 2D-1D capture time oscillates with the sample parameters, showing strong resonances whenever the 2D-GS and the 1D level are separated by one optical phonon. Additional structures appear in the 2D-1D capture time as a consequence of the T-shaped quantum well effects on the 2D continuum. We discuss these effects for the different types of classically unbound QWRs and their influence in the optical properties of the systems. This Work is partially supported by CNPq (Brazil) and FAPESP (Brazil).

**Influence of the temperature and doping  
density on the electron-phonon intraband  
scattering in asymmetric modulation doped  
GaAs/AlGaAs quantum wells**

FANYAO QU, P. C. MORAIS  
*UnB*

Many of the very properties of a semiconductor quantum well structure are governed by the scattering of an electron by a phonon. Due to the interest in the development of high-field devices, the influence of the interaction between an electron and the acoustic as well as the LO-phonon modes on the properties of undoped quantum well structures have attracted much attention. However, there is little theoretical work about the electron-phonon scattering in asymmetric one-side modulation-doped quantum well (AMDQW) structures. This is probably due to the complexity of the phonon description and electron-phonon interaction theory resulting from the band bending and many body effects. The interesting aspect related to the modulation doped semiconductor structures is the possibility of continuously varying the two dimensional carrier density, from zero value at high excitation intensity up to the maximum value in dark condition. This is done by optically exciting the structure with a laser beam having energy above the band gap of the AlGaAs alloy. In the present work, the mobility and energy-loss rates of electrons in asymmetric one-side modulation-doped quantum well (AMDQW) at low temperature are theoretically investigated based on the electron-phonon interactions. By using an extended Fang-Howard wave function, the electron-phonon (acoustic phonon, bulk LO-phonon and confined LO-phonon) intrasubband scattering rates with a thermal distribution of electrons in the quantum well subbands has been calculated. Our results show that the electron temperature, doping density and different phonon modes scattering may dramatically affect

the mobility and energy-loss rates of electrons. The important scattering mechanisms, due to different phonon modes, at different electron temperature and doping density are discussed.

### RESONANT RAMAN SCATTERING IN Ge/Si QUANTUM WELLS

G. NARVAEZ, F. CERDEIRA, I. C. L. TORRIANI, J.  
A. BRUM  
UNICAMP  
J. C. BEAN  
AT&T Bell Laboratories

We performed electroreflectance (ER), resonant Raman scattering (RRS) and high resolution x-ray diffraction (HRXD) measurements in a series of Ge multiple quantum wells. Our samples PS- $n$  with  $n = 3, 4, 5$  and  $6$ , are Ge-single quantum wells (SQW) of  $n$ -monolayers (ML) in thickness, separated by thick (70ML) Si layers. The samples were grown pseudomorphically on (001) Si-substrates, by molecular beam epitaxy (MBE), and each  $\text{Ge}_n\text{Si}_M$  unit is repeated 25 times. The x-ray measurements reveal homogeneously strained Ge-layers and good repeatability of the  $n + M$  period. Numerical simulations are consistent with the presence of few alloy monolayer at the Si-Ge (Ge-Si) interface. The shape and evolution (with  $n$  and laser frequency) of the Raman spectra from those samples confirm these results. Comparing RRS and ER results, two main optical singularities are observed which can be unambiguously attributed to electronic transitions between electronic states confined in the Ge SQW. The one occurring at lower energies (between 2.4-2.5eV) shows a marked energy increasing as the thickness of the SQW decreases. The second transition occurs at higher energy and has a much larger oscillator strength. A simple envelope function calculation, which includes band non-parabolicities and grading at the interfaces, accounts quantitatively for these transitions attributing them to  $E_0$ -like Ge confined states. The higher transition is attributed to partially confined  $E_1$ -like states and no simple model reproduces their behavior. However, qualitative trends as  $n$  varies shall be discussed.

This work received financial support of CNPq and FAPESP

### Bloch Oscillations in aperiodic

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  finite superlattices  
DIÓGENES BOSQUETTI, EUCLYDES MAREGA JR  
DFCM - USP - São Carlos

Heterojunction aperiodic superlattices (ASL's) consist of quantum wells (QW's) and potential barriers which have no defined thickness, changing the number of mono-layers aleatory or obeying some specific rule. The difference of geometric parameters in wells and barriers produce a decoupling of eigen-states, which are restri-

ted along few wells and energy mini-bands not appear. If the system are free of impurities or external carriers injection, the creation of wave-packets are only obtained by optical excitation. This excitation are made by a femtoseconds laser pulse, which excite electrons of split-off valence band to conduction one. When scattering processes are not working or are negligible, this packet still Bragg reflected and performs a periodic oscillation in real and k-space, but now we must include in first Brillouin zone all of the system. In this work, Bloch oscillations and other dinamical properties are investigated in  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  finite ASL which wells and barrier thickness changes along the growth axis, following the increment of 3 mono-layers/well, keeping the barrier thickness fixed. This kind of building give us a like-Wannier-Stark ladder at zero electric field, where the ground-state lies at the largest well neighborhood. In this ASL, a static uniform electric field bends the conduction band-offset and couples the eigen-states. For a specific value (flat condition) all of states are scattered for all heterostructure, and the optical wave-packet can walk for all the system. Computationally, we use the Split-Operator method first in imaginary time to calculate the electronic and split-off states and after in real time picture to create and simulate the wave-packet propagation, obtaining expected values and correlation amplitude in function of time. This kind of system had received attention in recent years to allow construct optical modulators.

### Wannier-Stark Ladders in Disordered Superlattices

R. REY-GONZALEZ, P. A. SCHULZ  
Instituto de Física 'Gleb Wataghin', UNICAMP,  
13083-970, Campinas, SP Brazil

The research efforts devoted to heterostructures based on amorphous semiconductors have not yet established a clear picture of the related quantum size effects in this context. On the other hand, attempts to produce heterostructures of polymeric materials have been reported in the literature, opening a new branch in the field of low dimensional systems. Many bulk polymers are semiconductors having also tunable electronic properties, as a function of composition. This variation in composition induces disorder. One of the main interests in these materials is the fact that the disorder showing correlations leads to the appearance of mobility edges in the density of states. In this work we explore this correlated disorder effects to build an one dimensional model for disordered heterostructures, having mobility edges inherently included. We start with the study of the electronic structure of quantum wells, where the well material is a repulsive binary alloy, within a tight-binding framework. We find bona fide confined states in the energy range where the bulk material presents states with a localization length at least three times longer

than the quantum well width. These results due to the competition between localization length and quantum effects, are also verified in the transmission probability of these double barrier structures. We also extended the model to analyze the formation or not of minibands in finite superlattices when correlated or uncorrelated disordered quantum wells are coupled. In the last part of this work, the existence of Wannier-Stark quantization is analyzed for these disordered superlattices. The correlated disordered superlattices show clear signatures of this effect.

### Dynamical properties of wave-packets in quasi-periodic $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ finite superlattices

DIÓGENES BOSQUETTI, EUCLYDES MAREGA JR  
DFCM - USP - São Carlos

In recent years, new kinds of semiconductor heterostructures appeared, when the problem of the limit between crystalline and amorphous systems was attacked. These structures received the name "quasi-periodic" because the geometric parameters and the growth sequence are defined, but the systems didn't have a commensurable period. Some theoretical and experimental works showed that all of the systems have fractal properties in energy spectrum and transmission and carrier reflection coefficients in the heterostructure. All of these fractal behavior is strongly dependent of the growth sequence, and could be considered yours self characteristic. In this work the electronic structure of some particular different kinds of aperiodic undoped  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  superlattice was studied: Fibonacci ( $S_1=A, S_2=B, \dots, S_n=S_{n-1}S_{n-2}$ , where A and B is unit cells of growth, which will appears in all of superlattice and  $n=1,2, \dots$  is the number of the sequence), Thue-Morse ( $S_1=A, SS_1=B, \dots, S_n=S_{n-1}SS_{n-1}, SS_n=SS_{n-1}S_{n-1}$ ), Cantor ( $S_1=A, SS_1=B, \dots, S_n=S_{n-1}SS_{n-1}S_{n-1}, SS_n=SS_{n-1}SS_{n-1}SS_{n-1}$ ) and Doubling-Period ( $S_1=AB, S_2=ABAA, \dots, S_n=S_{n-1}S_{n-2}S_{n-2}$ ). All of these systems have the same wells and barriers thickness, Aluminium concentration "x", and "n" sequence number. In these quasi-periodic superlattices, a static uniform electric field are applied on the growth direction of the heterostructure and decouples the miniband states, appearing a Wannier-Stark ladders. For some electric value, an resonance of the two kinds of wells are expected and a delocalization condition will occur. We also compare dynamical properties (expected values, correlation amplitude), taking account the flat electric condition, using Split-Operator method in real and imaginary time on independent band approximation.

### THE HYDROSTATIC PRESSURE EFFECT ON THE OPTICAL PROPERTIES OF

### GaAs/AlGaAs (311)A AND (100) ORIENTED QUANTUM WELLS.

S. L. S. FREIRE, L. A. CURY, F. M. MATINAGA,  
M. V. B. MOREIRA, A. G. DE OLIVEIRA  
UFMG

It is already known that changes in the crystalline structure of the quantum well induced by external agents may put in evidence structural aspects which can be revealed e.g., by intensity variations in optical emissions. In this way, we investigate the optical properties of a quantum well grown on a (311)A and (100) substrates under hydrostatic pressure. At atmospheric pressure, it has been recognized that the optical efficiency of the (311)A QW is greater than the (100) QW because of much better interfaces. As we apply hydrostatic pressure, we see that the optical efficiency of the (311)A QW increases while the (100) sample shows a little decrease in its optical efficiency with increasing pressure. The mechanism to explain the increase of the optical efficiency under pressure in the (311)A QW sample is not fully understood. By the way, we claim that this could be related to the formation of 1D channels due to the existence of a corrugation pattern, observed by atomic force microscopy on the surface of our (311)A sample. The pressure effect would then reinforce the corrugated pattern decreasing slightly the periodicity, so leading to an enhancement of the optical efficiency for the (311)A quantum well line. This enhancement in the optical efficiency was usually observed in corrugated heterostructures and attributed to the suppression of non-radiative recombination due to the reduced diffusion of carriers along the corrugations, diminishing the scattering probability with non-radiative recombination centers. As we increase the pressure in both samples a blue shift in the QW lines due mainly to the increase of the gap is observed. These results can be interpreted taking into account effective mass approximation, considering the increase of the electronic mass, increase of the exciton binding energy and reduction of the well width with pressure.

### Shallow Impurity States in Semiconductor Fibonacci Superlattices: Selfsimilarity and Quasiperiodicity

ALEXYS BRUNO ALFONSO

*Instituto de Física "Gleb Wataghin", UNICAMP, Brasil*

A theoretical study of the shallow impurity states of GaAs-(Ga,Al)As quasiperiodic Fibonacci superlattices (FSL's) is presented. Calculations are carried out in the effective-mass band approximation and parabolic models for both the conduction and valence bands are used. The attention is devoted to the manifestations of the quasiperiodic and self-similar structural properties of these systems on the impurity binding energy behavior. The quasiperiodic behavior of energy levels

in these systems was already obtained and analyzed by Merlin et al. [1] before 1989, for the case of ground-shallow-impurity states. They calculated the binding energy of the electron to the impurity atom, for various positions of the latter in the FSL and using a one-dimensional tight-binding model. Trying to give a more realistic description of this problem where three-dimensional states are involved, in the present work we perform a calculation of the same binding energy following a variational approach, and obtain results comparable to those of Merlin et al [1]. In fact, we obtain the same qualitative Fibonacci-quasiperiodic behavior of the binding energy as a function of the impurity atom position, they obtained; but we give a more reliable explanation of how the underlying quasiperiodic structure of the FSL is reflected in the geometrical forms of the binding energy versus impurity position curves.

**Acknowledgments:** I am very grateful to the hospitality of the Department of Solid State of IFGW/UNICAMP where the present work has been developed, and also to FAPESP for financial support.

**Reference:**

R. Merlin, IEEE J. of Quantum Electronics, 24 (8), 1791 (1988) and references therein.

#### ALIGNMENT OF SELF-ORGANIZED MBE-GROWN QUANTUM DOTS.

A. A. QUIVY, J. R. LEITE

*Universidade de São Paulo, Instituto de Física,  
Laboratório de Novos Materiais Semicondutores, CP  
66318, 05315-970 São Paulo, Brazil*

Recently, it has been shown that quantum wires and dots could be fabricated in situ (inside a molecular beam epitaxy system, for instance), without the need of sophisticated nanolithography techniques. Using the self-organizing properties of strained epitaxial layers, small coherent islands can be created at the surface of the substrate when the critical thickness is slightly exceeded. However to allow any useful application for optical devices, the growth process of these nanostructures must be well understood in order to minimize and homogenize their size, and control their ordering at the surface.

In this work we are reporting on the influence of the In content and substrate orientation on the growth of strained InGaAs epitaxial layers. Nominal, 2°, 4° and 6° off (100) GaAs substrates were glued side by side on the same Mo block in order to allow any comparison. The size of the dots appeared to increase with decreasing In content. For low In content (smaller than 30%), the structures become longer and are roughly oriented along two perpendicular directions. For vicinal substrates, this phenomenon is much more pronounced and increases with misorientation. For 6° off substrates, the dots merge (without any apparent matter transfer) and form symmetrical entities with a "L" shape. This orde-

ring and alignment might

be due to the influence of the natural steps and misfit dislocations running through the surface. This process is much different from the usual growth on top of nominal substrates where the dot formation is random, and the dot size increases without any limit once it lost its coherence with respect to the substrate.

#### SHORT RANGE CORRELATION EFFECTS IN A QUASI-ONE-DIMENSIONAL POLARON GAS

PAULO CESAR MIRANDA MACHADO

*Universidade Federal de Goiás(UFG)*

FRANCISCO A. PINTO OSORIO, ANTONIO NEWTON  
BORGES

*Universidade Federal de Goiás and Universidade Católica  
de Goiás*

We investigate the short range correlation effects in a coupled plasmon-phonon excitations into a quantum-well wire by using the self-consistent-field approximation theory proposed by Singwi, Tosi, Land and Sjolander (STLS) and generalized by Antonio Newton Borges, Marcos Henrique Degani and Oscar Hipolito (Superlatt. Microstruct.,13, 1993.), which includes the multisubband model in quasi-one-dimensional systems. In this case we use a three subband model with only one populated. The confinement potential is considered as a square well of infinite height barrier. We compare our results for the dispersion curves of the coupled plasmon-phonon with the results obtained by L. Wendler, R. Haupt and R. Pechstedt (Phys. Rev. B43, 14.699 (1991); Surf. Sci., 263, 363 (1992)). by using the random-phase approximation (RPA). We observe that even for relatively high densities  $\rho = 1.64 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$ , we can not disregard the short range correlation effects in the study of the properties of GaAs quantum-well wires. We also compare our STLS results with and without the electron-optical-longitudinal-phonon interaction, and we observe significative differences. The shape of the curves for the inter and intra-subband structure factor and pair correlation function show an oscillatory behavior in the region where the one-dimensional wave vector is small. We also verify that decreasing the wire-width (and/or decreasing the electronic density) increases the local-field correction effects.

#### EFEITOS DE RUGOSIDADES NAS PROPRIEDADES ÓTICAS DE POÇOS QUÂNTICOS.

TÂNIA GLAUCIA DARGAM, BELITA KOILLER

*Universidade Federal do Rio de Janeiro*

Os progressos recentes em técnicas de fabricação de cristais têm permitido o crescimento de materiais semicondutores de diferentes composições atômicas com precisão ao nível de monocamadas. Com o advento de

técnicas mais sensíveis de microscopia, como *Scanning Tunneling Microscopy* (STM) e *Transmission Electron Microscopy* (TEM), pode-se determinar experimentalmente e com resolução atômica a composição química das interfaces entre diferentes tipos de materiais. Um problema interessante neste contexto são os efeitos de rugosidades de interfaces sobre as propriedades eletrônicas de materiais semicondutores.

Em nosso trabalho estudamos estruturas de poços quânticos do tipo AlAs/GaAs/AlAs com diferentes perfis de interface definidos por funções analíticas. Utilizamos um formalismo *tight-binding* de supercélulas no espaço real que leva em conta a posição de cada átomo. Isto permite descrever, em escala atômica, a desordem na região de interfaces. Estabelecemos correlações entre a morfologia das interfaces e as propriedades óticas das heteroestruturas estudadas. Especificamente analisamos os efeitos da amplitude da região rugosa, do comprimento de onda médio das oscilações e da rugosidade da interface, definida como  $\rho = \sqrt{\langle \sum_i (z_i - \langle z \rangle)^2 \rangle}$ . Nesta expressão,  $z_i$  é a posição do  $i$ -ésimo átomo da interface rugosa e  $z$  corresponde à posição média dos átomos da interface. Mostramos que o parâmetro  $\rho$  afeta significativamente as propriedades eletrônicas das referidas estruturas.

### BINDING ENERGIES AND OPTICAL PROPERTIES IN CYLINDRICAL QUANTUM WELL WIRES

SERVIO TULIO PÉREZ-MERCHANCAÑO  
UNICAMP - UFSCAR

In this work we calculated the binding energies of shallow acceptor impurities in finite cylindrical GaAs-(Ga, Al)As quantum-well wires as functions of the well radii and the impurity position using the effective-mass approximation and a variational procedure. We used a confinement potential well with the depth depending on the discontinuity gap between the quantum-well wire and the cladding. On the other hand, we calculate radiative recombinations processes in quantum-well wires, excited by a continuous-wave laser in a photoluminescence experiment under quasistationary excitation conditions, are calculated. We work too with the effective-mass approximation and the parabolic-band model for describing both electrons and holes, and consider, in the steady state, the interband absorption, and some radiative recombination mechanisms, such as recombination of electrons with free holes and with holes bound at acceptors, and carrier densities as functions of the laser intensity. Finally, we have considered the effects of traps and shallow acceptors on the continuous-wave steady-state photoluminescence of quantum-well wires at room temperature. The analysis is based on a quantum-mechanical calculation of the transition rates of radiative recombinations, and on a phenomenological treatment of the nonradiative recombination rates. We

have studied the laser-intensity dependence of recombination life times, of various recombination efficiencies and of the integrated photoluminescence intensity. In this work, we shown, that the binding energies increase when the radii of the quantum-well wire decrease tending to characteristic values of the bulk material, when the radii are small or big. Our results for the binding energies are in good agreement with other theoretical results in cylindrical quantum-well wires and rectangular cross-sectional area. For doped quantum-well wires, it is shown that the presence of acceptors substantially modifies the dependence of the above quantities on the laser intensity. Finally we demonstrate that trap and impurity effects are shown to be very important in a quantitative understanding of the steady-state photoluminescence of quantum-well wires.

### Photoluminescence characterization of porous silicon embedded with CdS, ZnSe and CdSe semiconductor compounds

ALEXANDER IVANOVICH BELOGOROKHOV, VLADIMIR ANDREEVICH KARAVANSKII, LUBOV IVANOVNA BELOGOROKHOVA

Moscow State University, Physics Department, Leninsky Gory, Moscow 119899, Russia, Fax: 7(095) 438-7664,  
E-mail: abelog@glas.apc.org

ROLF ENDERLEIN, JOSÉ ROBERTO LEITE, AMÉRICO TABATA

Universidade de São Paulo, 05389-970 São Paulo, São Paulo, Brazil, Fax (11) 818-6831

The formation of the ohmic contacts to a porous medium such as porous silicon (PS) is still a challenging problem. There is experimental evidence that this problem can be solved by embedding the PS with a II-VI compound semiconductor. Here we investigate photoluminescence (PL) properties of these new porous materials, together with the PL of pure PS. We also study the influence of changes in surface composition on the PL spectra of the PS samples. Despite extensive efforts, the nature of the visible PL from PS, whether due to the geometrical and quantum confinement in the Si crystallites, to surface states, or to various silicon compounds, is still intensely debated. In this work, an attempt is made to reveal the relationship between the porous silicon microstructure, PL properties and the surface chemical composition, especially the changes in hydrogen and oxygen termination of pores. The PS samples were made from a (100) and (111) oriented mirror-polished, p- and n-type silicon substrate, 0.01-12  $\omega$ .cm resistivity, with a thickness of 300  $\mu$ m. The samples were electrochemically etched in HF:C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH = 1:1 solution at a current density of 30 mA/cm<sup>2</sup>, followed by anodising for 5 min. All samples revealed intensive PL peak in the region of 1.7-1.9 eV. II-VI semiconductor compounds were embedded to porous area by a chemical deposition procedure. We compare the

PL spectra of the pure PS area of samples with those obtained from the embedded areas on the same wafer. The results are consistent with the stabilisation of the PL peak in the case of CdSe in spite of the different PL peaks positions of the pure PS. PL spectra were examined as functions of laser irradiation time and laser intensities. The temporal evolution shows a decreasing PL intensity in the higher energy region of the spectra. We attribute these results to both the laser induced oxidation and structural instabilities of nanocrystallites in PS with small sizes. In conclusion, we have carried out a comprehensive study of PL of PS films that were prepared on p- and n- type crystalline Si and embedded with II-VI semiconductor compounds by the chemical deposition method.

**STUDY OF POROUS SILICON EMBEDDED WITH II-VI SEMICONDUCTOR COMPOUNDS BY FOTOREFLECTANCE SPECTROSCOPY**

NILO MAURICIO SOTOMAYOR CHOQUE, JÚLIO ANTÔNIO NIERI DE TOLEDO SOARES, ROLF ENDERLEIN, JOSÉ ROBERTO LEITE

*Universidade de São Paulo, 05389-970 São Paulo, São Paulo Brazil, Fax: (11) 818-6831*

ALEXANDER IVANOVICH BELOGOROKHOV, LUBOV IVANOVNA BELOGOROKHOVA

*Moscow State University, Physics Department, Leninsky Gory, Moscow 1199899, Russia, fax: 7(095) 438-7664, E-mail: abelog@glas.apc.org*

Among the various models proposed to explain the origin of photoluminescence (PL), the quantum confinement model (QCM) based on the confinement of charge carriers in the Si nano-crystallites together with the surface states associated with them, has been found to be the most successful one in explaining the majority of the experimental observations. However, there are still problems with this model. Experimentally, it has been shown that the optical excitation spectrum of porous silicon (PS) samples has a pronounced threshold at 3 eV. While the QCM predicts a threshold at the PL peak position. In this paper we use photoreflectance (PR) measurements to clarify this problem. In spite of the demonstrated utility of modulation spectroscopy in studying semiconductor microstructures, relatively little work has been done on porous systems. The derivative nature of modulation spectroscopy makes it possible to observe the band edge features at room and liquid nitrogen temperatures. The PR measurements have been performed using a standard set-up with Ar Laser (488 nm) as the pump beam, an halogen tungsten filament lamp as the probe beam. The spectra were taken at room and liquid nitrogen temperatures. Our experimental PR spectra show pronounced peaks

at and above 1.3 eV. We conclude that these are due to direct, rather than indirect, transitions. Direct transitions at 1.3-1.7 eV is possibly because of zone folded band structure of PS. PR spectra also have been taken from samples of PS embedded in ZnSe, CdSe and CdS compound semiconductor. These spectra slightly differ from the spectra of pure PS. The difference can be understood in terms of surface effects. Such transitions and the geometrical-potential confinement of the excited-hole pairs are responsible for the strong red PL in PS.

**CONTROLE DA DISTÂNCIA ELÉTRON-BURACO EM UM POÇO QUÂNTICO COM DOPAGEM ASSIMÉTRICA.**

FLÁVIO O. PLENTZ FILHO

*Universidade Federal de Minas Gerais*

DONALD HEIMAN

*Massachusetts Institute of Technology*

ARON PINCZUK, LOREN N. PFEIFFER, KEN W. WEST

*Lucent Technologies*

Poços quânticos contendo um gás de elétrons formam um sistema adequado para investigar-se, por meio de fotoluminescência (PL), efeitos de muitos corpos em duas dimensões. Um bom exemplo tem sido o efeito Hall quântico fracionário (FQHE). Neste caso, uma das características óticas mais marcantes é a presença de um dubleto na PL para fatores de preenchimento  $\nu < 1$ . De acordo com as teorias sobre recombinação radiativa no regime do FQHE, torna-se vital estabelecer um controle sobre a separação elétron-buraco de modo a investigar-se a origem desta interessante estrutura no espectro de PL. Neste trabalho mostramos como implementar este controle através do uso de portas metálicas depositadas nas superfícies frontal e traseira de uma amostra contendo um poço quântico dopado assimetricamente. Uma porta frontal semi-transparente é utilizada para controlar-se a densidade do gás de elétrons ao mesmo que, pelo uso de uma porta traseira, controla-se o campo elétrico interno no poço quântico. Descreveremos o método com detalhes, apresentando resultados de PL e PL resolvida no tempo para vários valores de densidades e campos elétricos. Mostraremos como o valor do campo elétrico interno pode ser obtido a partir dos dados e de um cálculo auto-consistente simples, e como a distância elétron-buraco pode ser estimada.

[1] F. Plentz, D. Heiman, A. Pinczuk, L.N. Pfeiffer e K.W. West, Solid State Communications, Vol. 101, 103 (1997).

## SEMICONDUCTORES (Dopagem Planar, Estrutura Eletrônica, Superfícies e Interfaces)

### SEMICONDUCTORES (Dopagem Planar e Tunelamento Resonante) – 13/06/97

#### RECOMBINAÇÃO RADIATIVA INTERBANDA EM SUPER-REDES DE GaAs COM DOPAGEM DELTA DE Si

MARIA JOSÉ VALENZUELA BELL  
*Universidade Estadual de Campinas*

DIONE FAGUNDES DE SOUSA, VIRGÍLIO DE CARVALHO DOS ANJOS, LUIS ANTÔNIO DE OLIVEIRA NUNES

*DFI- Espectroscopia de Sólidos - IFSC - USP*

Em super-redes de GaAs com dopagem delta de Si, os elétrons cedidos pelos átomos de Si permanecem próximos à camada positiva devido à atração eletrostática, formando um gás de elétrons quase bidimensional (2D). Como consequência, o movimento eletrônico ao longo da direção de crescimento  $z$  é quantizado e as bandas de energia desdobram-se em subbandas quase bidimensionais. Como o potencial efetivo é atrativo para elétrons, torna-se repulsivo para buracos, de tal forma que ambos ficam separados espacialmente. À medida em que o período da super-rede aumenta, coexistem na banda de condução elétrons com funções de onda localizadas próximo às camadas de dopantes (2D) e com funções de onda estendidas por toda a super-rede (3D). Dois tipos de transições interbanda podem ocorrer: diretas (banda a banda) e indiretas (elétrons 2D e buracos fotogerados). Neste trabalho serão apresentados os resultados de medidas de fotoluminescência (PL) e PL resolvida no tempo em super-rede com dopagem delta de Si e período 500 Å, dopagem planar de  $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , com o objetivo de determinar as transições interbanda diretas e indiretas. O cálculo da estrutura eletrônica revelou a existência de três subbandas ocupadas, duas com funções de onda localizadas ( $E_0$  e  $E_1$ ) e uma com funções de onda estendidas ( $E_2$ ). Transições indiretas entre  $E_0$  e  $E_1$  e a banda de buracos pesados (hh) seriam esperadas, porém não foi possível detectá-las via PL, devido à pequena superposição das funções de onda entre elétrons e buracos. A realização de medidas de PL resolvida no tempo nos permitiu detectar essas transições, pois espectros de PL com pequeno atraso no tempo em relação ao pulso de excitação favorecem as transições indiretas. As posições em energia dessas transições mostraram bom acordo com os valo-

res teóricos. Os tempos de recombinação radiativa são da ordem de 0.5 ns.

#### RESISTANCE RESONANCE EFFECT IN THE PHOTOCONDUCTIVITY OF Si PLANAR-DOPED GaAs/AlGaAs HETEROSTRUCTURES

MÁRIO S. C. MAZZONI, HÉLIO CHACHAM, ALFREDO G. DE OLIVEIRA  
*UFMG*

ALEXANDRE T. G. DE CARVALHO  
*Universidade Federal de Viçosa*

Epitaxial techniques such as MBE and CBE permit the growth of heterostructures with parallel conduction channels separated by a few nanometers. If the electron mobilities of these channels are different, it is possible to observe a resistance resonance effect<sup>1</sup> by applying an electric field perpendicular to the plane of the conduction channels. This effect is characterized by a resistivity enhancement caused by the delocalization of the electron wavefunction among the channels. In this work, we report an anomaly in the persistent photoconductivity of MBE-grown GaAs/AlGaAs heterostructures with a Si planar-doped layer at the AlGaAs side, near the interface. The anomaly is characterized by a minimum in the photoconductivity as a function of the light dosage. We show, based on self-consistent calculations in the effective mass approximation, that the minimum in the photoconductivity originates from a resistance resonance effect between the electron channel at the interface and the electron channel at the planar-doped region. The tuning of the resonance effect is provided by the internal electric field caused by the optically induced ionization of the DX centers at the planar-doped region. We also perform calculations for the resistivity of the samples as a function of the electron Hall density (for a cumulative light dosage) with a four-parameter model that uses the self-consistent wavefunctions as input. The model permits a quantitative fit to the experiment and indicates that the existence of a minimum in the photoconductivity depends not only on the resistance resonance effect, but also on the mobility ratio among the sub-bands. 1) Phys. Rev. Letts. 65, 1929 (1990).

**ESPALHAMENTO RAMAN EM  
SUPER-REDES DE GaAs COM DOPAGEM  
DELTA DE Si VIA MECANISMO DE  
FLUTUAÇÕES DE DENSIDADE DE  
CARGA**

VIRGÍLIO DE CARVALHO DOS ANJOS, LIDÉRIO  
IORIATTI  
FFI - IFSC - USP

Apresentamos uma teoria de espalhamento inelástico de luz via mecanismo de flutuações de densidade de carga em sistemas eletrônicos não uniformes em condições de extrema ressonância. A seção de choque de espalhamento é expressa como a parte imaginária de uma função resposta constituída por dois termos: o primeiro de excitações de partícula independente e o segundo de excitações coletivas. Deste modo, é elucidado de forma inequívoca a presença, em condições de extrema ressonância, de excitações de partícula independente que de outra forma seriam blindadas pelas interações elétron-elétron. O efeito do campo de depolarização e de correlação e troca, assim como efeitos da constante dielétrica dependente da frequência são incluídos. Especificamente, usamos como sistema eletrônico não uniforme, o gás quasi-bidimensional de uma super-rede de GaAs delta dopada com Si. As suas características são: período de 500 Å, dopagem planar de  $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  e distribuição gaussiana de dopantes com largura a meia altura (FWHM) de 50 Å. Este tipo de super-rede é interessante devido ao fato de coexistirem um gás de elétrons bi e tridimensional. A estrutura eletrônica foi calculada auto-consistentemente na temperatura de 0K, usando a teoria do funcional densidade. Cálculos numéricos para os espectros polarizados foram feitos na geometria de retro-espalhamento, com energia da radiação incidente em ressonância com o gap  $E_0 + \Delta_0$  do GaAs. Propomos ainda uma função espectral para o amortecimento das excitações, onde se levou em conta o fato de que a corrente local deve ser conservada. O cálculo da seção de choque mostra uma forte dependência das formas de linha com a frequência de excitação óptica. Os resultados obtidos estão em boa concordância com dados obtidos experimentalmente.

**TUNNELING PROPERTIES OF  
TWO-LEVEL SYSTEMS DRIVEN BY  
DC-AC FIELDS**

HAO WANG, XIAN-GENG ZHAO  
*Institute of theoretical physics, Academia Sinica, P. O.  
Box 2735, Beijing 100080, China*  
VALDER NOGUEIRA FREIRE  
*Universidade Federal do Ceará*

The phenomenon of tunneling is investigated for a two-level system driven by dc-ac electric fields. The analysis is based on a numerical treatment of the spectrum of its quasienergies in the Floquet formalism, and the pro-

bability for electron occupied its initially empty state. The quasienergy spectrum as a function of the driven field frequency  $\omega$  is obtained. The avoided crossing points which leads to the complete coherent tunneling take place in the vicinity of the ac-field resonant points. This feature is manifested through calculating the maxima of probability for electron occupied the initially empty state as a function of driving frequency  $\omega$ . The evolution probability for the electron in the initially occupied state is also studied in the vicinity of avoided crossing points. The complete coherent tunneling and localization features of electron emerged in the system are addressed. The maxima of probability for electron occupied the initially empty state in the vicinity of avoided crossing points as a function of the splitting parameter  $\Delta$  and driving frequency  $\omega$  shows that the smaller the splitting parameter  $\Delta$ , the sharper the spikes. The maxima of probability for electron occupied the initially empty state in the vicinity of avoided crossing points as a function of ac-driving strength  $b$  and frequency  $\omega$  shows that the weaker the ac-field strengths  $b$ , the sharper the spikes. From these results, the physical property of the system is found to be controlled by the field parameters.

**DYNAMIC INSTABILITIES IN RESONANT  
TUNNELING INDUCED BY A MAGNETIC  
FIELD**

ENRIQUE V. ANDA  
*Departamento de Física - PUC-Rio*  
P. ORELLANA  
*Universidad de Santiago de Chile*  
F. CLARO  
*Facultad de Física - Pontificia Universidad Catolica de  
Chile*

We study the time dependent electrical mesoscopic current circulating along a double barrier heterostructure under the effect of an external applied potential and a magnetic field parallel to the current. The electron-electron interaction is incorporated in the system using the Hartree approximation. The dynamics is obtained by numerically solving the time dependent Schroedinger equation using a well established algorithm which guarantees numerical stability and convergence with the adequate border conditions. The statistical mechanics of the system is solved supposing the device to be connected to two particle reservoirs characterized by two Fermi energies with a difference in energy equal to the external applied potential. The addition of the magnetic field induces self-sustained intrinsic current oscillations enhanced by the asymmetry of the double barrier structure. The oscillations are attributed to the nonlinear dynamics produced by the e-e interaction, coupling the current to the charge trapped in the well and the simultaneous effect of the external magnetic field over the local density of states across the system

narrowing the energy region of occupied states. The oscillations appears when the system is in the vicinity of the resonant condition. The oscillation itself is driven by the forces associated to the process through which the system enters and goes out from the resonance at each cycle. Our results show the fact that the current bifurcates as the field increases and may transit to chaos at large enough fields. The stationary solution possesses regions of the parameter with clear chaotic behaviour.

### Interface Roughness effects in double barrier structures

Y. GALVÃO GOBATO  
UFSC

A. L. C. TRIQUES, P. A. SCHULZ  
UNICAMP

Photoluminescence spectroscopy is a sensitive and effective technique for characterizing electronic and optical properties of resonant tunneling structures based on compound semiconductors. In the present work, we have used photoluminescence spectroscopy to investigate interface roughness effects in GaAs/In<sub>0.1</sub>Ga<sub>0.9</sub>As/AlAs double barrier tunneling structures. The effects of roughness upon tunneling are expected to be important when the deviation in thickness is a sizable fraction of tunneling barrier, electron wavelength or quantum well width. We have measure photoluminescence (PL) spectra as function of applied bias, photoexcitation intensity and temperature. We have observed a very strong PL from GaAs contact at 1.52 eV and an extra photoluminescence line near 1.59 eV which is related to the fundamental E1HH1 transition in the mid-well. Both PL and PLE profiles reveals a double peak structure for this fundamental transition due to a well width variation of one monolayer, suggesting island formation in the structure. The intensity and linewidth of these QW lines are correlated to tunnel current at low photoexcitation intensity. The temperature dependence of these lines shows that transfer of carriers between these islands can be tuned with applied bias. We do not observe significant transfer of carriers between islands under high photoexcitation intensity, since both islands are almost equally populated by electrons. We have observed a saturation of PL intensity for the lowest energy peak under high photoexcitation intensity. In this case, the radiative recombination of holes becomes dominant and the PL intensity will be independent of electron density. Finally, the present results lead to the quest of resolving island growth effects on the I(V) characteristics in the limit of low microroughness at the interfaces.

### EFEITOS INTERFACIAIS NO TUNELAMENTO RESSONANTE EM POÇOS QUÂNTICOS

#### DUPLOS/BARREIRAS TRIPLAS

MARIA CONSUELO ALVES LIMA

UFMA

GIL DE AQUINO FARIAS, VALDER NOGUEIRA FREIRE  
UFC

Considerável atenção tem sido dado ao estudo de estruturas de barreiras triplas/poços quânticos duplos (DQW-TB) tendo em vista as possíveis aplicações de dispositivos eletrônicos e optoeletrônicos baseados nestas heteroestruturas. Atualmente o diodo tunel de DQW-TB tem sido bastante investigado. Estudos mostram que ele apresenta melhor desempenho que o diodo baseado em poços quântico simples/barreiras duplas. Entretanto, o papel das interfaces sobre as propriedades de DQW-TB não foram consideradas até agora, embora elas possam influenciar o desempenho dos dispositivos, como é previsto por resultados experimentais [1] que estimam larguras de interfaces de pelo menos duas células unitárias GaAs para estruturas de múltiplas barreiras e poços quânticos GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. O comportamento característico de estruturas DQW-TB devido o acoplamento entre estados quase ligados entre os poços quânticos é sensível a largura das interfaces. O propósito deste trabalho é apresentar resultados teóricos sobre o papel das interfaces nas propriedades de transmissão de elétrons através de heteroestruturas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As DQW-TB, considerando perfil interfacial linear para fração molar de alumínio, o potencial interfacial e massa efetiva de elétrons. Os resultados são obtidos para poços e barreiras de 100 Å de largura e interfaces com zero, dois e quatro unidades da célula GaAs. Eles mostram que a existência de interfaces muda a ressonância de tunelamento para energias mais baixa e é responsável por significativa redução na separação entre picos ressonantes. Esses efeitos crescem com a largura da interface e a ordem de ressonância. Quando o campo elétrico de 50 kV/cm é aplicado para DQW-TB GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As, larguras interfaciais da ordem de 10 Å pode mudar a primeira ressonância cerca de 16 meV.

[1] A. Ourmazd, D.W.Taylor, J.Cunningham, C.W.Tu, Phys. Rev. Lett. **26**, 933 (1989); O.Albrektsen, D.J.Arent, H.P.Meier, and H.W.M.Salemink, Appl. Phys. Lett. **57**, 31 (1990).

## SEMICONDUCTORES (Dispositivos)

### SEMICONDUCTORES (Dispositivos) – 13/06/97

#### TRANSISTOR TIPO FET DO POLÍMERO POLI(O-METOXIANILINA)

ROBERTO KOJI ONMORI  
*Escola Politécnica da USP*

LUIS HENRIQUE C. MATTOSO  
*Embrapa/CNPDia*

ROBERTO MENDONÇA FARIA  
*Instituto de Física de São Carlos - USP*

Os materiais plásticos - polímeros orgânicos sintéticos - são os mais recentes aplicados à indústria de transformação e bens de consumo. Por sua versatilidade oriunda de suas propriedades mecânicas, facilidade de processamento e baixos custos em diversas aplicações, surgiu uma nova linha de pesquisa conhecida como Polímeros Condutores. Decorrente dessa pesquisa usamos o polímero poli(o-metoxianilina), conhecida como POMA, na fabricação de dispositivos eletro-eletrônicos. Como resultado foi construído um transistor de efeito de campo onde o material condutor é a POMA dopada com ácido clorídrico. O dispositivo foi construído sobre uma lâmina de silício tipo p, onde é aplicada a tensão de porta  $V_G$ , com uma camada de óxido de silício de 70 nm de espessura, eletrodos de ouro com formato de pente espaçados de 10, 20 e 30  $\mu\text{m}$ , servindo de dreno e fonte, coberta com uma camada de POMA dopada com espessura de 20 nm. A característica elétrica  $I_D \times V_D$  desse dispositivo é semelhante ao de um transistor tipo FET convencional. Foi proposto um modelo teórico baseado em contatos Schottky e lacunas como portadores de condução para explicar o seu comportamento elétrico para tensões  $V_G \downarrow 0$  (aumento  $I_D$ ) e  $V_G \uparrow 0$  (diminuição de  $I_D$ ), ajustando-se perfeitamente às curvas experimentais. Foi observado ainda que o polímero é fotosensível e usando o mesmo dispositivo sob iluminação controlada na faixa de luz visível, podemos observar um aumento na corrente elétrica proporcional à sua intensidade. O modelo teórico proposto também explica esse tipo de comportamento.

#### SIMULAÇÃO DE TRANSPORTE DE CARGA EM BULK GaAs E EM TRANSISTORES TIPO MESFET NA PRESENÇA DE CAMPO MAGNÉTICO PELO MÉTODO DE MONTE CARLO

ROBERTO RICARDO PANEPUCCI  
*Instituto de Física Gleb Wataghin, UNICAMP - LPD/DFA*  
MOHAMED ARAFA, UMBERTO RAVAIOLI  
*Univ. of Illinois at Urbana-Champaign*

O estudo de transporte eletrônico em campos altos fora da região linear de operação onde a lei de Ohm perde a validade é extremamente complicado. A equação de Boltzmann (integro-diferencial) não oferece soluções analíticas para casos relevantes. A solução numérica é necessária para obter um quadro detalhado da importância relativa dos diversos mecanismos microscópicos envolvidos. O método de Monte Carlo foi utilizado para simular o transporte de elétrons em GaAs na presença de um campo magnético normal ao campo elétrico aplicado. Os processos microscópicos responsáveis pela condutividade do material foram investigados inicialmente para "bulk" GaAs. O método foi aplicado a uma estrutura tipo MESFET (transistor de efeito de campo com porta metálica sobre semicondutor) em GaAs com solução autoconsistente da equação de Poisson para o potencial eletrostático gerado pelos contatos e pela distribuição de carga dos portadores. Para a simulação da dinâmica dos portadores carregados dentro do cristal foram incluídos mecanismos de espalhamento por fônon polar óptico, fônon acústico, espalhamento inter-vale  $\Gamma - L$  e  $\Gamma - X$  e espalhamento entre vales equivalentes. O método de auto-espalhamento foi utilizado para acelerar o cálculo. O método de Monte Carlo para simulação de transporte de cargas será apresentado para o bulk e para aplicação em dispositivos. O efeito da introdução do campo magnético na densidade de estados ocupados e nas taxas de espalhamento será apresentado.

#### THERMAL CHARACTERISATION OF TELECOMMUNICATION LASER-DIODES BY PHOTOTHERMAL MICROSCOPY

LUIS CARLOS OGANDO DACAL, ANTONIO MANOEL  
MANSANARES  
*IFGW - UNICAMP*  
RICARDO BENETTON MARTINS, ANTONIO DE  
CAMPOS SACHS  
*CPqD - Telebrás*

The thermal processes in semiconductor laser diodes have an important role in their performance. The device heating can decrease the output power and/or create dark regions (without laser emission). A better knowledge of these processes is required to improve the device quality. In this work the Photothermal Reflectance Microscopy was used to investigate telecommunication laser-diodes produced by CPqD-Telebrás. These lasers are InGaAs SQW lasers operating at 980 nm, with GaAlAs or GaInP cladding layers, based on GaAs substrate, and using a ridge waveguiding structure. The laser facets were coated with  $\lambda/4$   $\text{Al}_2\text{O}_3$  and  $\lambda/4$   $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Si}$  layers to provide anti-reflection and maximum reflectance.

tion mirrors (front and rear facet, respectively). The devices were soldered junction-side up or junction-side down on the heat sink. The temperature distribution was determined on the laser facet, as well as on the electric contact (on the ridge) in the case of junction-side up soldered devices. In the last case, measurements were made both near the facet and in the middle of the cavity. Experimental results show a higher temperature distribution near the facet. Comparing these results with the calculated temperature for the specific geometry allows to establish the relationship between the bulk and surface losses. From the calculated temperature we conclude also that the  $Al_2O_3$  layer does not play a significant role in the temperature distribution. On the other hand, experimental results obtained on the facet show the important role of the cladding layers on the laser temperature. Measurements performed under the same injection current level, but under different output power levels, show clearly the influence of the laser light in the heating process of the device. The surface absorbcency was found to be much higher than that of  $Al_2O_3$ , indicating that the main heating mechanism is the surface crystal absorption of the emitted laser light.

#### Micro Fabrication Process of a Micro-Hot-Plate Thermal Gas Sensor.

CYRO KETZER SAUL

*Instituto de Física - UFRGS*

JAY N. ZEMEL

*Electrical Engineering - University of Pennsylvania*

In this work we present the process developed to obtain a solid-state microfabricated gas sensor, based on a hot-plate structure. The sensor is composed by a p-n diode that works as a thermometer and a resistor that works

as a heater integrated over a Silicon [100] bridge membrane  $7\ \mu\text{m}$  thick. The active area of the sensor is ( $260 \times 260\ \mu\text{m}$ ) and a thermal mass of  $1.17\ \mu\text{gr}$ , that allows the detection of very small temperature changes on the active surface. The process developed includes most of the basic steps of micro fabrication, like crystallographic etch, used to create the silicon (Si) membrane were the sensors were to be integrated. Lithographic contact process using both infrared and visible light mask alignment to define the areas for doping, etching and for the patterning of the metallic layers. LPCVD (Low Pressure Chemical Vapor Deposition) deposition of silicon nitride ( $Si_xN_y$ ) to provide electrical insulation between the diode and the resistor. E-beam evaporation of metals like Palladium (Pd) for the resistor fabrication or gold for the electrical contact pads of the resistor and of the diode. Plasma etch, of Silicon and Silicon Nitride, with  $SF_6$  to open the contacts of the diode through the Nitride Layer, for the front side openings of the membrane through the silicon and for the final thickness definition of the membrane. In the process of patterning the metallic layers two techniques were used and compared, first we used chemical etch patterning of both resistor and contact pads, then we made the patterning using lift-off, that showed better results and made the process simpler. The sensor obtained can measure a temperature variation of  $1.5\ \text{m}^\circ\text{C}$ , with a resolution of  $50\ \mu^\circ\text{C}$ , for a square pulse of  $0.6\ \mu\text{W}$  applied to the resistor. It can also detect the difference in the thermal conductivity of  $N_2$  ( $0.0002612\ \text{W/cm}^\circ\text{C}$ ) and  $O_2$  ( $0.0002664\ \text{W/cm}^\circ\text{C}$ ) that is of 2% with the resistor heated around  $1^\circ\text{C}$  above the room temperature.

## SISTEMAS COMPLEXOS: POLÍMEROS E FLUÍDOS (Fluidos: Caracterização)

**SISTEMAS COMPLEXOS:  
POLÍMEROS E FLUÍDOS  
(Fluidos: Caracterização, Fluidos  
Magnéticos e Soluções) —  
11/06/97**

### Medidas condutimétricas e protométricas em fluidos magnéticos iônicos

W. C. MENDONÇA, A. FABIANO, F. A. TOURINHO,  
P. C. MORAIS  
*UnB*

A estabilidade coloidal de um fluido magnético iônico, em presença de um forte gradiente de campo magnético, é um requisito essencial para sua utilização em aplicações diversas e para o estudo de suas propriedades físicas e físico-químicas fundamentais. A estabilidade coloidal pode ser garantida quando controlado o equilíbrio entre as forças atrativas partícula-partícula (dipolo magnético e Van der Waals) e a força eletrostática repulsiva devido à presença de carga superficial. A interação eletrostática repulsiva é deliberadamente introduzida através de equilíbrios do tipo ácido-base (modelo iônico). Contrariamente aos colóides convencionais, a presença de interações magnéticas intensificadas pela presença de um campo magnético externo necessita de um controle rígido da densidade superficial de carga elétrica, que induz a repulsão eletrostática partícula-partícula. Por outro lado, a compreensão de muitas propriedades químicas e físico-químicas dos fluidos magnéticos iônicos requer o estabelecimento de um diagrama de fases, envolvendo um modelo coloidal conveniente, com a descrição detalhada da interface óxido-água superficial. No presente trabalho, apresentamos uma descrição mais detalhada da superfície de nanopartículas de ferritas do tipo espinélio em água, usando um modelo de transferência de carga através da dupla camada elétrica. Medidas de protometria e condutimetria foram conduzidas em amostras ácidas, básicas e neutras fornecendo a atividade de íons  $H^+$  livres e de íons  $H^+$  fixados na superfície das partículas. Estes dados, ajustados a um modelo teórico baseado na transferência de cargas através da camada de água ligada na superfície da partícula, nos permitiu determinar a densidade superficial de carga elétrica nas partículas, bem como precisar detalhes dos equilíbrios envolvidos.

### Caracterização de nanopartículas de ferrita de zinco por ressonância magnética

G. R. R. GONÇALVES, P. C. MORAIS, F. A.  
TOURINHO  
*UnB*  
F. PELEGRINI  
*UFGo*

Os fluidos magnéticos são produzidos através da dispersão de partículas magnéticas de dimensões nanométricas em um fluido carreador, na forma de sistemas ultra estáveis, isto é, sistemas onde não ocorre a separação de fases sob ação de agentes tais como temperatura, força iônica, gravidade e campo magnético. As nanopartículas magnéticas em suspensão nos fluidos magnéticos são atualmente produzidas por síntese química, processo mais eficiente e versátil que o processo de moagem. A síntese de nanopartículas de zinco ( $ZnFe_2O_4$ ) e sua utilização para produção de fluidos magnéticos iônicos foi anunciada recentemente. Por outro lado, a técnica de ressonância magnética foi recentemente utilizada para estudar o comportamento da anisotropia magnetocristalina de nanopartículas magnéticas de ferritas de manganês e níquel dispersas na forma de um fluido magnético iônico. A anisotropia magnetocristalina das nanopartículas é de fundamental importância para a caracterização do fluido magnético. Do ponto de vista prático, o valor da anisotropia é fundamental em projetos de dispositivos. Do ponto de vista fundamental a constante de anisotropia pode refletir o tipo de orientação dos momentos magnéticos na superfície da partícula. Com concentrações da ordem de  $10^{16}$  partículas por centímetro cúbico determina-se a anisotropia magnetocristalina efetiva da partícula magnética, ou seja, efeitos de interação partícula-partícula podem ser desprezados. Neste trabalho utilizamos a técnica de ressonância magnética, com campo externo não nulo e em frequências de 9GHz, para determinar a anisotropia de nanopartículas de  $ZnFe_2O_4$ . Na determinação da anisotropia a amostra deve ser inicialmente congelada a campo externo não nulo, em geral de cerca de 1 Tesla. Medidas de variação angular são então realizadas para se determinar o valor da anisotropia a cada temperatura. O comportamento da anisotropia magnética efetiva em função da temperatura é então comparado com o comportamento do material bulk, resultando na dependência com a temperatura da anisotropia de superfície.

### Medida do expoente crítico do parâmetro de ordem em cristais líquidos liotrópicos

LEILA THOMAZELLI THIEGHI, ANTÔNIO MARTINS FIGUEIREDO NETO, SUHAILA MALUF SHIBLI  
*Instituto de Física da Universidade de São Paulo*  
 PIERRE TOLÉDANO

*University of Picardie, Amiens, França*

Investigamos o comportamento do expoente crítico do parâmetro de ordem ao longo do diagrama de fases de uma mistura liotrópica de laurato de potássio/decanol/água, estabelecendo primeiramente o diagrama de fases e identificando as diferentes fases nemáticas através de microscopia óptica de luz polarizada. As amostras utilizadas são confeccionadas por técnicas convencionais de preparação de liotrópicos, sendo dopadas com ferrofluidos de base aquosa e colocadas em porta-amostras para a realização das medidas de birrefringência óptica em função da temperatura. As amostras são colocadas em um dispositivo que oferece um controle de temperatura (com precisão de 5mK), posicionadas em um microscópio Leitz (orthoplan pol), sendo as medidas de diferença de caminho óptico realizadas através de um compensador de Berek. Como a birrefringência óptica  $\Delta n$  é proporcional ao parâmetro de ordem, sua medida em função da temperatura nas vizinhanças da transição de fase uniaxial-biaxial permite a determinação do expoente crítico. Os dados de  $\Delta n$  versus temperatura são ajustados pelo método dos mínimos quadrados e testados por meio do *chi-quadrado*, a fim de verificarmos a significância dos mesmos. Determinamos o expoente crítico do parâmetro de ordem para diferentes misturas, variando a posição destas no diagrama de fases. O expoente crítico variou de aproximadamente 0,35 na região próxima ao ponto de Landau e, na medida em que nos afastamos deste ponto, o valor do expoente aumentou para aproximadamente 0,55. Os liotrópicos são constituídos por micelas cuja anisotropia varia com a concentração dos componentes na mistura e também com a temperatura, fato este que impõe modificações na definição atual do parâmetro de ordem, sendo necessária a introdução de um parâmetro de ordem *não crítico*. Nossos resultados mostram que o valor do expoente crítico do parâmetro de ordem depende da localização da mistura em estudo no diagrama de fases, colocando em questão a universalidade dos expoentes críticos.

### Investigação do comportamento tipo vidro-de-spin em fluidos magnéticos de

*NiFe - 2O-4* congelados a campo externo nulo  
 P. C. MORAIS, C. B. TEIXEIRA K. SKEFF NETO, F. A. TOURINHO  
*UnB*

Fluidos magnéticos são suspensões coloidais estáveis constituídas de nanopartículas, monodomínios magnéticos, dispersas numa matriz dielétrica. A in-

teração magnética dipolar partícula-partícula tende a promover a aglomeração das partículas, efeito que deve ser compensado por processos de estabilização do sistema. Em particular, os fluidos magnéticos iônicos são estabilizados em meio aquoso por repulsão eletrostática devido à presença de uma densidade de carga elétrica adicionada à superfície das partículas magnéticas. Medidas de magnetização realizadas em amostras congeladas em presença e em ausência de campo magnético revelam características bastante diferenciadas. Para amostras congeladas com campo aplicado a magnetização decresce monotonicamente com o aumento da temperatura. Entretanto, para amostras congeladas na ausência de campo magnético externo a curva de magnetização versus temperatura apresenta um comportamento muito parecido com o de um sistema do tipo vidro-de-spin, isto é apresenta um ponto de máximo a uma temperatura característica. Apesar de muito interessante este comportamento magnético tem sido investigado apenas superficialmente. Neste trabalho investigamos o comportamento magnético de um fluido magnético iônico à base de  $\text{NiFe}_2\text{O}_4$ , congelado a 4K na ausência de campo externo. O comportamento da magnetização em função da temperatura é investigado para vários valores de campo externo aplicado, na faixa de 4K a 40K, para campos aplicados variando entre 100 Gauss a 5 Kgauss. Foram investigadas amostras com diferentes concentrações de partículas magnéticas, na faixa entre  $10^{16}\text{cm}^{-3}$  a  $10^{17}\text{cm}^{-3}$ . O comportamento do sistema modifica-se sensivelmente entre o domínio de concentrações onde a interação partícula-partícula pode ser desprezada para o domínio de concentrações onde a interação partícula-partícula é significativa.

### Caracterização de fluidos magnéticos biocompatíveis citratados através de medidas de ressonância magnética

M. C. F. L. LARA, M. H. SOUSA, P. C. MORAIS,  
 F. A. TOURINHO  
*UnB*

A técnica de ressonância magnética, na região de alguns gigahertz, tem sido utilizada com bastante sucesso na caracterização de fluidos magnéticos iônicos, quer seja utilizando a partícula magnética como centro ressonante, quer seja introduzindo uma sonda paramagnética adequada como dopante na fase aquosa. As medidas de ressonância têm fornecido informações fundamentais sobre o comportamento dos fluidos magnéticos, a exemplo das interações partícula-partícula em fluidos de moderada concentração, do processo de carga-descarga elétrica da superfície da partícula induzido por variações da força iônica do meio aquoso, da polidispersidade das partículas, e do comportamento da anisotropia magnética em função da temperatura e do diâmetro médio das partículas. Contrariamente ao que ocorre nos fluidos magnéticos tra-

dicionais, onde as partículas magnéticas são estabilizadas somente em meios ácidos ou básicos, nos fluidos biocompatíveis a quimiossorção de agentes quelantes, dos tipos alfa -aminoácidos e diácidos, possibilita a obtenção de suspensões estáveis em meios biológicos. No presente trabalho a técnica de ressonância magnética é utilizada no estudo das propriedades de um fluido magnético biocompatível citratado. Medidas de ressonância magnética em função da força iônica temperatura e concentração das partículas nos permitiu elaborar um modelo físico-químico simplificado capaz de contribuir para a elucidação dos mecanismos de quelação e peptização das partículas. Do ponto de vista de aplicações biológicas, a proposição de um modelo para os mecanismos de quelação e peptização das partículas representa um passo essencial no estabelecimento de estratégias de elaboração de fluidos magnéticos biocompatíveis com quelantes mais complexos (ácidos dimercaptosuccínicos) além de permitir uma melhor compreensão das interações partícula-quelante-anticorpo-antígeno-célula.

#### Influência da carga superficial sobre a reorientação de spins na superfície de nanopartículas magnéticas

A. F. BAKUZIS, P. C. MORAIS, F. A. TOURINHO  
*UnB*

Os fluidos magnéticos surfactados, iônicos e biocompatíveis são sistemas constituídos de nanopartículas, monodomínios magnéticos, dispersas num fluido dielétrico. A estabilidade dessa suspensão, frente à aglomeração, pode ser conseguida por dois mecanismos básicos; impedimento estérico como no caso dos fluidos surfactados e repulsão eletrostática como no caso dos fluidos iônicos. No caso dos fluidos magnéticos biocompatíveis a estabilidade, frente à aglomeração, é conseguida pela combinação dos dois mecanismos, ou seja, impedimento estérico e repulsão eletrostática. O problema da reorientação dos spins na superfície da partícula magnética, entre uma configuração radial e tangencial tem sido abordado recentemente. Em particular, no caso dos fluidos magnéticos iônicos, a presença de uma densidade de carga superficial negativa ou positiva, relacionada respectivamente aos fluidos magnéticos básicos e ácidos, pode influenciar o processo de reorientação dos spins na superfície. O presente trabalho tem o objetivo de investigar o processo de reorientação de spins na superfície das partículas em função da natureza das cargas superficiais e da sua densidade. A natureza das cargas superficiais é modificada a partir de alteração da faixa de pH do meio aquoso. A densidade de carga superficial é alterada através da modificação da força iônica do meio

aquoso. Resultados preliminares, decorrentes de medidas de ressonância magnética e de simulação numérica, indicam que existe um diâmetro crítico para o aparecimento da reorientação da magnetização superficial, este dependendo das características elétricas da superfície da partícula. As medidas de ressonância magnética são utilizadas para obtenção da anisotropia magnetocristalina efetiva e envolvem medidas de variação angular a diferentes temperaturas. A anisotropia de superfície é obtida quando a anisotropia efetiva é comparada à anisotropia do material bulk. O processo de reorientação superficial dos momentos magnéticos é obtido a partir da dependência da anisotropia superficial com a temperatura.

#### Análise da forma de linha de ressonância em fluidos magnéticos iônicos dopados

G. J. DA SILVA, P. C. MORAIS, F. A. TOURINHO  
*UnB*

Fluidos magnéticos iônicos são dispersões coloidais estáveis de nanopartículas magnéticas com larga aplicação industrial. A estabilidade coloidal é necessária para prevenir o aglomeramento das partículas devido às interações de dipolo magnético partícula-partícula. A estabilidade coloidal é alcançada adicionando-se às partículas uma densidade superficial de carga elétrica. Em solução aquosa a presença da densidade superficial de cargas cria uma camada de solvatação em torno da partícula magnética. Experimentos de ressonância magnética em fluidos magnéticos iônicos dopados com um centro paramagnético conhecido, a exemplo o íon  $\text{Cu}^{2+}$ , tem mostrado que a técnica é adequada para a caracterização de fluidos magnéticos com elevada anisotropia magnetocristalina. Particularmente na Banda-X, onde os fluidos magnéticos de elevada anisotropia magnética não apresentam um sinal típico de ressonância, o processo de dopagem permite que se tenha informações dos parâmetros da polidispersidade, usando-se uma distribuição do tipo log-normal, da anisotropia magnetocristalina e da distância média entre as nanopartículas. As análises dos espectros de ressonância são feitas estudando-se a forma de linha do íon sonda. Em situações onde o processo de dopagem interfere de maneira significativa na força iônica da amostra a forma de linha observada muda drasticamente tornando-se bastante assimétrica. Neste trabalho estamos apresentando um modelo para a forma de linha de ressonância de um fluido magnético inico à base de  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$ , dopado com  $\text{Cu}^{2+}$ , em experimentos de variação angular a baixas temperaturas. Os ajustes para as formas de linha do dopante ( $\text{Cu}^{2+}$ ) permitem obter o valor da anisotropia magnetocristalina das partículas e o desvio do campo de ressonância, em termos do arranjo espacial das partículas e da interação dipolar.

### Constante de anisotropia superficial em nanopartículas magnéticas de ferrita de níquel.

J. F. SAENGER, P. C. MORAIS, F. A. TOURINHO  
*UnB*

Recentemente foi sintetizado o fluido magnético iônico à base de partículas nanométricas de ferrita de níquel. A caracterização desse material vem sendo feita pela determinação da constante de anisotropia magnetocristalina das nanopartículas magnéticas. Nesse trabalho utilizamos uma amostra de fluido magnético formada por partículas de diâmetro médio em torno de 10,3 nm e concentração da ordem de 1,5 partículas/cm<sup>3</sup>. Partículas com dimensões dessa ordem são monodomínios magnéticos. Utilizando a técnica de ressonância magnética é possível obter a anisotropia magnética dessas nanopartículas, uma vez que para a concentração trabalhada os efeitos de interação partícula-partícula podem ser desconsiderados. O método experimental consiste em congelar a amostra na presença de um campo magnético externo elevado (em torno de 15 Kgauss) de forma a orientar os momentos magnéticos das partículas, definindo assim o eixo de anisotropia da amostra. A partir da determinação do campo de ressonância magnética para diferentes valores de ângulo entre o campo externo aplicado e o eixo de magnetização da amostra é possível obter o valor da anisotropia efetiva da nanopartícula magnética. Obtivemos a anisotropia magnética efetiva ( $K_{EFF}$ ) da partícula para diferentes temperaturas, entre 100K-250K. Comparando esses resultados com os resultados da anisotropia magnética para uma amostra bulk monocristalina de ferrita de níquel, podemos encontrar como a anisotropia superficial ( $K_S$ ) das nanopartículas varia com a temperatura. Nossos resultados mostram uma mudança de sinal da anisotropia de superfície a uma temperatura da ordem de 125K. A inversão do sinal de  $K_S$  representa uma mudança na orientação dos spins na superfície da partícula; para  $K_S > 0$  os spins estão orientados tangentes à superfície e para  $K_S < 0$  os spins estão orientados radialmente.

### Caracterização do fluido magnético iônico à base de ferrita de cobre

A. R. PEREIRA, P. C. MORAIS, F. A. TOURINHO  
*UnB*  
F. PELEGRINI  
*UFGO*

O processo de síntese química de nanopartículas de ferrita do tipo espinélio foi utilizado recentemente para a preparação do fluido magnético iônico à base de ferrita de cobre ( $CuFe_2O_4$ ). Os fluidos magnéticos são produzidos através da dispersão de partículas magnéticas de dimensões nanométricas em um fluido carreador, for-

mando sistemas ultrá-estáveis, ou seja, sistemas onde não ocorre nem a aglomeração das partículas nem a separação de fases sob ação de agentes tais como temperatura, força iônica, gravidade e campo magnético, dentro de certos limites de tolerância. A técnica de ressonância magnética têm sido utilizada com bastante sucesso na caracterização de propriedades físicas e físico-químicas de fluidos magnéticos. A caracterização magnética das nanopartículas é fundamental para as aplicações em projetos de dispositivos. Uma das propriedades mais importantes dos materiais magnéticos é traduzida pelo valor e pelo sinal da anisotropia magnética. Recentemente, a técnica de ressonância magnética foi utilizada para estudar o comportamento da anisotropia magnetocristalina de nanopartículas magnéticas de ferritas de manganês e de ferritas de níquel dispersas na forma de um fluido magnético iônico. A anisotropia magnetocristalina pode dar informações valiosas a respeito da orientação dos momentos magnéticos na superfície da partícula. Valores positivos da anisotropia de superfície tem sido associado à orientações perpendiculares à superfície e valores negativos tem sido associados à orientações tangenciais à superfície. No presente trabalho amostras de fluidos magnéticos à base de ferrita de cobre, com concentrações da ordem de 10<sup>16</sup> partículas por centímetro cúbico, foram utilizadas para estudar o comportamento da anisotropia em função da temperatura. As amostras de fluido magnético são congeladas em presença de um campo magnético externo de cerca de 1 Tesla, e os espectros de ressonância magnética foram obtidos com frequências de cerca de 9 GHz. Medidas de variação angular são utilizadas na obtenção da anisotropia magnetocristalina efetiva e de superfície.

### Modelo de Ising para fluidos magnéticos

A. F. BAKUZIS, P. C. MORAIS  
*UnB*

Fluidos magnéticos são sistemas constituídos de nanopartículas, monodomínios magnéticos, dispersas numa matriz dielétrica. Os monodomínios magnéticos mantêm sua identidade no fluido dispersante utilizando-se estratégias de estabilização da suspensão e que pode ser conseguida por duas vias distintas. Uma delas é obtida recobrando-se a superfície das partículas com espécies surfactantes e a outra é adicionando-se carga elétrica à superfície das partículas. Os surfactantes são ligados quimicamente à superfície das partículas e a densidade de carga elétrica é adicionada através de um controle do equilíbrio tipo ácido-base envolvendo a interface meio aquoso-superfície da partícula. Do ponto de vista das propriedades magnéticas o sistema pode ser tratado como sendo cons-

tituido por uma rede contendo sítios magnéticos caracterizados por um macrospin ( $S \gg 1$ ). Tais redes podem ser obtidas na prática por resfriamento de fluidos magnéticos iônicos a temperaturas abaixo do ponto de congelamento da água. A distância entre um macrospin e seus primeiros vizinhos pode ser modelada dentro de uma faixa bastante ampla, permitindo regimes tanto de interação dipolar forte partícula-partícula como de ausência de interação magnética partícula-partícula. Os resultados experimentais disponíveis na literatura apontam para a existência destes dois regimes com propriedades bastantes distintas. Neste trabalho, as propriedades magnéticas de um fluido magnético é comparada às propriedades magnéticas de um sistema de Ising no limite de macrospins. O formalismo é desenvolvido usando-se uma identidade de Callen apropriada. Resultados preliminares para as propriedades termodinâmicas do sistema são apresentados em função do parâmetro concentração do fluido magnético, isto é, da distância partícula-partícula magnética e em função da temperatura.

#### Síntese de fluidos magnéticos biocompatíveis citratados

M. H. SOUSA, T. A. P. G. COTTA, O. O. S. CAMPOS, F. A. TOURINHO, P. C. MORAIS  
*UnB*

No modelo de um fluido magnético iônico tradicional, as nanopartículas ferrimagnéticas podem ser peptizadas somente em meios ácidos ou básicos. Esta estratégia é a utilizada para adicionar uma densidade de carga elétrica superficial e assim promover a repulsão eletrostática partícula-partícula. Contudo, a possibilidade da quimiossorção de agentes quelantes dos tipos alfa-aminoácidos e diácidos, na superfície das partículas, muda totalmente este perfil, possibilitando a obtenção de suspensões estáveis em meios biológicos. A importância desta nova abordagem de síntese e estabilização decorre do fato de que, muito recentemente, tem sido propostos modelos de fluidos magnéticos biocompatíveis como vetores, que podem ser manipulados e monitorados magneticamente, dentro de biosistemas "in vitro" e "in vivo"; havendo mesmo citações de seu emprego em diagnóstico e terapias médicas por imagem de ressonância, no tratamento oncológico. Apresentamos aqui, resultados preliminares sobre a estratégia de síntese de fluidos magnéticos biocompatíveis baseados na incorporação superficial de citratos. O processo de síntese proposto envolve duas etapas básicas. Numa primeira etapa, o precursor ácido foi sintetizado utilizando métodos hidrotérmicos baseado no modelo convencional de fluidos magnéticos iônicos. Numa segunda etapa, foi feita a quelação do produto com ácido cítrico, sendo as partículas peptizadas em pH neutro. Neste

trabalho será discutida a utilização de um modelo físico-químico para os mecanismos de quelação e peptização das partículas magnéticas. O objetivo do modelo é o de estabelecer as bases de uma estratégia de elaboração de fluidos magnéticos biocompatíveis com a utilização de quelantes mais complexos, a exemplo dos ácidos dimercaptosuccínicos, bem como compreender as interações partícula-quelante-anticorpo-antígeno-célula.

#### COLLINEAR MIRAGE EFFECT MEASUREMENT OF THE THERMAL DIFFUSIVITY IN FERRONEMATICS

AMARILDES LORENZO LÔPO DANTAS, DEREK WALTON, SUHAILA MALUF SHIBLI

*Instituto de Física, Universidade de São Paulo-São Paulo, Caixa Postal 66.318, CEP 05315-970, São Paulo, SP, Brasil*

Mirage effect method is a well known established way of detecting thermal waves generated in a sample by a modulated laser beam. In this work we have used the collinear mirage method for performing thermal diffusivity measurements at some liquids, the so-called complex fluids. This specific geometry was chosen by being more indicated for measuring highly transparent samples, such as liquid crystals. To determine a ferronematic's thermal diffusivity we have first obtained a series of values for the strength of the signal as a function of frequency for water and then repeated the series at identical frequencies for the analysed material. The samples of liquid crystals doped with ferrofluids are incapsulated inside a cuvette and were aligned by a permanent magnet of for both orientations, parallel and perpendicular to the sidewalls. The measurements were performed at room temperature, so the phase analysed was the calamitic nematic one. The experimental setup used is composed by two He-Ne lasers with powers of 20 mW, for the excitation beam, and 0.95 mW, for the probe beam. The magnitude of the beam deflection was measured by a position sensitive detector and its amplitude and phase measured by a lock-in amplifier. The frequency of the pump beam was modulated by a mechanical optical chopper, which was varied from 4 to 400 Hz. A study of the relation of this thermal properties in ferronematics as a function of different quantities of ferrofluid have shown that as the ferrofluid concentration increases the thermal diffusivity goes from  $1.55 \times 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{s}$  to  $1.40 \times 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{s}$  for the parallel orientation, and from  $1.40 \times 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{s}$  to  $1.10 \times 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{s}$  for the perpendicular one. Thus, we verified that the variation of the results is lower at the parallel case and decrease in both cases.

## INVESTIGAÇÃO DA FASE ESMÉTICA QUIRAL ESPONTÂNEA DE UM CRISTAL LÍQUIDO FERROELÉTRICO

JOSÉ NOBORU MAKI

*Departamento de Física, Universidade Estadual de  
Maringá, CEP 87020-900, Maringá, PR*

PIERRE TOLEDANO

*Laboratoire de Physique de la Matière Condensée  
Université de Picardie, Amiens, França*

ANTONIO M. FIGUEIREDO NETO

*Instituto de Física, Universidade de São Paulo-São Paulo,  
Caixa Postal 66.318, CEP 05315-970, São Paulo, SP,  
Brasil*

A possibilidade de obter em uma fase de cristal líquido uma polarização macroscópica ferroelétrica na ausência de campo elétrico externo será discutida teoricamente. Para isto estamos investigando uma proposta para densidade de energia livre:

$$F_h^{(1)}(\xi, P_t, P_z, \varphi) = a_1 \xi^2 + a_2 \xi^4 + (1/2\chi_{11}^0) P_t^2 + \\ b_1 P_t^4 - c_1 \xi P_t \sin \varphi + c_2 \xi^2 P_t^2 \sin^2 \varphi \\ - d_1 P_z \xi P_t \cos \varphi + K_{11}^0 P_z^2,$$

e

$$F_i^{(1)}(\xi, P_t, P_a, \varphi) = \lambda \xi^2 \partial \varphi_1 / \partial z + K_3 \xi^2 (\partial \varphi_1 / \partial z)^2 \\ - \mu (\xi P_t \sin \varphi (\partial \varphi_1 / \partial z))$$

onde temos que minimizar  $F^{(1)} = F_h^{(1)} + F_i^{(1)}$ , primeiramente com respeito a  $P_z$ . Introduzimos então o valor de equilíbrio de  $P_z$  em  $F$  e logo a seguir minimizamos com respeito a  $\varphi$ . Obtemos duas soluções estáveis,  $\varphi = +\pi/2$  e  $-\pi/2$ . Introduzimos os valores de  $\varphi$  e  $P_z$  de equilíbrio em  $\partial F / \partial P_t = 0$ , minimizado com respeito a  $P_t$ . Consideremos dois casos: primeiro, começaremos em uma aproximação linear em  $P_t \propto \xi$ . A seguir, discutiremos os casos não lineares, isto é,  $P_t \neq \text{Cte } \xi$ . Finalmente, introduzimos  $P_t$  de equilíbrio em  $\partial F / \partial \xi = 0$  e encontraremos  $\xi$  na fase  $\text{SmC}^*$  e em  $\text{SmC}_p^*$ . Dependendo dos sinais dos coeficientes, encontramos dois casos: (a)  $\text{SmA}^*$ , que tendo transição de segunda ordem, a  $\text{Tc}_1$ , se transforma em  $\text{SmC}^*$ . Esta também de segunda ordem, a  $\text{Tc}_2$ , transita para  $\text{SmC}_p^*$ . (b)  $\text{SmA}^*$  de segunda ordem transita de  $\text{Tc}_1$  para  $\text{SmC}^*$  e esta é uma transição de primeira ordem de  $\text{Tc}_2$  para  $\text{SmC}_p^*$ . (a) e (b) podem ser distingüidas como se segue: (a) limite da linha de estabilidade dada pela  $\partial^2 F / \partial \xi^2 = 0$  coincide com  $\text{Tc}_2$ ; (b) limite de linha de estabilidade não coincide com  $\text{Tc}_2$ .

Vamos então estender o problema aos casos mais gerais, introduzindo termos de ordem superiores, isto é,  $F^{(2)} = F^{(1)} + a_3 \xi^6$ ,  $F^{(3)} = F^{(2)} + b_2 P_t^6$ , mantendo a  $F_i^{(1)}$ . Em suma, a energia livre proposta neste trabalho prevê a existência de uma fase esmética  $C_p^*$  na qual o vetor

densidade de polarização possui uma componente não nula ao longo do eixo  $z$ .

## DINÂMICA DE FLUIDOS EM DUTOS RUGOSOS

ADRIANO MESQUITA ALENCAR, JOSÉ SOARES DE  
ANDRADE JÚNIOR, MURILO PEREIRA DE ALMEIDA,  
JOSUÉ MENDES FILHO  
*Departamento de Física - UFC*

Neste trabalho, o efeito da rugosidade sobre a dinâmica de fluidos em dutos bidimensionais é investigado. As equações de continuidade e Navier-Stokes

$$\rho \left[ u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right] = - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left[ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right],$$

$$\rho \left[ u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right] = - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left[ \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right],$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0,$$

são resolvidas numericamente empregando-se o método de diferenças finitas em volume de controle. A parede rugosa destes dutos é simulada utilizando-se algoritmos computacionais específicos (por exemplo, deposição balística com relaxação) para a geração de interfaces auto-afins onde o coeficiente de rugosidade  $\alpha$  pode ser controlado. Em condições isotérmicas, no estado estacionário e considerando as propriedades físicas do fluido constantes (densidade e viscosidade), verificamos que a distribuição de energia cinética no sistema obedece uma lei de escala que persiste por mais de quatro ordens de magnitude. Isto se deve fundamentalmente à presença de regiões "estagnantes" na interface sólido - fluido. Nas proximidades desta interface, lâminas de fluido com velocidades cada vez mais baixas tendem a capturar mais detalhes da superfície auto-afim. Em poços mais profundos observa-se também que o transporte de quantidade de movimento se dá na forma de hierarquias de vórtices com energias significativamente diferentes. Além do mais, para um valor de  $\alpha$  arbitrariamente determinado, observa-se que a contribuição de efeitos inerciais (convecção) sobre o escoamento de um fluido através do duto rugoso pode modificar consideravelmente o transporte de quantidade de movimento, e conseqüentemente, os campos de velocidade e pressão a ele associados. Como resultado, verifica-se que há uma influência significativa do número de Reynolds e do coeficiente de rugosidade sobre a permeabilidade global do meio.

## ESTUDO DA FRAÇÃO DE OCUPAÇÃO DE SÍTIOS TETRAÉDRICOS E OCTAÉDRICOS EM NANOPARTÍCULAS DE $MnFe_2O_4$ .

MAURÍCIO BRAGA DE ARAÚJO, FERNANDO PELEGRINI

UFG

ÁLVARO LUIZ TRONCONI, FRANCISCO A. TOURINHO

UnB

Nanopartículas de ferrita de manganês ( $MnFe_2O_4$ ), são produzidas por síntese química, processo mais eficiente e menos oneroso do que o processamento mecânico de moagem. Fluidos magnéticos têm sido produzidos pela dispersão coloidal de nanopartículas sintéticas de maghemita, ferrita de manganês, cobalto, cobre, zinco e outras. A estrutura cristalina da ferrita de manganês corresponde à estrutura tipo espinélio. Apesar de vários estudos realizados sobre a estrutura espinélica da ferrita, ainda não é bem conhecido qual o processo e/ou condição de síntese que determinam se o tipo de estrutura formada é tipo espinélio direta, inversa ou mista. Normalmente na célula unitária de ferrita de manganês, os oito cátions  $Mn^{2+}$  ocupam oito sítios octaédricos enquanto que os dezesseis cátions  $Fe^{3+}$  ocupam oito sítios octaédricos e oito sítios tetraédricos. Entretanto, em partículas nanométricas sintetizadas quimicamente, pode haver uma alteração na distribuição dos cátions  $Fe^{3+}$  entre os sítios tetraédricos e octaédricos, sensível às características das partículas, como por exemplo seu diâmetro. Ajuste teórico de espectros de Mossbauer obtidos à temperatura de hélio líquido, sugere a ocupação de um único sítio para o íon de manganês. Estudo à temperatura ambiente na banda-g de frequência, através da técnica de ressonância paramagnética eletrônica, em amostras de concentração de  $1,20 \times 10^{16}$  partículas/cm<sup>3</sup> com diâmetro médio de 100 Angstroms, evidenciou a ocupação dos sítios octaédricos e tetraédricos pelos íons de  $Fe^{3+}$  e a ocupação de somente um dos sítios pelo íon de  $Mn^{2+}$ . A análise dos resultados obtidos permitiu a determinação dos fatores-g do íon de  $Fe^{3+}$  em ambos os sítios e do íon de  $Mn^{2+}$ , em um único sítio, resultados estes que diferem do valor único para o fator-g generalizado previsto pela teoria de ressonância ferrimagnética.

## INVESTIGAÇÃO DO COMPORTAMENTO TIPO VIDRO-DE-SPIN EM FLUIDOS MAGNÉTICOS DE $NiFe_2O_4$ CONGELADOS A CAMPO EXTERNO NULO

P. C. MORAIS, C. B. TEIXEIRA K. SKEFF NETO, F. A. TOURINHO

UnB

Fluidos magnéticos são suspensões coloidais estáveis constituídas de nanopartículas, monodomínios magnéticos, dispersas numa matriz dielétrica. A interação magnética dipolar partícula-partícula tende a

promover a aglomeração das partículas, efeito que deve ser compensado por processos de estabilização do sistema. Em particular, os fluidos magnéticos iônicos são estabilizados em meio aquoso por repulsão eletrostática devido à presença de uma densidade de carga elétrica adicionada à superfície das partículas magnéticas. Medidas de magnetização realizadas em amostras congeladas em presença e em ausência de campo magnético revelam características bastante diferenciadas. Para amostras congeladas com campo aplicado a magnetização decresce monotonicamente com o aumento da temperatura. Entretanto, para amostras congeladas na ausência de campo magnético externo a curva de magnetização versus temperatura apresenta um comportamento muito parecido com o de um sistema do tipo vidro-de-spin, isto é apresenta um ponto de máximo a uma temperatura característica. Apesar de muito interessante este comportamento magnético tem sido investigado apenas superficialmente. Neste trabalho investigamos o comportamento magnético de um fluido magnético iônico à base de  $NiFe_2O_4$ , congelado a 4K na ausência de campo externo. O comportamento da magnetização em função da temperatura é investigado para vários valores de campo externo aplicado, na faixa de 4K a 40K, para campos aplicados variando entre 100 Gauss a 5 Kgauss. Foram investigadas amostras com diferentes concentrações de partículas magnéticas, na faixa entre  $10^{16}$  cm<sup>-3</sup> a  $10^{17}$  cm<sup>-3</sup>. O comportamento do sistema modifica-se sensivelmente entre o domínio de concentrações onde a interação partícula-partícula pode ser desprezada para o domínio de concentrações onde a interação partícula-partícula é significativa.

## Investigação do processo de formação de cadeias em fluidos magnéticos iônicos à base de $MnFe_2O_4$ por medidas de birrefringência

A. F. BAKUZIS, P. C. MORAIS, K. S. NETO, R. A. DA SILVA, M. H. SOUSA, F. A. TOURINHO

UnB

Fluidos magnéticos são sistemas constituídos de partículas magnéticas de dimensões mesoscópicas dispersas num fluido carreador. As condições para a produção de uma suspensão coloidal estável são, primeiro que as partículas têm de ser pequenas o suficiente para permanecerem suspensas no líquido portador através da agitação térmica, esta por sua vez deve ter maior importância do que a interação atrativa de longo alcance, para evitar aglomeração de partículas e segundo suas partículas devem possuir uma repulsão de curto alcance que previna a aglomeração devido a interação de Van der Waals. Estes materiais apresentam inúmeras aplicações tecnológicas decorrentes de propriedades físicas básicas a exemplo da resposta a campo magnético aplicado. Inúmeras propriedades são sensíveis à dimensão física da partícula tais como magnetização de saturação e temperatura de re-

orientação da magnetização superficial. Do ponto de vista ótico os fluidos magnéticos são fortemente anisotrópicos ou seja apresentam valores elevados de birrefringência magnética. Este trabalho apresenta um estudo da birrefringência Magnética efeito (Cotton-Mouton) estática em amostras de fluidos magnéticos iônicos à base de  $MnFe_2O_4$ . No fluido magnético surfactado, a aglomeração é impedida através de uma cadeia polimérica apolar que não permite a aproximação entre as partículas enquanto que no fluido magnético iônico a aglomeração é impedida através da repulsão eletrostática, onde a carga em torno da partículas pode ser positiva, quando dispersas num meio ácido ou negativa quando o meio é básico. A birrefringência magnética é investigada, à temperatura ambiente em amostras contendo partículas de diâmetros na faixa de 5 nm a 10 nm. A influência de formação de cadeias sobre o sinal da birrefringência é avaliada através de medidas em função da concentração de partículas para valores entre  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  a  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ .

#### ELECTRICAL FLUCTUATIONS AND THE POLARIZABILITY OF ROD-LIKE POLYELECTROLYTE SOLUTIONS

JOSÉ ANTONIO FORNÉS

UFG

We apply the method developed in this meeting previous poster to determine the natural electrical thermal fluctuations and its spectral distribution across two points of a solution of charged cylinders in a (z-z) symmetrical electrolyte. we considered two classes of fluctuations: a) Fluctuations parallel to the rod axis and b) Fluctuations perpendicular to it. Correspondingly we have two relaxation times  $\eta_{\parallel}$  and  $\tau_{\perp}$ . We considered a rigid rod-like molecule or particle of radius  $a$ , length  $L \gg a$ , so that end effects may be neglected, with charge  $Q$  distributed uniformly over the surface with an electrical surface potential  $\psi_0$  immersed in a solution of puntual ions. There were perform exact calculations for the fluctuations by numerical integration of the PB equation, although for the case of low potentials, Debye-Hückel approximation, (linearized Poisson-Boltzmann equation) are developed formulas easy to compute. Among the results is the diminution of electrical fluctuations as particle radii increase; as a consequence, large particles produce electrical stabilization in their neighborhood. It can also be observed that fluctuations are not quite sensitive to ionic concentrations for large particles. The two polarizabilities spectra corresponding to the two classes of fluctuations are estimated by a novel method using the Fluctuation Dissipation Theorem and a model which consider any fixed charge on the poly-ion and its neighbourhood ions as a capacitor and a resistor in serie, defining in this way a local impedance. Finally formulas are developed for the dielectric spectra  $\epsilon'(\omega)$  and  $\epsilon''(\omega)$  and compared with experimental data for DNA solutions.

#### ESTUDO DO COMPORTAMENTO DA LINHA DE RESSONÂNCIA DE UM FLUIDO COMPLEXO EM FUNÇÃO DE SEU VOLUME E CONCENTRAÇÃO.

MAURÍCIO BRAGA DE ARAÚJO, FERNANDO

PELEGRINI

UFG

ÁLVARO LUIZ TRONCONI, F. A. TOURINHO

UnB

Nanopartículas de ferrita de manganês ( $MnFe_2O_4$ ), em um fluido à base de água, quimicamente sintetizadas, têm sido objeto de intensos estudos para aplicações em diversas áreas do conhecimento humano, sendo ultimamente preparadas para estudos em ambientes biológicos. A técnica de ressonância magnética foi utilizada para estudar os efeitos de concentração de grãos e volume da amostra nas interações magnéticas interpartículas do ferrofluido. As medidas foram feitas num espectrômetro Bruker ESP 300 com campo magnético máximo de 16.500 Gauss utilizando uma ponte de micro-ondas de banda-x de frequência operando na faixa de 9,0 a 10,0 GHz. Numa segunda fase do trabalho, utilizou-se uma ponte de micro-ondas de banda-q de frequência operando na faixa de 33,0 a 34,0 GHz. Experimentos realizados à temperatura ambiente, na banda-x de frequência de micro-ondas, mostram a relação entre a variação da largura de linha com o volume da amostra. Uma outra relação foi obtida, também à temperatura ambiente, entre a variação da largura de linha e a concentração de grãos da amostra. As concentrações do conjunto de amostras analisadas variavam de  $1,2 \times 10^{16}$  a  $6,2 \times 10^{16}$  grãos/cm<sup>3</sup>. Foi observada, através da mesma técnica, a variação da largura de linha em função da potência de micro-ondas incidente sobre amostras de concentrações variadas. Na banda-q de frequência de micro-ondas a relação entre o deslocamento do campo de ressonância magnética em função da concentração da amostra é obtida. A análise dos resultados é feita considerando estudos realizados anteriormente, onde uma abordagem baseada na teoria dos segundos momentos de Van Vleck foi utilizada na interpretação dos espectros de absorção magnética obtidos.

#### ESTUDO DA FRAÇÃO DE OCUPAÇÃO DE SÍTIOS TETRAÉDRICOS E OCTAÉDRICOS EM NANOPARTÍCULAS DE $MnFe_2O_4$ .

MAURÍCIO BRAGA DE ARAÚJO, FERNANDO

PELEGRINI

UFG

ÁLVARO LUIZ TRONCONI, FRANCISCO A. TOURINHO

UnB

Nanopartículas de ferrita de manganês ( $MnFe_2O_4$ ) são produzidas por síntese química, processo mais eficiente e menos oneroso que o processo mecânico de moagem.

Fluidos magnéticos têm sido produzidos pela dispersão coloidal de nanopartículas sintéticas de maghemita, ferrita de manganês, cobalto, cobre, zinco e outras. A estrutura cristalina da ferrita de manganês corresponde à estrutura tipo espinélio. Apesar de vários estudos realizados sobre a estrutura espinélica da ferrita, ainda não é bem conhecido qual o processo e/ou condições de síntese que determinam se o tipo de estrutura formada é espinélio direta, inversa ou mista. Normalmente na célula unitária de ferrita de manganês, os oito cátions  $Mn^{2+}$  ocupam oito sítios octaédricos enquanto que os dezesseis cátions  $Fe^{3+}$  ocupam oito sítios octaédricos e oito sítios tetraédricos. Entretanto, em partículas nanométricas sintetizadas quimicamente, pode haver uma alteração na distribuição dos cátions  $Fe^{3+}$  entre os sítios tetraédricos e octaédricos, sensível às características das partículas, como por exemplo seu diâmetro. Ajuste teórico de espectros de Mossbauer obtidos à temperatura de hélio líquido, sugere a ocupação de um único sítio para o íon de manganês. Estudo à temperatura ambiente na banda-q de frequência, através da técnica de ressonância paramagnética eletrônica, em amostras de concentração de  $1,20 \times 10^{16}$  partículas/cm<sup>3</sup> com diâmetro médio de 100 Angstroms, evidenciou a ocupação dos sítios octaédricos e tetraédricos pelos íons de  $Fe^{3+}$  e a ocupação de somente um dos sítios pelo íon de  $Mn^{2+}$ . A análise dos resultados obtidos permitiu a determinação dos fatores-g do íon de  $Fe^{3+}$  em ambos os sítios e do íon de  $Mn^{2+}$ , em um único sítio, resultados estes que diferem do valor único para o fator-g generalizado previsto pela teoria de ressonância ferrimagnética.

#### SPATIAL ENCODING IN MULTI-LEVEL QUADRUPOLEAR SYSTEMS.

R. H. ACOSTA, H. R. ROBERT, D. J. PUSIOL

*Facultad de Matemática, Astronomía y Física, Universidad Nacional de Córdoba- 5000-Ciudad Universitaria. Argentina.*

It has been demonstrated that unidimensional projections of quadrupolar nuclei density can be obtained by encoding the spatial information by means of radiofrequency field gradients.

Avoiding the use of external magnetic fields during the spatial encoding process the Nuclear Quadrupolar Resonance (NQR) spectroscopic information is preserved. It is therefore possible to generalize the rotating frame NQR imaging technique ( $\rho$ NQRI) into a spatially resolved NQR spectroscopy. Two dimensional images in the rotating frame have been generated by means of the projection-reconstruction in combination with a plane selective external magnetic field gradient method. Quadrupolar systems with  $I \neq 3/2$  show several quadrupolar transitions that can be used to encode different spatial

directions using a spin transition for each one.

If the population of a pair of quantum states having quadrupole resonances at frequencies  $\omega_{Q,1}$  and  $\omega_{Q,2}$  is changed by the application of a monochromatic pulsed excitation, the intensity of every other transition involving one of this states is affected. The change of population of a state made by a pulse of frequency  $\omega_{Q,1}$  can be observed by the application of a second pulse of frequency  $\omega_{Q,2}$ .

The imaging sequence consists of two pulses at frequencies  $\omega_{Q,1}$  and  $\omega_{Q,2}$ . The first pulse generates a constant field gradient in the direction of imaging. The second pulse is used for the detection with and homogeneous magnetic field. This pulses are respectively applied for time periods of  $t_1$  and  $t_2$ , while the free induction decay signal is recorded in a third period of time. The experiment is repeated for a complete set of values of  $t_1$ , thus having a two-dimensional signal, that has all the information to reconstruct the spectrum resolved in one spatial coordinate. Extension to a second dimension is possible by using a second pulse that generates another field gradient perpendicular to the first.

#### LOCAL MAGNETISM IN FERRONEMATICS.

R. O. SEITTER, R. KIMMICH

*Universitat Ulm, Section Kernresonanzspektroskopie. Postfach 4066, D-7900 Ulm, West Germany.*

C. R. RODRÍGUEZ, D. J. PUSIOL

*Facultad de Matemática, Astronomía y Física, Universidad Nacional de Córdoba- Córdoba- 5000-Ciudad Universitaria. Argentina.*

A. M. FIGUEIREDO NETO

*Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Cidade Universitaria-São Paulo, Brasil.*

We have done some measurements of the NMR spectra in composite systems like Ferrofluids (FF), water with ferroparticles and Ferronematics (FN), lyotropic liquid crystal with ferrofluid, in a MSL 300 Bruker spectrometer. We have measured samples with different concentrations of the elastic media solvent (water in FF or liquid crystal in FN). With the purpose of studying the influence of the local magnetism produced by the ferroparticles, we prepared samples replacing ferroparticles by no-magnetic materials in that samples mentioned above. This changes were performed only in FN samples. The no-magnetic particles used were: *i*) small balls of  $SiO_2$  of approximately 70 and 140 Å, which has permanent electric dipolar moment. *ii*) segments of approximately the same size as above of polyethyleneglycol (PEG), which are useful to see mechanic effects, since they don't have neither electrical nor magnetic permanent dipolar moments. The presence of magnetic particles in both samples (FF and FN)

to restrain strongly the movement of the water molecules. This effect also appear in measurements of the  $T_1(\nu_L)$  dispersion of the magnetic relaxation made in FN samples with a Field Cycling spectrometer. The NMR spectra of the Deuterium studied in FN samples of different concentration shows the apparition of quadrupolar interaction in Deuterium (this became very clear looking the splitting of the line shape in two symmetric peaks), this effect only appear in lyotropic phases highly ordered. It is possible to calculate the magnetic field gradient from experimental data and computational simulation of the local order, in approximately 20.000 T/m. That values of the magnetic field gradient can not be get by traditional methods.

**WATER DIFFUSION IN  
FERRONEMATICS STUDIED BY  
DISPERSION IN THE NMR SPIN LATTICE  
RELAXATION.**

RAMIRO RODRÍGUEZ, C. E. GONZÁLEZ, D. J.  
PUSIOL

*Facultad de Matemática, Astronomía y Física, Universidad  
Nacional de Córdoba, Córdoba- 5000-Ciudad Universitaria.  
Argentina.*

R. O. SEITTER, R. KIMMICH  
*Universität Ulm, Section Kernresonanzspektroskopie.  
Postfach 4066, D-7900 Ulm, West Germany.*

A. M. FIGUEIREDO NETO  
*Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Cidade  
Universitaria-São Paulo, Brasil.*

We have measured the Larmor frequency dependence of the spin-lattice relaxation time ( $T_1(\nu_L)$ ) in composite systems. Those are constituted by a lyotropic liquid crystal (potassium laurate + decanol + water) and the aggregate of magnetic particules dispersed in water (FN) and no-magnetic particules ( $SiO_2$  and Polyethylenglycol (PEG)). We have seen an intense increment of the collective interactions among water molecules until the appearance of local mesophasic order in FN. Fluctuations of local order-due to intermolecular correlations-and restricted diffusion which characterize the local molecular dynamics are deduced directly from studies of the dispersion on the spin-lattice relaxation. Those studies were made with a Field Cycling spectrometer wich allowed as to change a Magnetic Field in a wide Larmor frequency range (from  $10^2$  Khz to  $10^7$  Khz). From the comparison among the behavior of the pure liquid crystal samples, FN, CL- $SiO_2$  and CL-PEG, it is possible to deduce the anisotropic diffusion of water molecules, which follow the Lévy statistics (Lévy flights). We thought in this case that the molecules in the volume do not diffuse following the classic model of random walk, but external forces (magnetics and also those produced by the geometry imposed by the aggregated of different particules) constrain the movements specially to some particularly local directions.

Theoretically this behavior is superdiffusive, it means that the propagator  $p(r,t)$  is strongly non Gaussian. From the analysis of the results we can calculate the surface correlation length and the surface spatial orientational correlation function and the distribution of correlation times. The numerical procedure used is called Non-Negative Linear Square (NNLS).

**NMR STUDIES OF THE MOLECULAR  
DYNAMICS ON THE LYOTROPIC  
MIXTURE OF POTASSIUM  
LAURATE-DECANOL-WATER.**

RAMIRO RODRÍGUEZ, E. ANOARDO, D. J. PUSIOL  
*Facultad de Matemática, Astronomía y Física, Universidad  
Nacional de Córdoba, Córdoba- 5000-Ciudad Universitaria.  
Argentina.*

R. O. SEITTER, F. GRINBERG, R. KIMMICH  
*Universität Ulm, Section Kernresonanzspektroskopie.  
Postfach 4066, D-7900 Ulm, West Germany.*

A. M. FIGUEIREDO NETO  
*Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Cidade  
Universitaria-São Paulo, Brasil.*

Systematic studies in different nematic meso-phases of the Lyotropic Liquid Crystal has allow us to identified between the individual molecular dynamic of the potassium laurate-decanol molecules and water molecules. The last one molecules are ordered in two different local structures: *i*) the one formed by those belonging to the hydration shells *ii*) the particular order (may be inhomogeneous) of the intermicelar water (less linked). Measurements have been done in samples prepared with normal water and deuterated water, in order to differentiate the behavior of different kind of protons coming from different molecules (wich are inside or outside of the micels). For those molecules which compound micels (potassium laurate and decanol) we can identified classical movements of thermotropic phases in: *i*) movements of individual molecules or Rotational Diffusion (DR) *ii*) rotations of the complete micels *iii*) order fluctuations of the surface or Ondulation Modes-OFD Comparison between proton and deuterated profiles of  $T_1(\nu_L)$  dispersion of the nuclear magnetic relaxation allow us to say that the behavior observated in  $T_1(\nu_L)$  for the hydration water shell (the water wich round the micels) are the same we measured in molecules belonging to the micelar surface. Those results permit the conclusion that water linked to the micelar surface stay in that state and the agitation and geometric deformation of the micels are not enough to liberate that water molecules from the micelar surface. The molecular dynamic model for the water placed between micels, in the case of nematic lyotropic phases, deduced from our measurements of  $T_1(\nu_L)$  correspond to what we know as free water.

**Palestra Convidada – 11/06/97**

---

**HIGH ENERGY DENSITY BATTERIES, A KEY ISSUE FOR THE FUTURE**

MICHEL ARMAND

*Département de Chimie, Université de Montréal*

Ever since Volta invented the first electrochemical cell in 1800, then Planté the lead acid battery fifty years later, finding better means for storing electricity has been a challenge. This need is even more pressing with the development of electronics (telephone, computers...) but also for the most demanding requirement, electric automobiles. In the last two decades, two new concepts have emerged, which promise major improvements in this field: solid-state electrodes capable of dissolving lithium, the lightest and most electropositive element. These so-called insertion compounds are now well identified with many simple metal oxides among them; the second improvement is the replacement of conventional liquid electrolytes by a conductive polymer able to convey ions between the electrodes. With such materials, it is possible to produce all solid batteries, in thin flexible films ( $<10^2 \mu$ ), which can be folded or rolled into the desired shape. These systems contain as much as five times more the energy per weight than the lead acid battery and provide the adequate driving change for electric cars.

---

**Palestra Convidada – 12/06/97**

---

**OPTICAL NONLINEARITIES IN LIQUID CRYSTALS**

P. PALFFY-MUHORAY

*Liquid Crystal Institute, Kent State University, Kent, OH 44242*

Liquid crystals are orientationally ordered fluids which can exhibit a wide variety of unusual optical phenomena. We give an overview of the nonlinear optical properties of liquid crystals, and discuss the responsible mechanisms with an emphasis on those which arise from liquid crystallinity. We present the results of recent experiments; including the measurements of intensity dependent nonlinear susceptibilities using Z-scan and related techniques, studies of optical field induced structural transitions, optical pattern formation and nonlinear propagation as well as laser writing and second harmonic generation. We consider the effects of dissolved dyes on the optical response, and discuss possible applications in the areas of optical power limiting, optical switching, photo-alignment and optical information storage.

---

## SISTEMAS COMPLEXOS: POLÍMEROS E FLUÍDOS (Síntese e Caracterização de Polímeros)

### SISTEMAS COMPLEXOS: POLÍMEROS E FLUÍDOS (Síntese e Caracterização de Polímeros) – 11/06/97

#### ION CONDUCTIVE POLYMER ELECTROLYTES: THE MOTION OF IONS IN NA IMMOBILE SOLVENT

MICHEL ARMAND

*Département de Chimie, Université de Montréal*

Polymer electrolytes are a wide class of new material processing an ionic conductivity in the solid state. Simple macromolecules like polyethylene oxide (PEO) can dissolve many metallic salts as the polymer adopts an helical configuration to wrap the cations, separating them from the anions. The interactions of the polymer with the cation counterbalance the lattice energy of the salt. The materials have many intriguing properties and can be viewed as intermediates between ion-conducting solid like AgI and liquids like aqueous solutions. Due to entanglement, the polymer cannot move with the charges, as water molecules surrounding an ion do, resulting in a peculiar type of motion as ions hop from site to site when segmental motion of the polymer offers the opportunity ("immobile solvent"). The relative mobilities of the +/- charges, as measured for instance by NMR, surprisingly does not depend on the size of the species, as in liquids. When salts of rare earth ( $\text{Eu}^{3+}$ ,  $\text{Pr}^{3+}$ ) are dissolved in these polymer matrices, the materials exhibit strong fluorescence, as the polymer provides as shielded environment minimizing the quenching modes. It is also possible to modify the PEO type polymers so that the charges compensating those of the cations are electrons, resulting in a mixed conductivity ( $\text{e}^-$  and  $\text{Li}^+$  for instance). The main application of polymer electrolytes are high energy density batteries and electrochromic windows, yet many more developments are expected.

#### A NEW SERIES OF CONFIRMING EXAMPLES IN THE CONSISTENCY OF A GENERALISED PHENOMENOLOGICAL MODEL FOR POLYMER ELECTROLYTES' CONDUCTIVITY DATA

ARMANDO LOPES DE OLIVEIRA, PAULO ROBERTO  
SILVA  
UFMG

We present a series of new examples which seems to confirm a generalised phenomenological model we proposed recently [1]. It succeeds restricted previous ones [2][3], and explains, apparently by the first time, directly from concentration-dependence of conductivity, different degrees of dynamic order-disorder in polymer electrolytes. Our model is complementary to VTF model [4-6] by one of their main features: VTF model implies critical volumes in temperature-dependence of conductivity; our model supposes the existence of critical concentrations in concentration-dependence of conductivity. On the other hand it parallels well established computation simulations [7-9], for dynamic order-disorder in polymer electrolytes, which have however the handicap of using almost exclusively indirect or calculated parame-

ters instead of direct experimental data.

References:

- [1] A.L. de Oliveira and P.R. Silva, "A generalised phenomenological dynamic order-disorder model for polymer electrolytes", submetido ... *Electrochimica Acta*, setembro de 1996.
- [2] A.L. de Oliveira, O. de O. Damasceno, P. R. Silva, C. L. Sangiorgio, M. Armand, M. Kleitz *Solid State Ionics*, **60**, 99 (1993).
- [3] A. L. de Oliveira, O. de O. Damasceno, P. R. Silva, C. L. Sangiorgio, J. P. Donoso and T. J. Bonagamba, "Disorder model for specific conductivity of Lithium perchlorate dissolved in poly(ethylene glycol-400) diesterate", *Electrochimica Acta*, no prelo.
- [4] I. H. Vogel, *Phys. Z.* **22**, 645 (1921).
- [5] G. S. Fulcher, *J. Am. Ceram. Soc.*, **8**, 339 (1925).
- [6] V. G. Tammann and W. Hesse, *Anorg. Allg. Chem.*, **156**, 245 (1926)
- [7] M. A. Ratner and A. Nitzan, *Discuss. Faraday Soc.* **88**, 19 (1989).
- [8] M. A. Ratner and A. Nitzan, *J. Chem. Phys.*, **98**, 1765 (1994).
- [9] S. D. Druger, M. A. Ratner and A. Nitzan, *Phys. Rev. B* **31**, 3939 (1985).

**SÓLITONS EM CADEIAS POLIMÉRICAS:  
UMA INVESTIGAÇÃO SOBRE A  
CONFORMAÇÃO E A RESPOSTA DA  
POLARIZAÇÃO.**

DEMÉTRIO A. DA SILVA FILHO, CELSO P. DE MELO  
UFPE

Diante do potencial uso de polímeros orgânicos em dispositivos de ótica não-linear, o comportamento limite das propriedades eletrônicas de uma família de moléculas conjugadas de tamanho crescente é hoje um tópico de grande interesse. Neste trabalho apresentamos resultados de uma investigação a nível semi-empírico (AM1) e *ab initio* (base 6-31G) da estrutura eletrônica, geometria e polarizabilidades de cadeias poliênicas  $C_{2n+1}H_{2n+3}^+$  portadoras de um defeito conformacional do tipo sóliton carregado positivamente. Nossos cálculos indicam que o uso do método AM1 para a determinação das propriedades dessas moléculas deve ser feito de modo criterioso, uma vez que as geometrias correspondentes tendem a ser bem mais lineares que as obtidas a nível *ab initio* com o uso dos programas *Gaussian*. Como consequência, as componentes longitudinais das diferentes hiperpolarizabilidades são super-estimadas no cálculo semiempírico. Ainda assim, várias das principais tendências qualitativas no comportamento das diferentes propriedades são adequadamente reproduzidas. As moléculas apresentam uma forma arqueada característica, e a existência de duas famílias (com  $n$  par e ímpar, respectivamente) pode ser claramente identificada. A diferença na distribuição eletrônica entre essas duas famílias tende a ser minimizada com o crescimento da cadeia. Usando o programa GAMESS, o comportamento do momento de dipolo  $\mu$ , da polarizabilidade  $\alpha$  e da primeira ( $\beta$ ) e segunda hiperpolarizabilidades ( $\gamma$ ) para as moléculas com  $n \leq 14$  foi obtido a nível *ab initio* e comparado com os resultados AM1 (obtidos para  $n \leq 18$ ). De modo a separar os efeitos associados à geometria com os devidos à aproximação Hartree-Fock utilizada, esses resultados foram comparados com os de um cálculo intermediário, onde os valores *ab initio* das diferentes propriedades foram determinadas para a geometria otimizada AM1. Como regra geral podemos concluir que os efeitos da geometria são dominantes para as polarizabilidades de ordem par ( $\alpha$  e  $\gamma$ ), enquanto que o método de aproximação escolhido determina a evolução do momento de dipolo e da primeira hiperpolarizabilidade com o valor de  $n$ . Resultados adicionais para moléculas maiores estão sendo obtidos através da técnica de campo finito, que se mostrou confiável para a predição das hiperpolarizabilidades de moléculas de tamanho intermediário.

(Apoio CNPq, FINEP e CAPES; trabalho realizado no CENEPAD, CENAPAD-NE e CESUP/RS)

**ESTRUTURA ELETRÔNICA DE  
COPOLÍMEROS DE POLIACETILENO  
CONTENDO OXIGÊNIO.**

BERNARDO LAKS, DOUGLAS S. GALVÃO  
UNICAMP

ALEXANDRE CAMILO JR  
Universidade Estadual de Ponta Grossa

Apesar de inúmeros anos de investigações teóricas e experimentais sobre o mecanismo físico da transição isolante metal em polímeros condutores essa ainda é uma questão em aberto. Acredita-se que a alta condutividade dos polímeros condutores quando dopados está associada a defeitos conformacionais tipo sólitons, pólarons e bipólarons. Recentemente foi proposto que a desordem poderia ser um mecanismo físico associado a transição induzindo o aparecimento de estados estendidos (quase ressonantes) como uma explicação alternativa ao modelo tipo sóliton. Neste trabalho apresentamos um estudo da estrutura eletrônica de copolímeros de poliacetileno (dopados e não dopados) contendo oxigênio incorporado estruturalmente. Este material foi sintetizado por volta de 1985, mas tem sido pouco estudado. Estudos experimentais mostraram que quando dopados este material apresenta uma alta condutividade, da mesma ordem do trans-poliacetileno. Devido a sua estrutura este comportamento não pode ser explicado com base no modelo de sóliton, tipo SSH (Su-Schrieffer-Heeger). Nossos resultados indicam no entanto que essa condutividade pode ser explicada em termos de estados quase ressonantes associados com a desordem. Dado que os sistemas são planares, as propriedades elétricas são dominadas pelos elétrons  $\pi$ . Em nossos cálculos tratamos o sistema como um sistema  $\pi$  com um orbital por sítio. Os elementos de matrizes do hamiltoniano são obtidos através da Teoria de Hückel Simples. A densidade de estados eletrônicos para cadeias, ordenadas e desordenadas, do copolímero é determinada pela técnica NFC (negative factor counting) e as autofunções associadas a energias de interesse são obtidas pelo método de iteração.

**ESTUDO DO SISTEMA CONDUTOR  
IÔNICO POLIURETANA/ $LiClO_4$  POR  
ESPECTROSCOPIA RAMAN E ANÁLISE  
TÉRMICA**

CLASCÍDIA APARECIDA FURTADO  
Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear -  
CDTN/CNEN

GLAURA GOULART SILVA, MARCOS ASSUNÇÃO  
PIMENTA, JOSÉ CAETANO MACHADO, PATTERSON  
PATÍCIO DE SOUZA  
Universidade Federal de Minas Gerais

O uso de sistemas binários polímero/sal como eletrólitos para dispositivos eletroquímicos de estado

sólido tem motivado o estudo dos fenômenos de dissociação e transporte iônico em uma matriz polimérica. Com o objetivo de se obter matrizes com propriedades interessantes para a sua utilização como eletrólito, tais como cristalinidade reduzida, alto poder solvatante e baixa temperatura de transição vítrea, materiais como elastômeros de poliuretanas têm sido amplamente investigados. Neste sentido, foram sintetizadas poliuretanas lineares a partir do copolímero poli(tetrametileno glicol-co-etileno glicol), PTMG/PEG, de massa molar média 77000, determinada por Cromatografia de Exclusão Estérica. Os eletrólitos PTMG/PEG/LiClO<sub>4</sub> foram preparados por co-dissolução e "casting", em um intervalo de concentração de 5 a 35% m/m de sal. O sistema foi caracterizado termicamente por Termogravimetria e Calorimetria Exploratória Diferencial e a interação íon-íon foi monitorada por Espalhamento Raman. O sistema apresentou uma estabilidade térmica satisfatória, tendo a temperatura de início de degradação permanecido acima de 423K, em toda a faixa de concentração estudada. A temperatura de transição vítrea ( $T_g$ ) aumenta com o aumento da concentração de sal, indicando uma limitação da mobilidade macromolecular, até um valor de 249K, para a concentração de 27% m/m de sal. A partir desta concentração a  $T_g$  volta a diminuir. A associação iônica, com a formação de pares iônicos e/ou agregados, além dos íons livres presentes em concentrações mais baixas, foi observada a partir de 12% m/m de sal. O grau de associação cresce em função da concentração de sal, sendo que a partir de 27% m/m, este aumento se faz de modo abrupto. Nesta mesma concentração crítica, observou-se nas medidas por DSC, a presença de um fenômeno endotérmico a cerca de 393K, associado à formação de um complexo cristalino polímero/sal. Para concentrações menores, o sistema se mostrou totalmente amorfo.

## SISTEMAS COMPLEXOS: POLÍMEROS E FLUÍDOS (Síntese e Caracterização de Polímeros) – 13/06/97

### MEDIDA DA POLARIZAÇÃO REMANENTE E DO CAMPO COERCIVO EM POLÍMEROS FERROELÉTRICOS EMPREGANDO O MÉTODO DE CORRENTE CONSTANTE.

WALTERLEY ARAUJO MOURA, CÉLIO WISNIEWSKI,  
JOSÉ A. GIACOMETTI, G. F. LEAL FERREIRA  
· USP · Instituto de Física de São Carlos

A determinação da polarização remanente,  $P_r$ , e do campo coercivo,  $E_c$ , de polímeros ferroelétricos não é um procedimento simples como no caso de ferroelétricos inorgânicos. O PVDF e seus copolímeros com trifluoretileno ao ser polarizado por um campo elétrico apresentam respostas elétricas devido à polarização ferroelétrica, polarização reversível e respostas devido a parte capacitiva e condutiva da amostra. Em geral, como método experimental para determinação de  $P_r$  e  $E_c$  emprega-se o método de medida de histerese dielétrica: medida da corrente elétrica resultante da aplicação de tensão de forma senoidal ou triangular. A dificuldade é separar da corrente elétrica medida apenas a contribuição devida a orientação da polarização ferroelétrica. O presente trabalho apresenta um novo método utilizando a aplicação de corrente constante a uma amostra com eletrodos metálicos em suas faces. As vantagens seriam a maior simplicidade da montagem experimental e do equacionamento do problema. A montagem experimental é constituída de um controlador de corrente, uma fonte de alta tensão programável e placa de aquisição A/D controlada por um computador tipo PC. A grandeza medida no experimento é a variação da tensão elétrica para uma dada corrente elétrica de carga. Discute-se as equações do novo método, os modelos de relaxação e de condução e, finalmente apresenta-se a determinação de  $P_r$  e  $E_c$  de filmes de PVDF com diferentes espessuras.

### ESTUDO DO TRANSPORTE DE PORTADORES DE CARGAS EM POLIANILINAS ATRAVÉS DA INJEÇÃO DE ELÉTRONS UTILIZANDO FEIXE ELETRÔNICO

LUCAS FUGIKAWA SANTOS, ROBERTO MENDONÇA  
FARIA

*Instituto de Física de São Carlos*

SÉRGIO MERGULHÃO

*Universidade Federal de São Carlos*

DANTE LUIS CHINAGLIA

*Dep. de Física e Química UNESP - Ilha Solteira*

Polianilinas têm chamado especial atenção devido a suas propriedades elétricas únicas. "Polianilina" é uma designação genérica para uma família de polímeros consistindo de uma sequência de unidades oxidadas  $[-(C_6H_4)-N=(C_6H_4)=N-]$  e de unidades reduzidas  $[-(C_6H_4)-(NH)-(C_6H_4)-(NH)-]$ . Existem três formas distintas de polianilina, dentre as quais destacamos a esmeraldina, que possui um número igual de segmentos oxidados e reduzidos em sua cadeia, que tem sido a mais frequentemente estudada. Sob protonação, a esmeraldina tem a sua condutividade alterada desde à

característica de um semicondutor de baixa condutividade ( $\sigma 10^{-7}$  S/cm) até à de um metal ( $\sigma 10^1 - 10^3$  S/cm). Neste trabalho, pretendemos realizar estudos de tempo de voo em filmes de polianilina (PANI), na forma de esmeraldina, através da injeção de elétrons utilizando um canhão eletrônico de energia variável. Esta injeção é feita mediante pulsos rápidos (da ordem de milissegundos) de corrente, com o feixe eletrônico desfocalizado. Estes resultados nos permitirão estimar a mobilidade dos portadores de carga no material não-protonado e, conforme o processo de condução - dispersivo ou não condutivo - elaborar um modelo mais completo sobre mecanismos de condução de volume, levando-se em conta o efeito da dopagem no material. (FAPESP)

#### MEDIDAS DE RESISTIVIDADE DE FILMES DE LANGMUIR-BLODGETT DE UM NOVO POLÍMERO DERIVADO DO PIRROL

F. L. DOS SANTOS, ALEXANDRO CARDOSO

TENÓRIO, CELSO P. DE MELO

*Departamento de Física - Universidade Federal de Pernambuco*

Tanto em investigações básicas sobre o comportamento da condutividade orgânica, quanto do ponto de vista tecnológico (onde tem sido o material de escolha para o desenvolvimento de sensores), o polipirrol (PPY) é um dos polímeros condutores mais largamente usado. No entanto, filmes de PPY obtidos por via eletroquímica normalmente apresentam uma estrutura morfológica desordenada, o que dificulta a interpretação à luz dos modelos teóricos existentes de resultados experimentais para a condutividade dessas amostras. A preparação de filmes do PPY pela técnica de Langmuir-Blodgett (LB) surge como uma possibilidade de contornar esse problema, uma vez que as amostras correspondentes possuiriam em princípio uma maior organização molecular. Entretanto, devido à difícil solubilidade do PPY em solventes orgânicos, a técnica de LB não pode ser aplicada diretamente para ele. O pACATI, um novo polímero conjugado derivado do pirrol, devido à estrutura do monômero correspondente (onde apenas substituições nas posições 2 e 5 são permitidas) apresenta um número menor de ramificações ao longo da cadeia e apresenta um grau de solubilidade em clorofórmio que o coloca como uma alternativa viável para a preparação de filmes de filmes de LB. Por sua vez, porém, a medida de condutividade em filmes de LB apresenta dificuldades técnicas associadas à preparação dos contatos elétricos. Apresentaremos neste trabalho resultados preliminares para os valores das componentes longitudi-

nal e transversal de filmes de LB dopados e não dopados do pACATI. As medidas de condutividade longitudinal desses filmes foram obtidas pela utilização de micro cabos e cola de prata e epoxi através dos métodos das 2 e 4 pontas. A condutividade longitudinal obtida para o filme de pACATI não dopado é comparável à de filmes de PPY preparados eletroquimicamente e fracamente dopados. (Apoio: FINEP e CNPq)

#### ESTUDO DO COMPORTAMENTO FÍSICO E QUÍMICO DE RESINA TERMOSENSÍVEL NO PROCESSO DE CURA LOCALIZADA INDUZIDA POR LASER DE $CO_2$

ANDRÉ L. J. MUNHOZ, PAULO R. S. WAGNER,

MARIA CLARA F. IERARDI

*DEMA / FEM / UNICAMP*

MARCO A. F. SCARPARO

*DEQ / IFGW / UNICAMP*

Este trabalho apresenta um estudo teórico e experimental sobre resina termosensível utilizada em estereolitografia. O estudo da estereolitografia, normalmente, tem sido realizado com a utilização de resinas fotosensíveis sob efeito da radiação ultravioleta do laser de HeCd ( $0,352 \mu\text{m}$ ). Esta técnica permite a construção de modelos tridimensionais de geometria ilimitada e se enquadra como o caminho mais curto percorrido entre a concepção inicial e uma peça real em três dimensões. O nosso trabalho tem por base uma nova técnica de fabricação de protótipos tridimensionais utilizando o laser de  $CO_2$  ( $10,6 \mu\text{m}$ ). As vantagens da utilização da radiação infravermelha sobre a ultravioleta, nos incentivaram na realização deste estudo. No estudo preliminar da composição da resina termosensível, obtivemos uma mistura otimizada composta de 10 partes de resina epoxi, 1.4 partes de dietileno triamina e 0.7 partes de sílica em pó. O efeito do feixe laser de  $CO_2$  sobre esta composição, produz um aquecimento seletivo provocando a cura localizada tridimensional, com espessuras da ordem de 0,1 mm a 0,2 mm, com boa resolução espacial, sem que ocorra uma contração dimensional em prejuízo do produto final. No proposto trabalho apresentamos um modelo físico e químico que descreve o processo da cura localizada, num intervalo de temperatura entre  $60^\circ\text{C}$  e  $100^\circ\text{C}$ . Em nosso experimento, foram identificados alguns fatores que realmente afetam o processo de cura da resina termosensível. Os estudos foram estendidos na determinação do grau de conversão de cura da resina com objetivo do controle da energia necessária para o início da reação. Foi determinado também, que a variação proporcional na quantidade de sílica na mistura é crítica, atuando decisivamente no

confinamento de energia do laser na área de aplicação.

### ESPECTROSCOPIA FOTOTÉRMICA DE POLIANILINAS.

JOSÉ EDUARDO DE ALBUQUERQUE  
*DPF/UFV/Viçosa-MG*

WASHINGTON LUIZ DE BARROS MELO  
*DEE/UNESP/Iha Solteira-SP*

ROBERTO MENDONÇA FARIA  
*DFCM/IPSC/USP/São Carlos-SP*

As Espectroscopias Fototérmicas, Fotopiroelétrica (PPES) e Fotoacústica (PAS), têm sido muito usadas na caracterização das propriedades térmicas e óticas de materiais poliméricos em geral. Neste trabalho, estudamos, através dessas técnicas, o processo de dopagem de polianilinas em meios ácidos, utilizando o ácido clorídrico, em diversos pH's. Foram utilizados filmes poliméricos obtidos pela técnica de deposição com a posterior evaporação do solvente e pela técnica de spin-coating. Os primeiros foram obtidos pela deposição, em uma placa de vidro, de uma solução de polianilina (PANI) em N-metilpirrolidona (NMP), de concentração 2%. As espessuras desses filmes foram em torno de 20  $\mu\text{m}$ , sendo opacos à luz visível. Filmes de poli(o- meto-xianilina) (POMA) obtidos pela técnica de spin-coating apresentaram espessuras em torno de 0,18  $\mu\text{m}$ , sendo transparentes à luz visível. Obtivemos espectros PPES e PAS desses filmes em função do comprimento de onda da luz. Os espectros PPES dos filmes opacos da PANI não apresentaram variações significativas com o estado de dopagem das amostras. Por outro lado, os espectros PPES dos filmes transparentes da POMA apresentaram variações bem grandes com o estado de dopagem das amostras. Os espectros PPES apresentaram um comportamento parecido com o de transmissão ótica, quando as amostras foram colocadas em contato com o detector piroelétrico e parecido com o de absorção ótica, quando não em contato com o detector. Os espectros PAS só foram obtidos para as amostras transparentes da POMA e são semelhantes aos espectros de absorção ótica. Com as diferenças espectrais para as amostras dopadas, em relação às não-dopadas, concluímos que não existem filmes completamente não-dopados, e sim uma mistura de regiões dopadas e não-dopadas provavelmente distribuídas aleatoriamente no volume dos filmes. Esta conclusão está em concordância com resultados de medidas de EPR, de medidas diretas de condutividade com micropontas e de análise STM, que comprovam a existência de aglomerados de elementos dopantes na matriz isolante do material.

### SMALL-ANGLE X-RAY SCATTERING MEASUREMENTS OF CRYSTALLIZATION IN METHYL-SUBSTITUTED POLY(ARYL ETHER ETHER KETONE)

CLAUDIO BARBERATO, GUINTEHER KELLERMAN,  
ALDO FELIX CRAJEVICH  
*Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS/CNPq)  
Campinas, SP*

IRIS LINARES TORRIANI  
*IFGW/UNICAMP, Campinas, SP*

MARSHA ALICIA SINGH  
*Queen's University, Kingston, Ontario, Canada*

Y. PAUL HANDA  
*National Research Council, Ottawa, Canada*

Preliminary small-angle x-ray scattering (SAXS) measurements on a variety of methyl-substituted poly(aryl ether ether ketone) (PEEK) samples have been performed at the D11A-SAXS beamline of the Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS). Methyl-substituted PEEK (MePEEK) is an industrially important thermoplastic material exhibiting crystallization upon annealing at temperatures between 175 and 200 °C. Differential Scanning Calorimetry (DSC) measurements (Handa Y.P., Roovers J., Wang F., *Macromolecules* 27(19), 5511-5516 (1994)) indicate that the presence of supercritical fluids during thermal treatment can have dramatic effects on the melting behaviour of MePEEK when compared to similar data for materials annealed in air. These observations have been made for samples demonstrating no significant differences in the extent of crystallinity suggesting that it is the nature of the crystallites that is affected by the presence of additives during thermal treatment. In this preliminary study, scattering profiles for three MePEEK samples (as received, thermally treated in air, and thermally treated with supercritical 0.85CO<sub>2</sub> + 0.15CH<sub>3</sub>OH) are obtained in the small-angle scattering region. The data are analyzed to provide some measure of the variation in crystallite structure between the thermally treated samples. Scattering data obtained in the very small-angle region on the same samples at the High Brilliance Beamline (ID2/BM4) (experiments performed by Olivier Diat and M.A. Singh, Dec. 1996) of the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) is combined with the LNLS data to provide information over 3 decades of scattering angle. This work is part of a larger study of the use of supercritical fluids to control the level and morphology of crystallization in these materials.

**SISTEMAS COMPLEXOS:  
POLÍMEROS E FLUÍDOS  
(Síntese e Caracterização de  
Polímeros / Aplicações Tec-  
nológicas e RMN de Polímeros)**  
- 13/06/97

**RESSONÂNCIA MAGNÉTICA  
DETECTADA ELETRICAMENTE  
APLICADA AO POLIACETILENO E A  
POLIANILINA**

CARLOS FREDERICO DE OLIVEIRA GRAEFF  
DFM-FFCLRP-USP

MARTIN BRANDT, MARTIN STUTZMANN  
Walter Schottky Institut, TU-München

ROBERTO M. FARIA  
IFSC-USP

G. LEISING  
TU Graz

Nos últimos 20 anos, a técnica de ressonância magnética detectada eletricamente (RMDE) tem fornecido valiosas informações em vários processos de transporte e recombinação numa grande variedade de semicondutores, e muito recentemente em polímeros. Neste trabalho, as propriedades de transporte de filmes de poliacetileno e polianilina são investigados utilizando a técnica de RMDE. As amostras de poliacetileno estudadas estavam em seu estado intrínseco, eram não alinhadas convencionais do tipo Shirakawa trans-poliacetileno. As amostras de polianilina foram sintetizadas quimicamente e preparadas no estado intrínseco da base emeraldina. No caso do poliacetileno, o sinal de RMDE observado tem um  $g = 2,0028$  e uma largura de linha de 2,5 G. Este sinal é identificado ao tunelamento entre cadeias, envolvendo um polaron e um soliton. No caso da polianilina, o sinal de RMDE é identificado similarmente ao processo de tunelamento entre cadeias envolvendo dois polarons. Neste último caso, a amplitude do sinal de RMDE é dependente do campo elétrico aplicado. Para campos fracos apenas um sinal é observado com  $g = 2,0029$  e uma largura de linha de aproximadamente 1,7 G. Para campos fortes, dois sinais são observados, tendo o mesmo fator  $g = 2,0034$  mas larguras de linhas diferentes, 1,7 G e 14 G. Um modelo simples envolvendo a competição entre processos dependentes e independentes do spin é proposto, que explica com razoável precisão os dados experimentais. A aplicabilidade desta nova técnica de caracterização, seus pontos positivos e negativos, serão discutidos.

Apoio financeiro: Fundação Alexander von Humboldt (Alemanha) e Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP).

**RMN DE CONDUTORES IÔNICOS  
POLIMÉRICOS COM AGENTES  
PLASTICIZANTES**

ANTONIO CARLOS BLOES, CLAUDIO JOSÉ MAGON,  
JOSÉ PEDRO DONOSO  
USP - São Carlos

Os eletrólitos poliméricos são complexos entre um polímero, como poly(óxido etileno) e um sal alcalino ( $\text{LiBF}_4$ ). O interesse nestes materiais reside no fato de serem utilizados em dispositivos práticos como baterias recarregáveis, dispositivos eletrocromáticos, sensores [1]. Nestes sistemas sólidos a macromolécula atua como solvente para o sal que fica parcialmente dissociado na matriz polimérica originando a condutividade iônica. Essa condutividade pode ser melhorada de duas formas: (a) adicionando plasticizantes (como PC - propilenocarbonato) [2] ou (b) formando uma blenda polimérica, como PEO:PEG, onde PEG é o poly(etileno glicol) [3]. Neste estudo investigamos a mobilidade da cadeia polimérica e dos íons responsáveis pela condutividade na amostra com plasticizante  $\text{PEO}_8\text{LiBF}_4+50\%\text{PC}$  e numa blenda  $[\text{PEO}_{0.5}+\text{PEG}_{0.5}]_8\text{LiBF}_4$ , utilizando a técnica de RMN. Medimos largura de linha e relaxação spin-rêde ( $T_1$ ) do  $^1\text{H}$  e  $^{19}\text{F}$ , a 36MHz, entre 190K e 370K. Os resultados do  $^{19}\text{F}$  mostraram a presença de um máximo na taxa de relaxação ( $1/T_1$ ) nas duas amostras estudadas, sendo este observado numa temperatura mais alta que no complexo puro  $\text{PEO}_{6.7}\text{LiBF}_4$ . A energia de ativação nas duas amostras estudadas é da ordem de 0.18eV. O estreitamento da linha do  $^{19}\text{F}$ , devido ao movimento do grupo  $\text{BF}_4$ , foi observado em 241K na amostra pura e na amostra com plasticizante, e em 263K na blenda  $[\text{PEO}_{0.5}+\text{PEG}_{0.5}]_8\text{LiBF}_4$ . [1] T.Kudo, K.Fueki, *Solid State Ionics*, (Kodansha,1990); J.R.McCallum, C.A.Vincent, *Polymer Electrolyter*, Reviews I,II (Elsevier 1987,1989) [2] H.S.Lee, X.Q.Yang, J.McBreen, *J.Electrochem.Soc.*, 141,886,(1994); S.Chintapalli, R.Frech, *Solid State Ionics* 86-88, 341 (1996) [3] C.Wang, Q.Liu, *Solid State Ionics* 53-56,1106 (1992); L.Yang, J.Lin, Z.Wang, *Solid State Ionics* 40-41, 616 (1990) (FAPESP, CNPq, FINEP)

**Controle da Injeção de carga em interfaces  
metal/polímero.**

IVO ALEXANDRE HÜMMELGEN  
UPPR

Na década de 90 foi demonstrada a viabilidade de construção de vários dispositivos optoeletrônicos que utilizam polímeros conjugados na camada eletroluminescente ativa. Esses dispositivos são normalmente construídos em estrutura sanduíche, i. e., uma camada de polímero separando dois eletrodos. Um dos eletrodos injeta buracos e o outro injeta elétrons no polímero,

onde ocorre a recombinação dos portadores, caracterizando a eletroluminescência. Assim sendo, um dos principais fatores determinantes da eficiência desses dispositivos se constitui no controle e balanceamento dos portadores de carga. Para que o controle possa ser efetuado, é necessário que se conheça em detalhe o mecanismo de injeção.

Neste trabalho é discutido o processo de tunelamento por efeito de campo e sua utilização para caracterização da estrutura de bandas do polímero e das barreiras de potencial formadas nas interfaces polímero/metal. São apresentados resultados obtidos com diversos polímeros conjugados e suas interfaces.

No caso de polímeros não dopados, assume-se a forma de barreira triangular na interface polímero/metal. O potencial na interface, e conseqüentemente a intensidade da corrente injetada pode ser controlada de forma mais precisa utilizando-se estruturas de múltiplas camadas poliméricas escolhidas em função de suas constantes dielétricas e das posições de seus níveis HOMO e LUMO em relação ao nível de vácuo. Através do controle das espessuras das camadas poliméricas envolvidas consegue-se o balanceamento de portadores injetados, mesmo para sistemas em que a altura de barreira para injeção de elétrons difere da altura de barreira para injeção de buracos.

Este trabalho foi financiado com recursos do PADCT. O autor também expressa seu agradecimento ao CNPq pelo suporte financeiro.

#### INVESTIGAÇÃO DA MORFOLOGIA E DAS CARACTERÍSTICAS DAS INTERFACES ENTRE METAIS/POLÍMEROS VIA MICROCOPIA ELETRÔNICA DE TRANSMISSÃO EM SECÇÃO DE CORTE.

RICARDO BERTON, IVO ALEXANDRE HÜMMELGEN

*Laboratório de Materiais, Departamento de Física,  
Universidade Federal do Paraná*

ROSAMARIA WU CHIA LI, JONAS GRUBER

*Instituto de Química, Universidade de São Paulo*

Os polímeros conjugados têm sido utilizados em dispositivos opto-eletrônicos, como diodos emissores de luz (LEDs). O Poli Para-fenileno Vinileno (PPV), o Poli Benzotiofeno Vinileno (PBTv) e o Poli Benzofurano Vinileno (PBFV) são três destes polímeros. A caracterização da interface entre o elemento que fará o contato e o polímero, é um dos itens mais importantes no estudo de tais componentes eletrônicos. É através das barreiras de potencial formadas na interface que ocorre a injeção de cargas, fator dominante na eficiência de um dispositivo. Conhecer a morfologia e as características de uma interface pode melhorar ou mesmo viabilizar um determinado dispositivo. A técnica de Microscopia

de Transmissão em Secção de Corte (cross-sectional Transmission Electron Microscopy X-TEM) fornece uma imagem da interface, mostrando através dos diferentes contrastes a possibilidade da presença ou não de contaminação, difusão, ou possível oxidação da interface. A análise de medidas de transporte de carga na interface permite a comparação dos efeitos observados na morfologia com as características elétricas do dispositivo, confirmando hipóteses da ocorrência de um dos efeitos acima. O PBTv e o PBFV são polímeros de síntese inédita, tornando-se necessário caracterizá-los antes da comparação dos efeitos nas interfaces entre eles e os metais. Para a caracterização foi utilizado um método baseado em medidas de transporte elétrico que permite calcular as alturas das barreiras de potencial na interface e determinar o nível LUMO do polímero. Para o PBTv foi encontrado um valor de  $\approx 4.13$  eV. Os resultados obtidos podem ser comparados com medidas feitas pela técnica de XPS que estão disponíveis na literatura.

#### CARACTERIZAÇÃO DA INTERFACE ÓXIDO DE ESTANHO/PPV (POLI *p*-FENILENO VINILENO)

ANA CLAUDIA ARIAS, IVO. A. HÜMMELGEN

*UFPR*

FRANCISCO CARLOS NART

*USP-São Carlos*

Filmes de TO ( "Tin Oxide"- Óxido de Estanho), têm sido utilizados em dispositivos eletrônicos, tais como diodos emissores de luz, como contato transparente injetor de buraco na camada ativa, composta por um polímero conjugado semicondutor. Neste trabalho investigou-se a interface TO/PPV, a fim de conhecer o mecanismo de injeção de buracos destes dispositivos, assim como caracterizar quantitativamente a altura de barreira entre estes materiais.

Os dispositivos investigados, caracterizados no presente trabalho possuem a seguinte estrutura sanduíche : TO/PPV/Metal. Os filmes de TO são produzidos por CVD (Chemical Vapour Deposition ) reativo, por evaporação direta de Cloreto Estanhoso ( $\text{SnCl}_2$ ). As características destes filmes dependem da temperatura de substrato e do tempo de deposição. Filmes obtidos a  $550^\circ\text{C}$  possuem condutividade aproximadamente igual a  $3\text{k} (\Omega\text{cm})^{-1}$  e mobilidade na ordem de  $200\text{cm}^2/\text{Vs}$ , enquanto que filmes produzidos a temperatura de substrato igual a  $400^\circ\text{C}$  apresentam condutividade igual a  $12 (\Omega\text{cm})^{-1}$  e mobilidade na ordem de  $6\text{cm}^2/\text{Vs}$ . Estão sendo utilizados filmes obtidos a  $400^\circ\text{C}$ ,  $550^\circ\text{C}$  e dupla camada (  $550^\circ\text{C} + 400^\circ\text{C}$  ), com tempo de deposição de 3 minutos. Os filmes de PPV são obtidos por "casting" utilizando o precursor de PPV produzido pelo sal de sulfônio. O PPV é convertido durante duas horas, a  $250^\circ\text{C}$ , em atmosfera de Argônio. Como filmes dife-

rentes de TO apresentam diferentes valores de barreira para o PPV, modificando-se a condição de preparo do contato transparente, pode-se controlar a injeção de buracos no dispositivo. Escolhendo de maneira adequada o metal a ser utilizado como segundo contato do dispositivo, atinge-se a condição ideal de injeção de carga, na qual ocorre balanceamento entre a injeção de elétrons e de buracos.

### DETERMINAÇÃO DA ALTURA DE BARREIRA NA INTERFACE METAL/POLÍMERO PELA CORRENTE DE TUNELAMENTO DEPENDENTE DA TEMPERATURA.

MARLUS KOEHLER, IVO A. HÜMMELGEN  
UFPR

O uso de polímeros conjugados como material ativo em dispositivos eletroluminescentes com razoável eficiência radiante depende de um controle preciso da densidade de corrente que atravessa a interface metal/polímero. A densidade de corrente eletrônica e a densidade de corrente de buracos injetada deve ser balanceada a fim de se obter a maior taxa de recombinação possível, e, conseqüentemente, uma maior eficiência radiante. Assim, a compreensão do mecanismo de transporte envolvido na injeção de carga pela interface metal/polímero, bem como a exata caracterização da altura de barreira nesses contatos, é indispensável para viabilizar sua aplicação tecnológica. No presente trabalho, utiliza-se a expressão da densidade de corrente de tunelamento dependente da temperatura (TDT) para explicar o desvio em relação ao comportamento previsto pelo modelo de Fowler-Nordheim observado em várias interfaces metal/polímero para baixos campos elétricos aplicados. Demonstra-se, ainda, que essa equação permite reproduzir a dependência com a temperatura da corrente que atravessa as referidas interfaces. Da aplicação da teoria TDT deriva-se um método capaz de determinar a altura de barreira na interface metal/polímero dispensando o conhecimento prévio da espessura da camada polimérica e da massa específica dos portadores de carga: do ajuste da equação  $-A_1x + \ln(A_2x) - \ln(\text{sen}(A_3x))$  ao gráfico de Fowler-Nordheim do dispositivo, a altura de barreira  $\phi$  é dada simplesmente pela razão entre os parâmetros  $A_1$  e  $A_3$ , segundo a relação  $\phi = \frac{3}{2} \pi kT \frac{A_1}{A_3}$ , na qual  $k$  é a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura de medição. O método é eficiente tanto para dispositivos com injeção majoritária de elétrons bem como para dispositivos com injeção majoritária de buracos e reproduz os valores para a altura de barreira de vários tipos de interface metal/polímero reportados na literatura (tais como para os contatos In/PPV e Au/PPP).

### INVESTIGAÇÃO DA INFLUÊNCIA DA CONCENTRAÇÃO DE ÁCIDO CÂNFORSSULFÔNICO NA BLENDAS PANI/PMMA

CÁSSIA TIEMI NEMOTO, ADRIANE VIANA DO ROSÁRIO, MARIA APARECIDA BIASON GOMES, IVO ALEXANDRE HÜMMELGEN  
UFPR

Nos últimos anos têm sido intensificada a investigação dos polímeros condutores eletrônicos (PCEs). O desenvolvimento destes materiais tem enorme interesse tecnológico, uma vez que poderão substituir os metais em aplicações específicas, nas quais as propriedades de polímeros apresentam vantagens, como baixo custo de processamento e flexibilidade. Alguns exemplos promissores são dispositivos eletrônicos, membranas separadoras de gases, revestimentos anticorrosivos. A polimilina (PANI) é um dos polímeros mais investigados por apresentar baixo custo dos monômeros, facilidade de processamento, boa estabilidade química em condições ambientais e atingir altos graus de condutividade elétrica.

O objetivo deste trabalho consiste na caracterização de blendas de PANI dopada com ácido cânforsulfônico (CSA) e poli metil metacrilato (PMMA), solubilizados em *m*-cresol, agindo como dopante secundário. Para isso, testes foram feitos com diferentes proporções de CSA na PANI, e também com diferentes proporções de PANI no PMMA.

A PANI é formada a partir da anilina, com reação de polimerização simples. Foi sintetizada pela oxidação do monômero, com persulfato de potássio em meio ácido. Verificou-se que existe uma dependência da concentração do agente dopante da polianilina, quando da constituição da blenda. A relação PANI/CSA influi drasticamente na conformação organizacional do arranjo molecular na blenda e conseqüentemente no limite de percolação. Na concentração molar PANI/CSA (6:1), em blendas de 6% e 5% de PANI em PMMA, por exemplo, não foi observada condutividade elétrica. Através da microscopia eletrônica foi observado que as moléculas de PANI ficam aglomeradas, não atingindo o limite de percolação (que é muito mais baixo, aproximadamente 1% de PANI em PMMA, para relações de PANI/CSA em torno de (1:0,2)).

### CROSS-LINKED POLYMER - DYE FILMS FOR NONLINEAR OPTICS APPLICATIONS

PAULO ANTÔNIO RIBEIRO  
Departamento de Física, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa, 2825 Monte Caparica, Portugal  
DÉBORA TEREZIA BALOGH, JOSÉ ALBERTO GIACOMETTI

*Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, CP 369, 13560-970 São Carlos, SP, Brasil*

The homopolymer poly(2-hydroxyethyl-methacrylate) was used as polymer matrix to support the high nonlinear hyperpolarizability azo dye 4-[N-ethyl-N-(2-hydroxyethyl)amino-4'-nitroazo-benzene commercially known as dispersive red 1 (DR1). The dipolar dye was covalently bounded to the polymer backbone by using an urethane crosslinking agent having isocyanate ending groups. Solutions were prepared by dissolving the polymer, dye and crosslinking compound in N,N dimetilformamide. Polymer films, of the order of few microns, were prepared by spin coating the solution onto glass substrates. In order to obtain a nonsymmetrical system for enhance and stable second order nonlinear properties, the polymer was simultaneously poled and heated in a corona triode setup allowing both dipole orientation and crosslinking. The dipole orientation was monitored by observing the electrochromic response on the UV-vis absorption band before and after poling. Results showed that the dye group orientation in the polymer network depends on the poling temperature and on the chemical composition of the films. The efficiency of dipole orientation is improved when films are poled at temperatures between 150 °C and 160 °C. It is also dependent on the content of dye molecules and crosslinking agent contents.

#### **Desenvolvimento de um sistema experimental para determinação de constantes dielétricas não lineares em polímeros.**

FLÁVIO PANDUR ALBUQUERQUE CABRAL, JOSÉ ALBERTO GIACOMETTI

*USP - Instituto de Física de São Carlos*

EVERTON LEANDRO NUBIATO, NERI ALVES

*UNESP - Presidente Prudente*

A determinação da constante dielétrica é fundamental para o estudo de propriedades elétricas de materiais e atualmente existem vários métodos e equipamentos comerciais para tal fim. No entanto, alguns materiais apresentam polarizabilidade de 2ª e 3ª ordem, como por exemplo os polímeros ferroelétricos polifluoreto de vinilideno [PVDF] e seus copolímeros com trifluoretileno [P(VDF-TrFE)]. Nestes casos, a determinação destas constantes fornece subsídios para estudar a transição ferro-paraelétrica e a dinâmica de orientação dos dipolos moleculares. Ressalta-se que não há sistemas comerciais para tal finalidade. Em geral, as medidas de constantes dielétricas de 2ª e 3ª ordem são feitas em função de um campo elétrico aplicado na amostra. Por esta razão usa-se uma tensão elétrica de baixa frequência (<1Hz) modulada por um sinal de alta frequência (100Hz a 10kHz) e de pequena amplitude (para a medida das constantes dielétricas). Para o PVDF, com 12  $\mu\text{m}$  de espessura usam-se tensões de polarização de até 2 KV e tensões de modulação da ordem

de volts. A montagem experimental construída consiste basicamente de: sintetizador de função Keithley 3940 para geração da tensão modulada, amplificador de alta tensão Trek 610C e microcomputador padrão AT. O micro é usado para aquisição dos dados através de uma interface multifuncional da Advantech (PCL-818 HG). Também faz parte do sistema o software para controle dos equipamentos (através de interface GPIB e da placa PCL-818) e para o cálculo das constantes dielétricas usando o método de transformada de Fourier. São apresentados os resultados obtidos para amostras do polímero PVDF, a precisão, o intervalo de operação e dificuldades encontradas durante a sua implementação.

#### **Estudo Raman do modo D-LAM em materiais eletrólitos poliméricos**

RAIGNA AUGUSTA DA SILVA, GLAURA GOULART

SILVA, MARCOS ASSUNÇÃO PIMENTA

*Universidade Federal de Minas Gerais*

Estudos por espalhamento Raman de eletrólitos poliméricos feitos na região de baixa frequência tem demonstrado a presença de uma banda abaixo de 300  $\text{cm}^{-1}$  correspondendo ao modo acústico longitudinal desordenado (D-LAM) que reflete as vibrações do esqueleto da cadeia polimérica; ou seja, à superposição dos modos de vibração de cisalhamento dos grupos CC e CO e do modo de torção do grupo CC. Esta banda serve como sonda nas mudanças conformacionais em polímeros.

Os sistemas foram preparados dissolvendo-se sais percloratos  $\text{LiClO}_4$  e  $\text{NaClO}_4$  nas matrizes poliméricas poli(etileno glicol), PEG ( $M_w = 200, 400$  e  $6000$ ), poli(propileno glicol), PPG ( $M_w = 425$ ) e o polidioxolano, PDXL ( $M_w = 3000$  e  $10000$ ); numa série de razão molar de oxigênio por metal  $N = [O/M] = 30$  a  $1.5$  à temperatura ambiente. Nos espectros Raman de todos os compostos observamos bandas relativas ao modo D-LAM, que foram ajustadas por somatória de Lorentzianas. No PEG de  $M_w = 200$  observamos o estreitamento das bandas com o aumento da concentração de sal. No PEG de  $M_w = 400$  este estreitamento é menos significativo. O mesmo acontecendo para o PPG de  $M_w = 425$ . Já no PEG de  $M_w = 6000$ , observamos o alargamento da banda com a introdução do sal para concentrações  $N \geq 7.5$ ; em seguida, novamente o estreitamento das bandas para  $N \leq 6$ , indicando uma mudança na cristalinidade do sistema. Já que uma banda mais estreita demonstra um sistema mais cristalino; enquanto uma banda mais larga indica um sistema mais amorfo. No caso do PDXL, para concentrações entre  $30 \leq N \leq 15$  observa-se o estreitamento das bandas; e logo, em seguida, para  $N \leq 10$  um novo alargamento.

### AVALIAÇÃO DO VOLUME LIVRE EM MATERIAIS POLIMÉRICOS POR ESPECTROSCOPIA DE ANIQUILAMENTO DE PÓSITRONS

ARILZA DE OLIVEIRA PORTO, WELLINGTON

FERREIRA DE MAGALHÃES

UFMG

CLELIO THAUMATURGO, ANDRÉ LUIZ PINTO

IME

A aniquilamento de pósitrons na matéria condensada proporciona uma forma única para obter informações sobre a estrutura interna do material. Neste sentido, a distribuição do tempo de vida dos pósitrons permite conhecer o ambiente em que este se encontra. Os pósitrons podem capturar elétrons e formar um átomo de positrônio, cuja vida será maior no vácuo do que dentro da matéria. Assim, monitorando a vida deste através dos fótons de raio gama emitidos, é possível inferir sobre as vacâncias presentes no material. Recentemente, esta técnica vem sendo bastante utilizada para avaliar o volume livre presente na parte amorfa de materiais poliméricos. Assim, a partir da distribuição do tempo de vida do pósitron nos polímeros, a componente relativa à vida do orto-positrônio (o-Ps) deve ser separada. Este tempo pode ser diretamente relacionado com o raio do volume livre presente. Tal procedimento permite avaliar a influência de tratamentos térmicos no raio médio do volume livre, bem como na distribuição deste. Este parâmetro microestrutural está intimamente relacionado com as propriedades mecânicas do material, particularmente com o comportamento viscoelástico do mesmo e com o comportamento do material sob altas taxas de sollicitação. Neste trabalho, foi realizado o recozimento de chapas de policarbonato sob diferentes temperaturas abaixo de  $T_G$  ( $1^\circ\text{C}$  a  $140^\circ\text{C}$ ), variando-se o tempo de permanência nas mesmas (24 a 48 horas). Sob estas condições, foi observado a variação do tempo de vida do o-Ps, em torno de 2,039 ns, o que equivale a um raio médio de 5,487 Å para o volume livre. Foi possível, assim, acompanhar a evolução deste sob diferentes condições de tratamento. Posteriormente, serão realizados ensaios dinâmico-mecânicos (DMTA) e o ensaio balístico deste material, o que possibilitará a correlação entre o volume livre e o comportamento dinâmico do material.

### CONSTRUÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE DISPOSITIVOS ELETROLUMINESCENTES À BASE DE POLÍMEROS CONJUGADOS

ANTONIO VAZ DE ALBUQUERQUE CAVALCANTI

Depto. de Eletrônica e Sistemas / UFPE

CELSON PINTO DE MELO

Depto. de Física / UFPE

O desenvolvimento de dispositivos eletroluminescentes à base de oligômeros e polímeros orgânicos tem experimentado crescimento explosivo nos últimos anos,

pela possibilidade de reunir em um mesmo dispositivo características promissoras como grande flexibilidade mecânica e ajuste de frequência da luz emitida. Por construção, nesses LEDs o material orgânico é depositado entre dois eletrodos metálicos que atuam na injeção de cargas de diferentes sinais. Nesta comunicação apresentamos resultados iniciais para a caracterização elétrica e do espectro de LEDs formados pela evaporação de alumínio sobre um filme de oligômeros de tiofeno depositada sobre uma camada de vidro condutor (ITO). Os portadores positivos e negativos, injetados respectivamente a partir da junção com o ITO e o alumínio, ao migrarem no interior do material orgânico terminam por decair radiativamente. Diversos derivados do tiofeno, seja oligômeros (como o tertiofeno e o pentatíofeno) ou polímeros (poli-tertiofeno e poli-hexadeciltiofeno) foram utilizados para formar a camada ativa, depositada por spin-coating sobre o substrato de ITO. Dificuldades técnicas de deposição dessas camadas foram solucionadas através de um estudo quimiométrico preliminar que nos permitiu melhor controle da espessura e da uniformidade do filme polimérico. Resultados preliminares nos mostram uma curva tensão versus corrente com característica retificadora, com tensão de operação em torno de 5 volts com corrente de aproximadamente 2 miliampères para o dispositivo com camada ativa de pentatíofeno. Serão ainda apresentados os primeiros resultados para a caracterização do espectro luminescente desses dispositivos.

(Apoio: FINEP, CNPq, FACEPE e BNB)

### ESTUDO DA CRISTALIZAÇÃO DO COPOLÍMERO P(VDF-TrFE) A PARTIR DA FUSÃO

NERI ALVES

Faculdade de Ciências e Tecnologia - UNESP - Presidente Prudente

JOSÉ ALBERTO GIACOMETTI

Instituto de Física de São Carlos - USP - São Carlos

O polifluoreto de vinilideno, PVDF, e seus copolímeros com trifluoretileno, P(VDF-TrFE), são materiais interessantes devido às suas propriedades ferroelétricas. A dinâmica da polarização ferroelétrica é objeto de numerosos estudos pois apresenta transição de fase do tipo ferro-paraelétrica e possui cristalinidade dependente da história térmica da amostra. Trabalhos recentes mostram que as medidas de DSC no P(VDF-TrFE) apresentam dois picos (além da fusão cristalina) cujas intensidades e posições dependem da história térmica e da composição molar da amostra. A presença destes picos é interpretada por alguns autores como sendo procedente da transição ferro-paraelétrica em domínios de diferentes tamanhos. Outros, interpretam os picos como sendo devido à existência de duas

fases ferroelétricas distintas. Neste trabalho mostra-se que usando a técnica de DSC e variando-se a velocidade de resfriamento durante a cristalização, é possível controlar o aparecimento dos dois picos em amostras obtidas a partir da fusão. Amostras de copolímeros nas composições 60/40 e 70/30 aquecidas até a fusão e cristalizadas rapidamente (quenched) apresentam apenas o pico que ocorrem em temperaturas mais elevadas. As cristalizadas muito lentamente (0.25C/min) apresentam somente o pico em menor temperatura mas com maior definição, mostrando melhor organização cristalina. Apresenta-se, neste trabalho, um estudo experimental criterioso da dependência do aparecimento dos picos com a velocidade de tratamento e com a história térmica de cada amostra. Uma possibilidade para explicar estes resultados é assumir a existência de dois tipos de domínios ferroelétricos. A partir destes resultados é possível preparar amostras que apresentem distintamente um ou outro domínio ferroelétrico e estudar qual a forma de preparar as amostras é mais eficiente com respeito às propriedades ferroelétricas.

#### RECOBRIMENTO CONDUTOR EM FILMES DE PET

ALDO ELOIZO JOB

USP

LUIZ HENRIQUE CAPPARELLI MATTOSO

CNPDIA/EMBRAPA

O potencial tecnológico de polímeros condutores elétricos, dentre os quais se destaca a polianilina (PANI), tem recebido grande interesse, devido às propriedades promissoras destes polímeros, tais como: facilidade de dopagem, estabilidade ambiental no estado dopado, baixo custo do monômero, solubilidade, processabilidade associado a condutividade elétrica, etc. Suas aplicações tecnológicas mais importantes são em dispositivos de junções para formar diodos e heterojunções em barreiras tipo Schottky, proteção contra corrosão de metais, eletrodos em baterias recarregáveis, eliminação de cargas estáticas, recobrimento condutor de superfícies isolantes, etc. O objetivo deste trabalho foi o recobrimento de filmes de Poli(tereftalato de etileno) (PET) com polianilina condutora pelo método de polimerização química "in situ". A caracterização elétrica foi feita medindo a condutividade pelo método de quatro pontas, calorimetria diferencial de varredura (DSC), análise termo-dinâmico-mecânica (DMTA) e corrente de despolarização termo-estimulada (TSDC). O compósito obtido apresenta boa qualidade, adesão e uniformidade da PANI no PET. A condutividade elétrica obtida para estes materiais foi de 2,2 S/cm que está dentro dos níveis encontrados na literatura para polianilina pura. Quanto ao  $T_g$ , as técnicas de DSC e DMTA forneceram um valor de cerca de 125°C, enquanto o TSDC é de aproximadamente de 115°C.

Observou-se também que a PANI dopada ou desdopada não interfere na estrutura cristalina do substrato de PET que apresenta pico de fusão nas análises por DSC e padrões de difração de raios-X, característicos da estrutura cristalina do PET. O efeito das condições de preparação do compósito na qualidade do recobrimento condutor será discutido.

#### BLENDAS CONDUTORAS DE POLIANILINAS COM POLIETILENO DE ULTRA ALTO PESO MOLECULAR

GLAUCO ROGÉRIO VALENCIANO

UFSCar

ALDO ELOIZO JOB

USP

LUIZ HENRIQUE CAPPARELLI MATTOSO

CNPDIA/EMBRAPA

No campo dos polímeros condutores, um dos principais desafios tem sido a preparação de blendas destes com polímeros comerciais. Estas blendas são promissoras pois possibilitam a preparação de materiais poliméricos com condutividade em uma larga faixa com a vantagem de ter associado a excelente processabilidade e resistência mecânica de polímeros convencionais de alto desempenho. Desta forma, o objetivo deste trabalho foi o de desenvolver a preparação de blendas poliméricas de polietileno de ultra alto peso molecular (UHMW-PE) e polianilina (PANI) dopada com ácidos protônicos funcionalizados. Estes dopantes tem como função tanto dopar a polianilina como promover a solubilidade em vários solventes orgânicos. A obtenção de filmes com boa qualidade, processabilidade e reprodutibilidade só foi possível depois de um estudo detalhado para escolha de dopantes (ácido canforsulfônico, ácido dodecilbenzenosulfônico, ácido toluenosulfônico e ácido clorídrico) que poderiam ser utilizados, permitindo uma maior condutividade elétrica, e solubilidade nos solventes desejados (xileno, decalina e m-cresol) para o sistema em questão. Os melhores resultados foram obtidos com PANI dopada com CSA, cuja condutividade aumenta com o tempo e temperatura de dopagem, indicando que a cinética de dopagem é um fator importante a ser considerado. Os filmes obtidos foram caracterizados por medidas de condutividade elétrica (método de quatro pontas), calorimetria diferencial de varredura, microscopia eletrônica de varredura e difração de Raios-X. A condutividade elétrica aumenta significativamente com o aumento do conteúdo de PANI-CSA na blenda. Um baixo limiar de percolação é observado para estes sistemas que atingem níveis de condutividade da ordem de  $10^{-6}$  S/cm e  $10^{-2}$  S/cm, respectivamente para blendas contendo apenas 1% e 5% de polianilina dopada.

### STRUCTURAL STUDIES ON BLENDS OF PVDF AND DOPED POLY(O-METHOXYANILINE)

LUIZ FRANCISCO MALMONGE

*Depto. de Física e Química/UNESP - Ilha Solteira (SP)*

LUIZ HENRIQUE CAPPARELLI MATTOSO

*CNPDIA/EMBRAPA - São Carlos (SP)*

Blends of poly(o-methoxyaniline)-POMA and poly(vinylidene fluoride)-PVDF exhibiting electrical conductivity with low contents of conducting polymer were studied by x-ray diffraction, scanning electron microscopy, thermal gravimetric analysis and conductivity measurements. Flexible, free-standing films were prepared from solution for these blends in optimized conditions of temperature, solvent and doping. POMA doped with toluenesulfonic acid (TSA) and PVDF were both dissolved in N,N-dimethylacetamide (DMA), at room temperature and 70°C, respectively. The solutions were mixed at various compositions of POMA-TSA prior to casting. The blends presented a transition in morphology from spherulites, peculiar of pure PVDF, to fibrils (characteristic of polyanilines) for increasing POMA-TSA content. The conductivity of blends containing 25% of POMA remained practically unchanged in the range from  $10^{-3}$  to  $10^{-4}$  S/cm for long periods (500 hours), even after treatment at temperatures of 70°C and 90°C. Thermal analysis demonstrated that no mass loss was observed for these blends up to temperatures as high as the melting point of PVDF. The crystalline structure characteristic of PVDF is practically unaffected by the presence of up to 25% of POMA-TSA in the blend. For higher POMA-TSA contents the crystalline diffraction peaks of the conducting polymer begin to appear being of PVDF vanish. These results are consistent with the morphological transition detected. The effect of blending and thermal treatment on the structure and morphology of the polymers is discussed.

### POLYURETHANE B<sub>4</sub>:Sr:Ca:Cu:O CERAMIC: A CONDUCTING COMPOSITE

WALTER KATSUMI SAKAMOTO, DARCY HIROE FUJII KANDA, CLÁUDIO LUIZ CARVALHO

*Depto. de Física e Química/UNESP - Ilha Solteira (SP)*

Technological applications have motivated the study on blends and composites as an alternative to conventional materials, also in the field of conducting materials. The possibility to combine the conductivity of the conducting polymers with the processability, mechanical strength and other properties of conventional polymers have been highly promising to obtain the composite of polyurethane (PU) and conducting ceramic powder based on B<sub>4</sub>:Sr:Ca:Cu:O. Flexible and conductive composites were obtained in a thin film form (about 150 μ) by spin-coating method after mixing the superconducting ceramic powder with a polyol based on castor oil and

a diphenylmethane-4-4-diisocyanate (MDI). The films are prepared on glass substrate and dried at room temperature for 24 h. After, the samples are immersed in pure water for 6 h to remove it from substrate. The two-probe ac conductivity curves for this composite with just 10% in weight of ceramic was carried out in a LF Impedance Analyser Model 4192A from Hewlett Packard. The value of conductivity is about  $10^{-7}$  S/cm from 0.01 to 10 kHz, increasing about 10 order of magnitude compared with the pure polyurethane, showing that this material deserve a detailed study, using various compositions. Due the fact of this ceramic increase the electrical conductivity while the temperature decrease, will be very interesting also to study this new composite as function of temperature. Thermal analysis also must be done to verify the behaviour of the composite related with the pure polyurethane. Other important property of the PU is the biocompatibility, given the perspective to obtain a biosensor.

Acknowledgements: to Fundação Banco do Brasil - F.B.B. and FAPESP.

### DESVIO DO COMPORTAMENTO ÔHMICO DE FILMES DE POLIPIRROL EM BAIXAS TEMPERATURAS

FRANCISCO L. DOS SANTOS, CELSO P. DE MELO

*Departamento de Física - Universidade Federal de Pernambuco*

Modelos tipo sóliton ou pólaron, baseados na existência de defeitos conformacionais móveis, têm sido utilizados com sucesso para a explicação do transporte de carga unidimensional ao longo de cadeias poliméricas isoladas. No entanto, embora mecanismos alternativos e complementares devam necessariamente estar envolvidos nos processos de condução entre fibras (ou cadeias) presentes em filmes poliméricos reais, permanece não-esclarecida a questão dos limites de validade de cada um desses modelos. Na tentativa de discutir este problema, na presente comunicação apresentaremos uma análise dos resultados obtidos em temperaturas na faixa 300-24K para o comportamento das curvas de corrente versus tensão ( $V \times I$ ) de filmes de polipirrol preparados eletroquimicamente, e exibindo diferentes graus de dopagem. Nossos resultados indicam que, enquanto nas condições ambientes (em acordo com resultados anteriores da literatura) as curvas  $V \times I$  refletem um comportamento ôhmico para o material, nossas amostras exibem para temperaturas  $T < 100K$  um crescente desvio do usual comportamento linear. Esse desvio parece aumentar linearmente com o abaixamento da temperatura, a curva  $V \times I$  correspondente apresentando um joelho próximo a zero volts e tornando-se mais linear para tensões altas. Os resultados obtidos serão discutidos com base no modelo de Poole-Frenkel para materiais formados microscopicamente por grânulos condutores separados por regiões isolantes. Essa análise faz parte

de um estudo mais amplo que desenvolvemos, à luz do modelo de Sheng para o transporte de carga em materiais amorfos e que leva em conta a morfologia das amostras consideradas, para o comportamento do tensor condutividade de filmes poliméricos como função da temperatura. (Apoio: CNPq, FINEP, FACEPE)

**MEDIDAS DE CONDUTIVIDADE ELÉTRICA PARA BLENDDAS DE POLIURETANA COM POLI(O-METOXIANILINA) EM FUNÇÃO DA FREQUÊNCIA**

DARCY HIROE FUJII KANDA, JOSÉ ANTONIO MALMONGE, WALTER KATSUMI SAKAMOTO

*Depto. de Física e Química/UNESP - Ilha Solteira (SP)*

Foram obtidos filmes flexíveis e com alta resistência mecânica de blendas de poliuretana com poli(o-metoxianilina) - POMA. As blendas foram preparadas, dissolvendo a POMA em N,N-dimetilformamida - DMF, e misturadas na proporção desejada com a poliuretana derivada do óleo de mamona PU (obtido a partir da reação de um poliál hidroxilado, proveniente do óleo de mamona com um pré-polímero, resultante de um poliál com diisocianato, MDI). A dopagem da blenda foi feita, após a dissolução da POMA (não dopada) em DMF, pela adição de uma quantidade de ácido (no caso, o p-tolueno sulfônico - TSA) suficiente para se obter o nível máximo de dopagem que é de 50%. Os filmes de blendas foram preparados por "casting" em lâminas de vidro. Foram realizadas medidas de condutividade real em função da frequência no intervalo de 5Hz até 13 Mhz à temperatura constante. Os resultados mostraram que acima de 10 kHz a condutividade ( $\sigma$ ) obedece a relação  $\sigma$  proporcional à  $\omega^s$ , sendo que o expoente só varia com o conteúdo de polímero condutor na blenda. Para as blendas com conteúdo acima de 10% de POMA no estado dopado, nota-se que a condutividade não varia com a frequência para valores abaixo de 1 kHz. A condutividade elétrica dc alcançada para a blenda 90/10 no estado dopado foi da ordem de  $10^{-10}$  S/cm, que é cerca de 7 ordens de grandeza maior do que a condutividade do filme de PU puro.

Apoio Financeiro: Fundação Banco do Brasil - F.B.B.

**ABSORPTION SPECTRA OF THIN FILMS OF POLY(O-METHOXYANILINE) IRRADIATED BY X-RAY**

JOSÉ ANTONIO MALMONGE, MILTON SOARES DE CAMPOS

*Depto. de Física e Química/UNESP - Ilha Solteira (SP)*

LUIZ HENRIQUE CAPPARELLI MATTOSO  
*CNPDIA/EMBRAPA - São Carlos (SP)*

The absorption spectra of thin film of poly(o-methoxyaniline) (POMA), chemically synthesized, coated on quartz slides by dip coating from chloroform so-

lution were measured as a function of irradiation dose. The UV-Vis-NIR absorption analysis showed that unirradiated films (emeraldine base) presents two absorption peaks at about 320 nm and about 620 nm assigned respectively to  $\pi - \pi^*$  and excitonic transitions. Upon irradiation, under 50 % RH, we have observed that the intensity of the first (about 320 nm) and second (about 620 nm) peaks decrease while the intensity of two new peaks at 840 nm and 430 nm increase as function of irradiated dose. The same behavior is found when polyanilines are conventionally doped with inorganic acids. These two new absorption bands are consistent with an increase in the mobility of the charge carriers, i.e. doping of the polymers to the conductive regime. After 230 kGy of radiation dose, we observed that absorption at 620 disappeared and the absorption at 840 nm and 430 nm had reached the maximum. The irradiated film was dedoped with 0.1M NH<sub>4</sub>OH and its spectra of absorption was similar to unirradiated film. This same reversible process occurs to polyanilines doped with inorganic acid. The electrical conductivity measured by four probe increases from about  $10^{-10}$  S/cm (unirradiated films) to  $10^{-10}$  S/cm (irradiated films). The conductivity reached for polyanilines was 0.5S/cm. We have also observed that conductivity increases as a function of radiation dose and humidity level, and that water plays an important role on doping induced by X-ray radiation.

**ESTUDO FOTOTERMICO DE FILMES DE BLENDDAS CONDUTORAS**

WASHINGTON LUIZ DE BARROS MELO, J. A.

MALMONGE

*UNESP - Ilha Solteira*

LUIZ HENRIQUE C. MATOSO

*Embrapa - S. Carlos*

A Técnica Fototérmica - Fotopiroelétrica - foi usada para estudar o comportamento das grandezas térmicas - difusividade e condutividade versus conteúdo de polímero condutor nas blendas. Essa técnica tem como princípio físico a difusão de calor através da amostra. A amostra recebe luz e a converte em calor. O calor, assim gerado, se difunde através da amostra e alcança um sensor piroelétrico que está em contato íntimo com a face não iluminada. O sensor piroelétrico usado foi um filme fino de PVDF na fase  $\beta$ , polarizado e metalizado em ambas as faces. Esse sensor fornece uma tensão proporcional a variação de temperatura com o tempo em suas faces. Esta variação é devido ao calor gerado na amostra e se difunde até ele. As blendas do copolímero fluoreto de vinilideno/trifluoretileno (VDF)/TrFE (razão molar 60/40) com a Poli(o-metoxianilina) (POMA) foram preparadas em solução em várias composições e os filmes foram obtidos por casting. Os resultados preliminares demonstram que a técnica fototérmica é uma ferramenta muito útil para analisar tais amos-

tras. Foi observado que nas composições acima de 20% de POMA na blenda a difusividade e a condutividade térmicas tendem a se estabilizarem. Para alta composição (50%) a difusividade térmica ficou acima de  $10^{-7} \text{m}^2/\text{s}$  e a condutividade térmica foi cerca de  $0,43 \text{W}/\text{mK}$ , enquanto para 5% na composição a difusividade e a condutividade térmica ficaram em cerca de  $6 \times 10^{-8} \text{m}^2/\text{s}$  e próximo de  $0,13 \text{W}/\text{mK}$ , respectivamente. Apoio: FAPESP/93-3480-8

#### DETERMINAÇÕES DAS TRANSIÇÕES DE FASE EM PPS DOPADO COM FTALOCIANINA DE COBRE

EDINILTON MORAIS CAVALCANTE

*Depto. de Física e Química/UNESP - Ilha Solteira (SP)*

O poli(sulfeto de p - fenileno)(PPS) comercial é obtido na forma de pó pela Philips Petroleum Co como o nome de Ryton, sem presença de qualquer aditivo ou carga. Para a obtenção de filmes com uma maior área útil, foram empregadas placa de vidro, cuidadosamente tratadas com solução sulfocrômica ( $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7 + \text{H}_2\text{SO}_4$ ) por duas horas, seguida de lavagem com KOH e água

destilada, pois a presença de quaisquer impurezas provocava imperfeições superficiais no filme. As medidas de DSC com filmes de PPS foram feitas usando-se um aparelho DSC - 910 acoplado a um analisador térmico V2 2A Dupont 9900. A velocidade de aquecimento foi de  $10^\circ\text{C}/\text{min}$ , partindo da temperatura ambiente e chegando até  $300^\circ\text{C}$ , cerca de  $15^\circ$  acima do ponto de fusão do PPS. Um fluxo de nitrogênio foi mantido durante a medida, para remover qualquer substância volátil que poderia estar presente. Os resultados para o PPS mostram que o ponto de fusão variou de  $285 - 295^\circ\text{C}$ . Na caracterização completa das transições de fase do polímero, observou-se a inflexão característica  $T-g = 87,2^\circ\text{C}$ , uma cristalização exotérmica  $T-e = 126,8^\circ\text{C}$  e a fusão do polímero em  $T-m = 282^\circ\text{C}$ , indicada por um pico endotérmico. Essas medidas mostraram-se bastante repetitivas, pois uma série de amostras analisadas, apresentaram os mesmos resultados. Nas medidas de corrente termo-estimulada, foram observados picos de corrente muito bem definidos, relacionados com as transições de fase do PPS.

## SISTEMAS COMPLEXOS: POLÍMEROS E FLUÍDOS (Fluídos: Transição de Fase)

SISTEMAS COMPLEXOS:  
POLÍMEROS E FLUÍDOS  
(Fluídos: Transição de Fase) –  
12/06/97

### IN SEARCH OF A CHIRAL SMECTIC LIQUID CRYSTAL STATE WITH A MACROSCOPIC SPONTANEOUS FERROELECTRIC POLARIZATION

PIERRE TOLÉDANO\*, ANTONIO MARTINS FIGUEIREDO NETO

*Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 66.318, CEP 05315-970, São Paulo, SP, Brasil*

The possibility of obtaining in a liquid crystal phase a macroscopic ferroelectric polarization in the absence of external field is of considerable technological interest, and has been discussed theoretically for some time. There exist two necessary requirements currently assumed for the existence of a liquid crystal state: 1) It has to be stable with respect to a symmetry breaking mechanism from its parent state. 2) Its configuration must be compatible with the property of the medium to be invariant against sign reversal  $\vec{n} \rightarrow -\vec{n}$  of the director. We show that longitudinal ferroelectric smectic states are incompatible with the first of these conditions, i.e. they are unstable states. By contrast we demonstrate theoretically the existence of a stable smectic configuration, of triclinic symmetry  $C_1$ , which possesses a spontaneous component of the ferroelectric polarization  $P_z$  along the direction perpendicular to the smectic layers. This configuration is stable with respect to the order-parameter symmetry associated with the  $Sm A^* - Sm C^*$  transition, but not with the property of the medium to be invariant against the  $\vec{n} \rightarrow -\vec{n}$  transformation. The specific features and possible realization of this ferroelectric smectic phases, which we term smectic  $C_P^*$  ( $Sm C_P^*$ ), are discussed. \* on leave from the University of Picardie, Amiens, France

### NÃO-UNIVERSALIDADE NA SEPARAÇÃO DE FASES EM FLUIDOS BINÁRIOS.

GERARDO MARTÍNEZ, JOSÉ ROBERTO IGLESIAS

*Instituto de Física, UFRGS, Porto Alegre, RS*

SEBASTIÁN GONÇALVES

*Facultad de Física, PUC, Santiago, Chile*

Neste estudo apresentamos resultados numéricos obtidos por simulação com dinâmica molecular para o processo de separação de fases por decomposição "spino-dal" em fluidos binários com concentração crítica  $\phi = \frac{1}{2}$  (50% de átomos tipo  $A$  e 50% de átomos tipo  $B$ ) em função do tempo. Tais sistemas geralmente obedecem uma lei de escala universal assintótica no tempo, caracterizada por expoentes de crescimento de domínios, dada por  $R(t) = k(\phi)t^\alpha$ . Estudamos o comportamento destes expoentes para diversos potenciais de pares tipo Lennard-Jones, com interação reduzida entre moléculas distintas,  $V_{ij}(r) = 4\varepsilon_{ij}[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^n]$ , onde  $n$  pode ser 3 ou 6 e  $\varepsilon_{AA} = \varepsilon_{BB} = 4\varepsilon_{AB}$ . Estudamos o caso bidimensional por ser mais fácil computacionalmente, porém destacamos que obtivemos aqui, pela primeira vez, resultados numéricos do estágio final do processo de separação usando potenciais realistas, que consideram a parte atrativa da interação. Para um sis-

tema com  $N = 19600$  partículas, uma densidade global  $\rho\sigma^2 = 0.4$  e para diversas temperaturas abaixo da linha de coexistência da fase homogênea, encontramos que os expoentes de crescimento  $\alpha$  não seguem a lei de escala universal que corresponderia à classe de universalidade a qual pertencem estes sistemas. Eles dependem, porém, da temperatura e do potencial de interação usado na simulação. Damos uma interpretação para isto em termos dos modos hidrodinâmicos presentes na simulação e da existência de dois comprimentos de escala no processo de separação de fases do sistema a baixas temperaturas, um relacionado com o tamanho médio dos domínios, tipo  $A$  ou tipo  $B$ , e o outro relacionado com os "super-domínios" que se formam por agregação de clusters. Isto último é consequência da parte atrativa do potencial de pares, considerada neste trabalho pela primeira vez. Mostramos a validade desta afirmação com base nos 'snapshots' da configuração final na simulação. Estudos do caso assimétrico  $\varepsilon_{AA} \neq \varepsilon_{BB} \gg \varepsilon_{AB}$  estão em andamento.

### Role of decanol in a sequence of phase transition in lyotropic liquid crystals

LIA QUEIROZ DO AMARAL

*Instituto de Física, Universidade de São Paulo*

OURIDES SANTIN FILHO

*Departamento de Química, Universidade Estadual de Maringá, Brasil*

The addition of alcohol to surfactant/water solutions enriches the polymorphism of the system and leads to the appearance of nematic phases. Also "non-classical" (defective) lamellar and hexagonal phases may occur. In this paper we discuss how the addition of decanol to the sodium dodecyl (lauryl) sulfate (SLS) /water system promotes a gradual change in the micellar form, because decanol induces forms with lower curvature(1). The phase sequence for a fixed water/SLS ratio ( $M_w = 39.4$ ) observed by polarized optical microscopy with increasing decanol/SLS ratio is: isotropic (I) - hexagonal (H) - nematic cylindrical (Nc) - nematic discotic (Nd) - lamellar (L). The gradual change in micellar form is followed by X-ray diffraction. The size of the micellar objects depends on the inter-micellar interactions, but the form is determined by the decanol/SLS ratio. A phenomenological model for the micellar elastic bending energy (2) is used to interpret the changes of form in terms of the molecular surfactant parameter  $p = v/al$ , where  $v$  and  $l$  are the volume and effective length of the paraffin chain and  $a$  is the polar head area at the polar/apolar interface. The hypothesis of decanol segregation in the lower curvature regions is also analysed in detail, leading to a complete model for the changes from ellipsoidal shape to spherocylinder, square tablet, and defective lamellae.

(1) W.M.Gelbart, W.E.McMullen, A.Masters, A.Ben-Shaul, *Langmuir* 1, 101 (1985).

(2) L.Q.Amaral, O.Santin Filho, G. Taddei and N.Vila-Romeu (submitted).

### ESTUDOS CALORIMÉTRICOS EM BICAMADAS

ÁNGEL ALBERTO HIDALGO, ELISABETH ANDREOLI DE OLIVERA

*Univ. de São Paulo*

Os fosfolipídios são moléculas anfífilas que apresentam uma cabeça polar e duas cadeias hidrocarbonadas altamente hidrofóbicas. É conhecido que estas formam a base das membranas celulares. Quando dissolvidas em água, organizam-se em estruturas multilamelares, com diferentes tipos de empacotamento no interior das bicamadas. Neste trabalho apresentamos estudos de calorimetria diferencial de varredura (DSC) para o estudo de transições de fase no sistema DMPC (Dimiristoyl-fosfatidil-colina) e água. Utilizando uma velocidade de varredura igual a  $20^\circ\text{C}/\text{h}$  e cadinhos que impedem a

perda de água por evaporação, identificamos a seguinte sequencia de fases;  $L_{\beta'} \rightarrow P_{\beta'} \rightarrow L_{\alpha}$  para uma mistura contendo 35% de água em peso. Conforme a temperatura aumenta, o ordenamento das cadeias hidrocarbonadas e a estrutura das camadas muda. Na fase  $L_{\beta'}$  temos as cadeias esticadas com uma inclinação (tilt) com respeito a normal das camadas. A fase  $P_{\beta'}$ , ou fase "riple", apresentam uma ondulação nas camadas. Na fase  $L_{\alpha}$  as camadas são planas com as cadeias num estado desordenado. Observamos que o calor ( $\Delta H$ ) requerido para passar da fase  $L_{\beta'}$  a fase  $P_{\beta'}$  é muito menor que aquele necessario para a transição  $P_{\beta'} \rightarrow L_{\alpha}$ . As temperaturas de transição são  $10,3^\circ\text{C}$  para a primeira transição e  $20,9^\circ\text{C}$  para a segunda e envolvem uma variação de entalpia  $\Delta H$  igual a  $4,77\text{J/g}$  e  $31,07\text{J/g}$  respectivamente. Temos indicações da existência de mais duas fases intermediárias  $L_{\beta'}$ , já identificadas<sup>[1]</sup> por espalhamento de Raios-X. Estamos investigando a existência de fases intermediárias  $P_{\beta'}$ , já previstas teoricamente<sup>[2]</sup> a partir da teoria de Landau, até agora sem êxito, embora a mudança de ordenamento seja semelhante a aquelas encontradas nas fases  $L_{\beta'}$  e o limite de detecção, imposto por ruídos no detector, seja de  $5\text{mJ/g}$ .

[1] G. S. Smith, E. B. Sirota, C. R. Safinya, N. A. Clark, *Phys. Rev. Lett.* 60, 830 (1988).

[2] C. M. Chen, T. C. Lubensky, F. C. McKintosh, *Phys. Rev. E* 51, 504 (1995).

### Estudo de Cristais Líquidos Liotrópicos por meio da Técnica de Z-Scan

S. L. GÓMEZ, F. L. S. CUPPO, M. MURAMATSU, A. M. FIGUEIREDO NETO, R. J. HOROWICZ

*Instituto de Física da Universidade de São Paulo*

Entre o sólido cristalino e o líquido isotrópico, a matéria pode apresentar mesofases usualmente denominadas de cristais líquidos. Esses estados são equiparados em duas grandes categorias, os liotrópicos e os termotrópicos. A birrefringência ótica nos cristais líquidos está ligada diretamente ao parâmetro de ordem escalar. Dessa forma, o conhecimento desta grandeza é de fundamental importância no estudo das transições de fase entre as diferentes mesofases líquido cristalinas. Ao contrário do caso usual dos termotrópicos, o diagrama de fase de uma mistura liotrópica nemática possui até três mesofases distintas, sendo duas uniaxiais e uma biaxial. Em particular esta última tem índices de refração diferentes ao longo dos três eixos de simetria. Nosso estudo visa a determinação das 2 birrefringências na fase biaxial e das birrefringências nas fases uniaxiais. O valor de  $n_2$  de termotrópicos é conhecido. Neste trabalho apresentamos as primeiras medidas deste índice feitas numa amostra de cristal líquido liotrópico de Laurato de Potássio/Decanol/Água, na fase isotrópica. A técnica utilizada para obter  $n_2$  foi a de Z-Scan. As medidas foram realizadas usando um laser de Argônio ( $\lambda = 514,5\text{nm}$ ) CW e um obturador mecânico em pul-

tos da ordem de milisegundos. A curva obtida apresenta a forma característica de pico e vale de um experimento de Z-Scan. O valor obtido de  $n_2$  do ajuste dos pontos experimentais com a curva teórica foi  $-5 \cdot 10^{-7}$  esu. Este valor é duas ordens de grandeza inferior aos presentes na literatura para amostras termotrópicas

na mesma fase. A origem da não-linearidade e a diferença encontrada nos índices são temas de uma investigação teórica.

---

## SISTEMAS COMPLEXOS: POLÍMEROS E FLUÍDOS (Cristais Líquidos e Polímeros)

SISTEMAS COMPLEXOS:  
POLÍMEROS E FLUÍDOS (Cris-  
tais Líquidos e Polímeros) –  
12/06/97

---

### SELF-SCREENING OF LANGMUIR-BLODGETT FILM BY A DISCOTIC NEMATIC LIQUID CRYSTAL

SANDRO FONTANINI

*Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá (UEM), 87020-900, Maringá, PR, Brasil*

ALFREDO STRIGAZZI

*Dipartimento di Fisica, Politecnico di Torino, Corso Duca degli Abruzzi, 24, 10129, Torino, Itália*

GIOVANNI BARBERO

*Dipartimento di Fisica, Politecnico di Torino, Corso Duca degli Abruzzi, 24, 10129, Torino, Itália*

C. P. DE MELO

*Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco, Caixa Postal 2973, 50.670-901, Recife, PE, Brasil*

OSVALDO NOVAIS OLIVEIRA JR

*Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 369, 13560-970, São Carlos, SP, Brasil*

MARIA CECÍLIA B. S. SALVADORI

*Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 66.318, 05315-970, São Paulo, SP, Brasil*

ANTONIO MARTINS FIGUEIREDO NETO

*Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 66.318, 05315-970, São Paulo, SP, Brasil*

In our study, it is analysed the influence of the surface treatment on the anisotropic part of the surface tension, for a lyotropic discotic nematic liquid crystal, doped with ferrofluid. The lyotropic mixture investigated has the following concentration in weight per cent: decylammonium chloride 41.54;  $\text{NH}_4\text{Cl}$  4.23 and  $\text{H}_2\text{O}$  54.23. The phase sequence as a function of the temperature is: lamellar (24.8 °C) discotic nematic (44 °C) isotropic. The sample holders are made by glass cells with surfaces where Langmuir-Blodgett (LB) films are deposited. The molecules deposited in even and odd numbers of layers are: lignin, stearic acid and behemic acid. Samples are placed in a temperature controlled device in a polarizing microscope (with a Berek tilt compensator). The optical path difference is measured as a function of the temperature. By means of a thermodynamical model, the tilt angles of the director are measured at the bulk and also the glass surfaces. Our results show that the average orientation of the director is nearly independent on the nature of the molecule, that is deposited on the glass substrate. In a previous work [1,2], it was demonstrated that when in contact with a flat substrate, lyotropic liquid crystals stabilize a lamellar layer on it. Such layer is formed by the amphiphilic molecules present in the lyotropic mixture. Our present results seem to indicate that this layer screens the possible effect of the LB film, or even the substrate itself, on the alignment of the lyotropic nematic mesophase. In order to verify that, we analyse the textures of lyotropic and thermotropic (K21) nematics, in contact with substrates, treated with the LB deposit. The textures observed in thermotropics depend on the particular surface treatment. However, concerning the lyotropics, the texture does not depend on it. The glass surfaces (with stearic acid LB films) are observed in an atomic force microscope. The physical parameter measured is the roughness ( $R_q$ ). The substrates with the LB film present  $R_q \sim 1.5$ . After contact with the lyotropic liquid crystal, the same substrate presents  $R_q \sim 0.2$ . It indicates that the lyotropic makes the surface flatter, probably due to the lamellar layer deposited over the LB film on the substrate.

[1] E.A. Oliveira, A.M. Figueiredo Neto and G. Durand, *Phys. Rev. A* **44**, R 825 (1991).

[2] S. Fontanini, A.L. Alexe-Ionescu, G. Barbero and A.M. Figueiredo Neto, *J. Chem. Phys.* (1997).

Financial support: FAPESP

---

**DIFUSIVIDADES ORIENTACIONAIS EM NEMÁTICOS OBLATOS E PROLATOS: UMA BREVE REVISÃO INCLUINDO RESULTADOS RECENTES.**

MARCUS B. LACERDA SANTOS, MARCO ANTONIO AMATO  
*UnB*

Espalhamento quase-elástico de luz – espalhamento Rayleigh – permite medir, por técnicas de batimento óptico, o tempo de vida  $\tau$  de flutuações térmicas em um cristal líquido nemático. Em princípio essas medidas dão acesso às propriedades visco-elásticas do cristal líquido, mas, devido à anisotropia desses materiais, diversos parâmetros podem estar envolvidos no caso geral, dificultando a extração da informação. Felizmente, pode-se encontrar geometrias de espalhamento particulares em que a taxa de relaxação se relaciona diretamente com o módulo (quadrado) do vetor de onda da componente de Fourier  $q$  das flutuações, isto é,  $\tau^{-1} = Dq^2$ , onde o coeficiente  $D$ , chamado difusividade orientacional, assume a forma simples  $K_{ii}/\eta_\alpha$ . Aqui,  $K_{ii}$ ,  $i = 1, 2, 3$ , é uma das constantes elásticas de Frank para deformações do tipo leque (“splay”), torção (“twist”) e flexão (“bend”), respectivamente. Já os  $\eta_\alpha$  representam combinações adequadas a essas configurações dos cinco coeficientes de viscosidade independentes possíveis em um líquido nemático uniaxial incompressível. Tais coeficientes estão sujeitos à influência de escoamentos induzidos (“backflow”), de acordo com um modelo devido a de Gennes. Será mostrado que tal mecanismo permite compreender parte dos dados disponíveis sobre difusividade orientacional, embora já se conheça pelo menos um caso de exceção.

**Nematic Liquid Crystal Bistable orientation induced by anchoring competition between two surface attractors.**

J. J. BONVENT, R. BARBERI

*Unità INFN di cosenza, c/o Dipartimento di Fisica della  
Cabria, Italy.*

ANCA L. ALEXE-IONESCU

*Department of Physics, Politechnica University of  
Bucharest, Romania.*

We present a new technique which allows to reach controllable surface anchoring transition. The basic idea is to use surface anchoring competition conditions between two superposed aligning films. We take advantage of the screening phenomenon that exists when a thin polymer layer is deposited on an aligning solid substrate. Indeed, for a polymer thickness lower than the so-called screening thickness a Nematic Liquid Crystal (NLC) follows the anchoring properties given by the solid substrate. It was found that by treating the polymer film to induce an azimuthal alignment direction different from that of the anisotropic substrate, an anchoring competition can be created. The lower ani-

sotropic substrate is a low roughness SiO coating layer, which gives an unidirectional planar NLC orientation. The upper film is a very thin photosensitive polymer layer which can be linearly photopolymerized. Two anchoring competition geometries was considered : one with the linearly photopolymerization (LPP) process by UV-light inducing a NLC orientation at  $45^\circ$  with respect to that given by the SiO, the second with the LPP leading to a NLC perpendicular to that given by the SiO. The experimental results are reported for both anchoring competition geometries. We show that the UV-exposure time is a simple parameter that can control the azimuthal anchoring direction of the NLC. In the case of perpendicular anchoring directions, it was found that the anchoring competition between the two aligning fields generates a NLC surface bistability. A theoretical model is also presented. We assume that the anchoring competition is due to the presence of two orienting attractors : the orienting effect of the SiO film is mainly due to the elastic energy associated with the topography of the SiO, while the orienting field of the polymer can be connected to an anisotropic van der Waals interaction. The effect of exposure time on the azimuthal angle of the NLC was also analyzed.

**DRY FRICTION AND CRITICAL STATE IN LYOTROPIC NEMATIC LIQUID CRYSTALS SUBMITTED TO A MAGNETIC FIELD**

E. A. DE OLIVEIRA

*Instituto de Física, Universidade de São Paulo-São Paulo,  
Caixa Postal 66.318, CEP 05315-970, São Paulo, SP,  
Brasil*

G. BARBERO

*Dipartimento de Física del Politecnica, Torino- Itália*

A. M. FIGUEIREDO NETO

*Instituto de Física, Universidade de São Paulo-São Paulo,  
Caixa Postal 66.318, CEP 05315-970, São Paulo, SP,  
Brasil*

A. K. ZVEZDIN

*Institute of General Physics, Russian Academy of  
Sciences, Moscow*

The surface properties of a lyotropic nematic liquid crystal are described by a theoretical model based on the dry-friction like interaction between the liquid crystal and the boundary surface. Let us analyse the situation where the director is parallel to the boundary surfaces and a magnetic field  $H$  is applied parallel to the plane of the boundary surfaces, oriented at angle  $\theta$  with respect to the director  $\vec{n}$ . Under the action of the magnetic field, the director tends to align parallel to  $H$ , if the diamagnetic anisotropy is positive. When the interaction of the liquid crystal with the surface energy is comparable to the interaction of the liquid crystal with the magnetic field, the reorientation of the surface is possible. The kind of reorientation phenomenon strongly depends on the nature of the surface and of the liquid

crystal. This phenomenon is similar to the dry-friction of a body on a solid substrate, and involve complex interaction between the surface and the body, but can be described in terms of a dry-torque acting on the body. The surface layer of the lyotropic liquid crystal is submitted to a torque due to the elastic distortion induced by the magnetic field in the bulk  $\tau_s$ , which is derived from the minimization of the elastic energy, considering boundary conditions are not fixed, but depend on  $H$ . There is also the dry-torque  $\tau_c$ , related to the friction of the nematic sample with the boundary surface. For usual thermotropic liquid crystals the dry-torque is larger compared to the elastic torque and there is no reorientation of the director at the surface due to the action of the magnetic field. The threshold condition,  $\tau_s = \tau_c$  defines the threshold at which the surface orientation takes place. From this analysis we derive the critical magnetic field for the surface orientation process;  $H_c^*$ , that is related to the usual bulk critical magnetic field  $H_c$ . The orientation of the surface is described by the angle,  $\varphi_s(H) = \theta - \arcsin[(H_c^*/H) \sin \theta]$ , which is expected to be equal to  $\theta$  for high magnetic fields and 0 for  $H < H_c^*$ .

### DETERMINAÇÃO DO CAMPO MAGNÉTICO CRÍTICO SUPERFICIAL EM UM CRISTAL LÍQUIDO LIOTRÓPICO

MARÍA LETICIA VEGA, ELISABETH ANDREOLI DE  
OLIVERA  
USP

O processo de orientação da camada superficial de um cristal líquido liotrópico sob ação de um campo magnético pode ser descrito teoricamente por um modelo de fricção<sup>(1)</sup>, onde são consideradas as interações da camada superficial com o volume e do volume com o campo magnético. De acordo com esse modelo, deve haver um campo magnético crítico

$$H_c^*(\theta) = \left( \frac{d\tau_s}{\pi K} \right) \frac{1}{H_c \sin \theta},$$

abaixo do qual não deve ocorrer a orientação da camada superficial, mas apenas a orientação do volume.

Utilizamos a técnica de medida de transmitância da amostra do cristal líquido nemático entre polarizadores cruzados, quando o campo magnético é aplicado. Calculamos a transmitância de uma amostra opticamente anisotrópica e não homogênea, utilizando um perfil dinâmico para a configuração do diretor no interior da amostra. Observamos que para campos altos o comportamento dinâmico é descrito como a orientação de uma camada fina, próxima à superfície de contorno, porém para campos baixos essa descrição falha.

O processo de orientação da superfície deve-se a distorção introduzidas pelo campo magnético no volume. Para campos suficientemente intensos uma grande parte da amostra orienta-se paralelamente ao campo

resultando em um torque elástico ( $\Gamma_e$ ) que é maior que o torque devido ao atrito com a superfície ( $\Gamma_s$ ). Para campos baixos, o  $\Gamma_e$  é comparável a ( $\Gamma_s$ ) o processo de orientação torna-se mais complexo e a configuração do diretor tende a ser mais contínua.

(1) E. Andreoli de Olivera, G. Barbero, A. M. Figueiredo Neto, A. K. Zvezdin *Phy. Lett A* 222 (1996) 113-118

CNPq/FAPESP

### LOCAL MOLECULAR ORDER OF THERMOTROPIC MESOPHASES: ORDERED LIQUIDS OR DISORDERED SOLIDS?

E. ANOARDO, D. J. PUSIOL

*Facultad de Matemática, Astronomía y Física, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba- 5000-Ciudad Universitaria. Argentina.*

Liquid crystalline materials flow like liquids, but simultaneously present both macro and microscopic anisotropy. Smectic C (SmC) mesophase has biaxial symmetry of monoclinic class, which originates in the coupling between the molecular tilt angle and the layer thickness. On the contrary, nematic (Nm) phase is in general reported to be optically uniaxial. Nuclear Quadrupole Resonance (NQR) is a useful experimental technique to study local order and molecular dynamical properties. Due to the averaging of the electric field gradient tensor (efg tensor), and the relative poor abundance of quadrupole nuclei in liquid crystal molecules, conventional NQR spectroscopy turns unrealizable with the actual technological facilities. However, indirect detection of quadrupole interaction in liquid crystals can be achieved using proton Zeeman-quadrupole nuclei cross relaxation techniques. From the NQR point of view, local order biaxiality in liquid crystals is observed by an effective asymmetry of the efg tensor ( $\eta \neq 0$ ). In a recent work we have discussed the microscopic structure of 4-4'-bis-heptyloxy-azoxy-benzene (HpAB) in the SmC mesophase. We concluded that the elemental "building block" of the fluid mesophase is composed by two molecules. The evidence arises from measurements of the quadrupole dipoles (QDs) structure observed on the spin-lattice relaxation dispersion  $T_1(\nu_L)$ . Eight quadrupole dipoles were measured in the Larmor frequency range from 300 kHz to 4 MHz. This fact can only be explained by assuming three inequivalent  $^{14}N$  nuclei. As the HpAB molecule has only two nitrogens, a bimolecular elemental unit must be considered in describing the local liquid crystalline microstructure. This seems to be a characteristic legacy from the solid state, since in that situation same inequivalences between the  $^{14}N$  were also found for PAA. In this work we present new evidences by using a zero-field Nuclear Quadrupole Double Resonance (NQDOR) technique. This technique allows to

measure the pure  $^{14}\text{N}$  NQR spectra; i.e., at zero external magnetic field. As far as we know, this is the first zero magnetic field NQR study in a nonsolid material. The experimental technique combines electronically fast field cycling and two different radiofrequency excitations of the sample.

### COMPORTAMENTO ELÉTRICO AC EM FILMES DE POLIANILINA

RODRIGO FERNANDO BIANCHI, ROBERTO MENDONÇA FARIA

*Instituto de Física de São Carlos - USP*

Entre todos os polímeros eletricamente condutores, a polianilina - PANi - e seus derivados são particularmente atraentes devido às suas altas condutividades sob a dopagem com ácidos. No caso da PANi, a dopagem ocorre por meio de protonação e está relacionada com as suas propriedades ácido-base. O presente trabalho tem por objetivo sintetizar e preparar a PANi na base esmeraldina, a partir do monômero destilado anilina, e processá-la na forma de filmes, com espessuras entre 10 e 20  $\mu\text{m}$ , pelo método "casting", a uma temperatura de 323K, com um solvente apropriado. Em seguida, o filme é dopado por imersão em ácido clorídrico 0.1 molar por tempos diferentes e as medidas de condutividade alternada ac  $\sigma^*(\omega)$  são realizadas no intervalo de frequência de 1 a  $10^6\text{Hz}$  em temperaturas que variam entre nitrogênio líquido e 300K obtidas com um impedânciômetro Solartron e um criostato Janis. As curvas obtidas de condutividade apresentam regiões de baixa e alta frequências onde não há dependência de  $\sigma$  com  $\omega$ . Desse modo, os resultados das componentes real e imaginária que variam com a frequência são explicados pelo modelo "hopping" em um meio desordenado, onde a distribuição de barreiras de potencial  $W$  é aleatória. Esse modelo foi desenvolvido por Dyre, usando a aproximação de Passeio ao Acaso Contínuo no Tempo (CTRW), e pressupõe que o transporte é devido a "hopping" estimulado por fônons em sistemas sólidos desordenados. O ajuste teórico-experimental permite a obtenção do tempo de espera dos portadores nos estados localizados e a sua mobilidade, assim como sua dependência com a temperatura. (FAPESP)

**SISTEMAS COMPLEXOS: POLÍMEROS E FLUÍDOS (Cristais Líquidos e Polímeros) - 12/06/97**

### SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE TELAS MOLECULARES DE POLIANILINA

CÍNTIA SCHRIENER, IVO ALEXANDRE HÜMMELGEN  
*UFPR*

CARLOS ARTUR FERREIRA, CELSO FORNARI  
*UFRG*

Os polímeros semicondutores vêm despertando grande interesse dos pesquisadores, pois podem ter suas características de transporte elétrico controladas. Essa versatilidade associada as propriedades mecânicas comuns aos materiais poliméricos, além do baixo custo, tornam esses materiais tecnologicamente muito promissores. Um dos polímeros, que nos últimos anos está sendo atenciosamente estudado, devido à sua variedade de propriedades químicas, eletroquímicas, eletrônicas, magnéticas e óticas é a polianilina. A polianilina (PANI) possui uma grande vantagem em relação aos outros polímeros, pois possui características elétricas reversivelmente controladas, por modificação do estado de oxidação da cadeia principal ou por protonação do átomo de nitrogênio. Para utilizar a polianilina com fins elétricos foram desenvolvidas telas moleculares ("self assembled molecular networks") que constituem na verdade um arranjo auto-organizado de moléculas condutoras de polianilina dopada em uma matriz isolante. O sistema se auto-organiza atingindo um limiar de percolação (condução elétrica).

A polianilina utilizada para confecção das telas foi inicialmente dopada com ácido canfor sulfônico (CSA) (2:1W/W) e após solubilizada em m-cresol (1%). Convencionalmente utilizou-se como matriz isolante polimetilmetacrilato (PMMA), devido a boa transparência que transfere a blenda. Uma solução de PMMA em m-cresol (4%) é misturada a polianilina, em constante agitação para melhor homogeneização. A solução final é depositada em lâmina de vidro e evaporado o solvente durante 48 horas aproximadamente, a uma temperatura de 55°C, obtendo um filme com espessura na ordem de 1 $\mu\text{m}$ . Para a blenda de PANI-CSA/PMMA foi determinada a dependência da resistividade elétrica em relação a concentração (1% a 100%). Além da resistividade, determinou-se também, o nível de percolação ( $\approx 1$ ) e foram realizados testes de estabilidade das blendas, demonstrando que a resistividade se mantém constante até valores de densidade de correntes limites, que dependem da concentração.

### ELASTIC CONSTANTS IN A PSEUDO-MOLECULAR APPROACH FOR A MIXED MAIER-SAUPE AND NEHRING-SAUPE INTERACTION LAW.

L. R. EVANGELISTA, I. HIBLER, H. MUKAI  
*UEM*

The bulk elastic properties of a nematic liquid crystal (NLC) are described by the elastic constants of

splay, twist, bend and saddle-splay, denoted respectively by  $K_{11}$ ,  $K_{22}$ ,  $K_{33}$  and  $K_{24}$ . These elastic constants are phenomenological parameters introduced by taking into account of the symmetry of the NLC phase. A useful approach to calculate the elastic constants, which tries to connect them to the intermolecular interaction responsible for the NLC phase, was proposed by J. Nehring and A. Saupe [J. Chem. Phys. 54, 337 (1971)]. In this work, the pseudo-molecular approach is employed to calculate the elastic constants of a NLC by assuming an interaction volume of ellipsoidal shape. This implies to assume that the interaction is different from zero in a region limited by two similar ellipsoids, whose inner part coincides with the molecular volume, and the outer part is defined by the long-range part of the intermolecular interaction. We present the basic simplifying hypotheses of the approach and discuss some limits of its applicability. For the calculations we consider a special kind of mixed Maier-Saupe and Nehring-Saupe interaction law [G. Barbero, L. R. Evangelista, and S. Ponti, Phys. Rev. E 53, 1265 (1996)]. A screening length is introduced to take into account for the short-range character of the intermolecular interaction. In this context, short means very small with respect to the scale over which the spatial variation of the macroscopic order takes place. The dependence of the elastic constants on the eccentricity of the molecular volume shape and on the mixing factor is investigated by means of a numerical analysis. Particular attention is devoted to the non monotonic behaviour of the splay-bend elastic constant with respect to the mixing factor.

### MODELO ESTATÍSTICO PARA UM CRISTAL LÍQUIDO MICELAR: RESULTADOS DE CAMPO MÉDIO E SIMULAÇÕES.

EDUARDO FONTES HENRIQUES  
UFPEL

VERA BOHOMOLETZ HENRIQUES  
USP

Estudamos o diagrama de fases, em campo médio, de um modelo do tipo Maier-Saupe de interações entre objetos uniaxiais de anisotropias (formas) variáveis. Este modelo, onde os objetos são colocados sobre uma rede e têm as orientações de seus eixos maiores em eixos cartesianos, representa uma solução de micelas formadas por dois tipos de surfactantes em água. Os resultados do modelo já foram mostrados em parte (XVII ENFMC, resumos, pg. 125), e ele prevê a existência de fases biaxiais estáveis em baixas temperaturas. Essas fases biaxiais ocorrem, apesar do fato de os objetos serem uniaxiais, devido à variabilidade (polidispersividade) dos objetos no modelo. Assim, embora uma mistura de objetos uniaxiais nos dê uma separação de fases com predominância de cada forma pela minimização da energia, essa vantagem energética desaparece quando conside-

ramos, como em nosso modelo, uma distribuição de formas. O diagrama de fases de campo médio tem como coordenadas um parâmetro de anisotropia média e a temperatura, sendo simétrico em relação ao eixo da anisotropia. Suas características são a existência de duas linhas críticas, para baixas temperaturas, separando fases biaxiais das fases uniaxiais. A uma certa temperatura (temperatura de Landau) essas linhas críticas se encontram, sobre o eixo das temperaturas. As fases uniaxiais são separadas da fase isotrópica por linhas de coexistência que terminam no ponto de Landau. Os dois semi-eixos da coordenada onde colocamos os valores de anisotropia média devem ser encarados da seguinte forma: anisotropia média positiva representa micelas em forma de bastões, enquanto que anisotropia média negativa representa micelas em forma de bastões. São apresentados resultados preliminares de simulações computacionais de Monte-Carlo.

### MEDIDAS DE DIFUSIVIDADE TÉRMICA EM CRISTAIS LÍQUIDOS DOPADOS COM FERROFLUIDO PELA TÉCNICA DE LENTE TÉRMICA

J. R. D. PEREIRA, A. M. MANSANARES  
Instituto de Física Gleb Wataghin, UNICAMP

A. J. PALANGANA, M. L. BAESSO  
Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá

A espectroscopia de lente térmica (TLS) é uma técnica transiente usada para caracterizar propriedades ópticas e térmicas de materiais de baixa absorção óptica. Esta técnica consiste na incidência de um feixe laser (laser de excitação) em um meio absorvedor, causando uma mudança no índice de refração devida ao gradiente térmico estabelecido. Esta mudança no índice de refração afeta a propagação de um segundo laser na amostra (laser de prova) diminuindo ou aumentando a intensidade do feixe sobre um fotodiodo. Esta técnica possibilita medidas de absorção óptica da ordem de  $10^{-7} \text{ cm}^{-1}$ . Neste trabalho utilizamos a TLS na configuração de modo descasado para medir a difusividade térmica em duas amostras de Cristais Líquidos Liotrópicos (CLL) na fase nemática cilíndrica ( $N_c$ ). Utilizamos a mistura laurato de potássio (29,4%), decanol (6,6%) e água (64%) como amostra base para duas misturas de CLL dopadas com ferrofluido em quantidades diferentes. Usamos no arranjo experimental para TLS um laser de  $\text{Ar}^+$  (514,5 nm) como feixe de excitação, e um laser de He-Ne (632,8 nm) como feixe de prova. Ferrofluidos são suspensões coloidais de partículas magnéticas revestidas por agentes dispersivos dissolvidas em um solvente. Utilizamos neste trabalho ferrofluido de  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  dissolvido em água. O interesse de dopar o CLL com ferrofluido vem do baixo valor de campo magnético necessário para orientar o diretor da fase  $N_c$ . As amostras foram orientadas em campo magnético, e a tex-

tura da fase  $N_c$  observada em microscópio óptico com polarizadores cruzados. A difusividade térmica, obtida através de ajuste da curva experimental, para a direção paralela foi  $\alpha_{//} = 1.45 \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$  para Mistura 1,  $\alpha_{//} = 1.25 \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$  para Mistura 2 (mais concentrada) e  $\alpha_{//} = 1.71 \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$  para a mistura sem dopagem. A difusividade térmica perpendicular também foi determinada e conseqüentemente a anisotropia térmica. Observamos que a anisotropia térmica diminui com o acréscimo de ferrofluido no CLL.

### Magnetic instabilities in nematic liquid crystals' walls

MANUEL SIMÕES, FABIANO CÉSAR CARDOSO

*Universidade Estadual de Londrina*

ANTONIO JOSÉ PALANGANA

*Universidade Estadual de Maringá*

Walls are the structures, usually found in nematic liquid crystals (NLC), making the transition between adjacent symmetrical distorted textures which can be formed under the action of an external field. In thermotropic liquid crystals they have been studied many years ago both from theoretical and experimental point of view. More recently, the situation in which a magnetic field is applied to a previously oriented sample of lyotropic nematic liquid crystals has been analysed. Their practical importance, beyond of being typical examples of textures in NLC, stays in fact that with simple experiments the measurements of their parameters can furnish the values of the elastic constants as well as the magnetic susceptibility of the NLC. On the other hand, as soon as we turn on the magnetic field we observe the arising of a set of inciting unstable unidimensional walls which will decay in a such slow way that is sufficiently long to perform the measurements reported. Recently it have been shown that such structures are metastable because their energy is bigger than an homogeneous alignment of the director along the sample. In this work we show that this is indeed unstable and study the nature of this instability. In a previous work we have shown that the periodicity in the position of these walls along the direction perpendicular to the external magnetic field follows directly from its one dimensional character. So, in this work, we demonstrate, with the use of the second variation of the Frank free energy and with the Jacobi criterium, that its instability is also closely related to its dimensionality. These results are consistent with the experimental observation that we report.

### Sólitons em Cadeias com Pontes de Hidrogênio

BRUNO HERBERT BATISTA LIMA, FERNANDO JORGE SAMPAIO MORAES

*Universidade Federal de Pernambuco*

DIONISIO BAZEIA

*Universidade Federal da Paraíba*

Estudos de cadeias com pontes de hidrogênio em matéria condensada e biologia têm despertado muito interesse nos últimos anos. A estrutura e dinâmica dos prótons em tais cadeias de pontes de hidrogênio têm sido estudadas por vários autores, tanto em modelos com uma componente, que descreve o deslocamento da sub-rede de prótons, como com duas componentes, com a segunda descrevendo as oscilações dos íons pesados. Tais pesquisas tornam possível o entendimento do transporte de energia e carga ao longo de uma cadeia molecular quase unidimensional e a condutividade protônica de sistemas como o gelo, álcool, carboidratos, etc. Nos trabalhos encontrados na literatura, utilizam-se modelos discretos seguidos de passagem para o contínuo, o que em geral originam equações de movimento de segunda ordem não lineares, acopladas no caso de modelos de duas componentes. Na nossa abordagem mostramos que, para uma classe geral de sistemas, as equações de movimento podem ser reduzidas a equações diferenciais de primeira ordem acopladas. Esta abordagem permite estudar vários modelos para cadeias de pontes de hidrogênio de uma forma unificada. Neste trabalho estudamos o modelo de sólitons para cadeias quase unidimensionais de pontes de hidrogênio, com duas componentes, provando a estabilidade das soluções topológicas e calculando suas energias correspondentes, sem a necessidade de conhecermos a forma explícita das soluções, o que permite obter informações relevantes sobre o sistema em questão mesmo nos casos em que os potenciais utilizados não tornam possível se encontrar soluções analíticas.

### Propriedades eletroópticas de um cristal líquido disperso em um meio isotrópico

V. M. ALVES, E. A. DE OLIVEIRA

*Instituto de Física- USP*

R. M. FARIA, D. T. BALOGH, D. YADA

*Instituto de Física de São Carlos- USP*

Novos dispositivos eletroópticos tem sido desenvolvidos a partir de materiais formados por uma mistura de polímeros e cristais líquidos. Esses materiais apresentam gotas de cristal líquido dispersas em uma matriz polimérica (isotrópica). Propriedades macroscópicas desses materiais, tais como transparência e birrefringência, podem ser alteradas por variações de temperatura ou pela presença de campos elétricos ou magnéticos externos. O objetivo deste trabalho é obter um material composto de gotas de cristal líquido dispersas em um meio isotrópico e estudar suas propriedades eletroópticas. No interior das gotas, as interações superficiais são fundamentais na determinação da orientação do cristal líquido. Essa configuração também pode ser alterada através de variações de temperatura ou por campos externos (elétrico ou magnético). Estamos utilizando o cristal líquido composto por laurato de potássio, cloreto de decylamônia e água, que apresenta

fases nemáticas entre 12 e 60°C e não tem álcool em sua composição, que poderia solubilizar o polímero. Como meio dispersante utilizamos uma solução de PEG (poli-etileno-glicol) em água (70% de polímero em massa) e depois acrescentamos o cristal líquido. A solução resultante é um líquido bastante viscoso e um pouco opaco. Observamos no microscópio de luz polarizada a existência de gotas com diâmetro variando microns até algumas dezenas de microns. Variando a temperatura, observamos também alterações na configuração do diretor, mais acentuada nas gotas de menor diâmetro. Estamos estudando também um outro composto, obtido pela dispersão do mesmo cristal líquido em uma solução de PHEMA (poli-hidroxi-etil-meta-acrilato) e etanol.

### ESTUDO DE PROTONAÇÃO DAS POLIANILINAS

JOSÉ REZENDE PEREIRA NETO  
EFEI

TARCIS CORDEIRO BASTOS  
FAIRWAY Filamentos SA

MARÍLIA JUNQUEIRA CALDAS  
IFUSP

É amplamente sabido que a condutividade da polianilina (PAN) é alterada em várias ordens de grandeza através da dopagem. Essa dopagem é conseguida pela protonação que a transforma em um material condutor tipo p. Nos sítios onde há protonação haverá possibilidade de formação de bipólarons os quais serão responsáveis pelos mecanismos da condução por possibilitar a formação de buracos no topo da faixa de valência. Vimos estudando a protonação da PAN através de um modelo que a simula. Este consiste no estudo de uma molécula de oito anéis oxidada, ou seja, com a presença de grupo imina-quinona no esqueleto amina-benzeno (esqueleto da leuco-esmeraldina). Acrescentamos Hidrogênios ionizados (isto é, prótons) junto aos Nitrogênios vizinhos de um anel quinona (N-imina). Assim a geometria do esqueleto é de uma esmeraldina. A protonação é obtida pela otimização da geometria dessa molécula, que portanto, tem carga  $+2e$ , utilizando o método MNDO-PM3. Apesar dos níveis meta-estáveis existentes neste sistema dificultarem a convergência, obtivemos sucesso na otimização. Um primeiro resultado é que a geometria da molécula não reverte à da leuco-esmeraldina: a planaridade da molécula protonada é pelo menos tão boa quanto a da molécula oxidada.

### ORDER FLUCTUATIONS OF THE DIRECTOR IN THERMOTROPIC LIQUID CRYSTALS STUDIED BY NMR DIPOLAR ORDER RELAXATION

R. C. ZAMAR, O. MENSIO, E. ANOARDO, D. J.  
PUSIOL

Facultad de Matemática, Astronomía y Física, Universidad  
Nacional de Córdoba Ciudad Universitaria, 5000 Córdoba,  
Argentina.

F. NOACK

Physikalisches Institut, Universität Stuttgart,  
Pfaffenwaldring 57, 70550 Stuttgart, Germany.

In this work we study the NMR dipolar order relaxation in thermotropic liquid crystals in nematic phase. We find that the standard theory for the spin-lattice dipolar relaxation time ( $T_{1D}$ ) cannot explain its Larmor frequency dependence in a broad range, as measured with the field-cycling technique. Refinements to the usual approach due to the inclusion of the spin interactions do not yield significant corrections. This fact suggests that the weak order assumption contained in the semiclassical theory is too restrictive to describe an essentially collective phenomenon as dipolar order relaxation, being necessary to go farther in the theoretical description to include the quantum nature of the spin-lattice relaxation. We propose a generalization of the NMR master equation, considering the spins as an open quantum system in thermal contact with a quantum bath. Starting from the Markovian master equation for the reduced density matrix, the relaxation master equation in operator form is expressed as an expansion in powers of  $\beta_L Hs$ , being  $Hs$  the spin energy and  $\beta_L$  the inverse lattice temperature. At this point the spin temperature hypothesis is introduced. This procedure yields a correction to the semi-classical  $T_{1D}^{-1}$  having an exclusive quantum character. The usual NMR master equation is obtained in the high temperature limit. In consistence with releasing the weak order condition in the master equation, the spin interactions are included in the time evolution of the spin operators of the spin-lattice Hamiltonian, in a perturbative way, valid for magnetic fields higher than the local field. The obtained Larmor frequency dependence for  $T_{1D}$  agrees with the experimental trends, eliminating the discrepancies between the experimental results and the semiclassical theory.

## SISTEMAS COMPLEXOS: POLÍMEROS E FLUÍDOS (Controle Molecular em Materiais Poliméricos)

### SISTEMAS COMPLEXOS: POLÍMEROS E FLUÍDOS (Controle Molecular em Materiais Poliméricos) – 12/06/97

#### ESTRUTURA ELETRÔNICA DE MATERIAIS ORGÂNICOS PARA FOTÔNICA

PAULO M. V. B. BARONE, SÓCRATES DE OLIVEIRA DANTAS

*Departamento de Física, Universidade Federal de Juiz de Fora*

DOUGLAS S. GALVÃO

*IFGW, UNICAMP*

O desenvolvimento de materiais moleculares destinados ao armazenamento de dados óticos tem sido objeto de intensa investigação nos últimos anos. Novas classes de moléculas capazes de armazenar informações digitais através da modificação de propriedades estruturais ou eletrônicas e de realizar ciclos de registro-leitura reversíveis têm sido sintetizadas. A possibilidade de modular propriedades físicas de moléculas orgânicas por meio de um agente externo, como a luz ou um campo elétrico, levou a um grande esforço para desenhar e sintetizar sistemas dinâmicos moleculares que podem sofrer transições reversíveis entre diferentes estados, para uso como dispositivos de chaveamento. A biestabilidade molecular, requisito básico para uma molécula se comportar como uma chave, pode ser baseada em propriedades como transferência eletrônica ou isomerização. Problemas de estabilidade térmica ou fotoquímica nesses materiais podem ser contornados se eles forem inseridos numa matriz polimérica. Nós investigamos a estrutura eletrônica de chaves óticas baseadas na resposta ótica de moléculas quirais, derivadas do bioxanteno, recentemente preparadas e caracterizadas experimentalmente. Nestes compostos, pulsos de luz aplicados produzem a conversão entre os isômeros *cis* e *trans*, simultaneamente à inversão da helicidade molecular, e ambos os isômeros podem ser detetados por meio de seus espectros de absorção ou de suas atividades óticas. Utilizando os métodos semiempíricos PM3 e ZINDO/CI, descrevemos a estrutura eletrônica, caracterizamos as conformações de equilíbrio, as transições conformacionais através da análise das barreiras rotacionais, e simulamos os espectros de absorção das moléculas em cada conformação. Os resultados concordam com os dados experimentais de estrutura e ótica publicados na literatura, permitindo compreender o mecanismo de fotoisomerização desse compostos.

#### LATERAL CONDUCTANCE IN LANGMUIR MONOLAYERS FROM POLYANILINES

ANTONIO RIUL JR, AILTON CAVALLI, LUIS

EDUARDO AMANCIO, OSVALDO NOVAIS DE

OLIVEIRA JR

*Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo (USP)*

The lateral conductance technique has been applied in recent years to probe protonic conduction along phospholipid monolayers. In this technique two platinum electrodes are immersed into the subphase on which a Langmuir monolayer had been spread and the current generated by an applied voltage across the electrodes is measured. When the monolayer is fully expanded the conductance measured is that of the subphase, i.e. no monolayer contribution is detected. Upon compression a critical area is reached below which a conductance of the order of  $10^{-8}$  S is measured for monolayers spread on ultrapure water. The appearance of such a criti-

cal area is related to the establishment of a H-bonded network that facilitates proton transport. Because the monolayer conductance is considerably lower than the subphase background, a number of experimental precautions must be adopted. By employing a differential system we have been able to overcome many of these experimental difficulties and even apply the technique for monolayers spread onto high ionic strength subphases. In this work we report on the lateral conductance of both parent polyaniline (PANI) and poly(*o*-ethoxyaniline) (POEA) Langmuir monolayers. As expected, higher values are obtained since now there is also electronic conduction in addition to a possible protonic contribution. Even on an ultrapure water subphase, when PANi and POEA monolayers are at most weakly doped, the measured conductances are about  $10^{-6}$  S for PANi and  $10^{-7}$  S for POEA. For PANi in both cases the measured conductance is at least one order of magnitude higher than for the phospholipids. For fully protonated monolayers spread on a pH=2 subphase,

the conductance increases to  $10^{-4}$  S. These studies are being extended to mixed Langmuir monolayers of stearic acid and POEA onto ultrapure water. It is hoped that these new experiments may further the understanding on charge transport in conducting polymers.

#### A STUDY ON MIXED LANGMUIR MONOLAYERS OF LIGNIN AND CADMIUM STEARATE

CARLOS JOSÉ LEOPOLDO CONSTANTINO,

ANANTHARAMAN DHANABALAN

*Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo (USP)*

ANTONIO APRIGIO DA SILVA CURVELO

*Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo (USP)*

OSVALDO NOVAIS DE OLIVEIRA JR.

*Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo (USP)*

Langmuir-Blodgett (LB) films of biomolecules have received considerable attention of late as the LB technique offers a unique way of organizing the molecules in a desired fashion. This technique also allows inter and intramolecular interactions in a organized assembly to be understood which is essential to mimic biological processes in nature. We have for some time been studying both Langmuir and LB films of lignins extracted from sugar cane bagasse and a pine plant with the aim of understanding the organization of these macromolecules at the air-water interface and in the multilayer LB films. We have found that lignins do not form monomolecular layers at the air/water interface; instead the resulting Langmuir film could even consist of a stable multilayer stack in the case of low molecular weight lignins. These stacks can nevertheless be transferred as LB multilayers onto different substrates. As lignins are not typical amphiphilic molecules, we felt that mixing with builder materials like stearic acid might enhance the monolayer stability. In the present work, in order to investigate the structure and stability of the mixed monolayer, surface pressure isotherms were obtained under various compression speeds (0.5, 3.0, 10.0, 30 and 100 mm/min). It has been found that though there is no significant change in the collapse pressure, the limiting mean molecular area is found to decrease when the compression speed is decreased from 30 mm/min to 0.5 mm/min above which no appreciable change in the limiting mean molecular area was observed. These results indicated a non-equilibrium condition during compression and the formation of a metastable phase. The stability of the monolayer has also been studied by holding the monolayer in a compressed state and monitoring the changes in the mean molecular area. This procedure revealed poor stability of the mixed monolayer. It is pos-

sible that, even in the presence of a typical film-forming material, lignin molecules form separate domains within which they are assembled in a non-monomolecular stack. The transfer behavior and the characterization of transferred LB films will be discussed.

#### LANGMUIR-BLODGETT MANIPULATION OF SOLUBLE POLYPYRROLE

ANANTHARAMAN DHANABALAN

*Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo*

SARITA VERA MELLO

*Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo*

OSVALDO NOVAIS DE OLIVEIRA JR

*Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo*

Conducting polymers are now widely regarded as potential candidates for a number of technological applications, including those in the realms of molecular electronics. The poor processibility of conducting polymers, however, has limited their application. In the recent past, the processing of these materials has been improved considerably with the advent of functionalised acid-induced processibility. Polypyrrole is one of the most investigated conducting polymer owing to its high conductivity and environmental stability. This material can be obtained by conventional chemical or electrochemical polymerization or even in the form of ultrathin Langmuir-Blodgett (LB) films. For the latter, various molecular engineering approaches have been used. In the present work, we report on the preparation and characterization of LB films from soluble polypyrrole which was chemically synthesized from the pyrrole monomer in the presence of dodecylbenzene sulfonic acid at low temperatures. In order to achieve better monolayer stability, the soluble polypyrrole was co-spread with stearic acid on the surface of an aqueous subphase containing cadmium ions. The polypyrrole/stearic acid composition ratio has been varied systematically, with the composite monolayers being characterized by surface pressure and surface potential measurements. The composite monolayers could easily be transferred onto solid substrates using the LB vertical dipping method with a near unity transfer ratio. The resulting films, which are visually uniform, were characterized by UV-vis, and FTIR spectrometry, cyclic voltametry and d.c. electrical conductivity measurements. Both UV-vis and FTIR results revealed the transfer of polypyrrole together with cadmium stearate. Possible applications of polypyrrole LB films will be discussed.

### COMPOSITE LANGMUIR-BLODGETT FILMS OF POLYANILINE AND CADMIUM STEARATE

ANANTHARAMAN DHANABALAN, ANTONIO RIUL JR,  
OSVALDO NOVAIS DE OLIVEIRA JR

*Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo (USP)*

A stable composite monolayer of polyaniline (processed with camphor sulphonic acid) and cadmium stearate has been obtained at the air-water interface and has subsequently been transferred uniformly onto substrates as Langmuir-Blodgett multilayers. Surface pressure-mean molecular area (II-A) isotherm studies indicated that, in contrast to earlier reports on the composite monolayer of conducting polymer and fatty acid/salt, the polyaniline has not been squeezed out of the cadmium stearate matrix during the compression or in the compressed state. Surface potential measurements of this composite monolayer have also been carried out. With increasing amount of polyaniline in the mixture, a transition from Y-type to Z-type deposition has been observed. Transferred multilayer LB films were characterised by UV-vis, FTIR, X-ray diffraction (XRD), surface potential, and dc electrical conductivity measurements. UV-vis results indicated that though the polyaniline was in the doped state in the spreading solution, the transferred films were in the emeraldine base state. FTIR studies revealed that the transferred films mainly contained cadmium stearate salt. XRD results indicated that the stacking order is dependent on the polyaniline content in the composite films and with increasing amount of polyaniline the stacking order is found to decrease. Surface potential studies revealed the good uniformity of transferred films. A possible packing arrangement in these composite Langmuir and Langmuir-Blodgett films has been proposed.

### LB PROCESSING OF 16-MER POLYANILINE

ANANTHARAMAN DHANABALAN, ANTONIO RIUL JR,  
OSVALDO NOVAIS DE OLIVEIRA JR

*Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo (USP)*

LUIZ HENRIQUE CAPARELLI MATTOSO  
*EMBRAPA/CNPDIA, São Carlos (SP).*

Oligomeric organic conductors are expected to have higher crystallinity than their polymeric counterparts; consequently oligomers should display an increased interdomain conductivity thus enhancing their bulk conductivity when compared to conducting polymers. The interest in the study of ordered layers of this special class of materials arises from their large potential application in the field of molecular electronics. The Langmuir-Blodgett technique has been widely used for this purpose as it allows control over the molecular packing in the fabrication of highly ordered ultrathin organic

films. In the present work, we report for the first time on the preparation and characterisation of composite Langmuir and Langmuir-Blodgett films of 16-mer polyaniline and cadmium stearate. The amount of oligomer of these composite films has been varied systematically and the effect of composition on the monolayer stability and the multilayer transfer process has been studied. Composite monolayers were characterized by surface pressure and surface potential isotherms which basically indicate the decrease of monolayer stability with increasing 16-mer amount above 60% in the composite. The transfer process was also found to depend on the 16-mer content in the composite monolayer, with poor transfer above 60% of 16-mer. Transferred films were characterized by UV-vis, FTIR, d.c. electrical conductivity and surface potential measurements. The observed linear increase of absorption corresponding to the 16-mer with increasing number of layers indicated a uniform transfer of the oligomer in the composite LB films. The results are compared with those obtained with the composite LB films of high molecular weight polyaniline and cadmium stearate.

### SISTEMAS COMPLEXOS: POLÍMEROS E FLUÍDOS (Controle Molecular em Materiais Poliméricos) – 12/06/97

#### DETERMINAÇÃO QUANTITATIVA DA ORIENTAÇÃO MOLECULAR EM FILMES DE LANGMUIR-BLODGETT DE POLÍMEROS CONDUTORES

ALEXANDRO C. TENÓRIO, C. G. DOS SANTOS,  
CELSONO P. DE MELO

*Departamento de Física - Universidade Federal de Pernambuco*

Nesta comunicação apresentamos resultados quantitativos para a determinação da orientação molecular média das cadeias poliméricas em um filme fino do tipo Langmuir-Blodgett (LB), obtida através da aplicação das técnicas de espectroscopia na região do infravermelho por reflexão total atenuada (RTA) e por transmissão. Enquanto a técnica de transmissão nos permite estabelecer o grau de orientação dos momentos de dipolo (ou suas projeções) que estão contidos no plano do substrato, a técnica de RTA permite estimar a distribuição de orientação dos momentos de dipolo contidos tanto no plano do substrato quanto fora dele. Dessa forma, por obedecerem diferentes regras de seleção, essas técnicas espectroscópicas permitem estimar de modo quantitativo a direção preferencial das

vibrações de grupos moleculares específicos. Resultados obtidos através desse procedimento para a determinação das propriedades estruturais de filmes de LB do poly(5-acetoamido-4,5,6,7-tetrahidro-2H-indol), pACATI, um polímero conjugado derivado do pirrol, depositados em cristais de ZnSe, serão discutidos. Devido à estrutura do monômero, em que apenas substituições nas posições 2 e 5 são permitidas, o pACATI deve apresentar um número menor de ramificações que outros derivados do pirrol, e portanto exibir uma marcante anisotropia estrutural. Os nossos resultados espectroscópicos indicam que os anéis do pirrol estão ancorados de forma quase paralela com o plano do substrato. (Apoio: FINEP, CNPq e BNB)

### TÉCNICAS DE SIMULAÇÃO NUMÉRICA PARA DETERMINAÇÃO DAS CONSTANTES ÓTICAS EM FILMES FINOS DE POLÍMEROS CONDUTORES

ALEXANDRO C. TENÓRIO, C. G. DOS SANTOS,  
CELSE P. DE MELO

*Departamento de Física - Universidade Federal de Pernambuco*

Apresentaremos nesse trabalho resultados da aplicação de técnicas de simulação numérica para a determinação, de forma auto-consistente e a partir dos espectros experimentais, dos valores das componentes  $n$  e  $k$  do índice de refração complexo para a região do infravermelho de filmes finos de polímeros condutores. Pela utilização dessa técnica, espectros de transmissão, reflexão externa e reflexão interna podem ser simulados para quaisquer valores tanto do ângulo de incidência e do estado de polarização da radiação incidente quanto da espessura da amostra, o que permite, por exemplo, a previsão de resultados de experimentos ainda não realizados. A partir das medidas de reflexão externa em configuração de ângulo rasante com radiação não polarizada obtivemos as constantes óticas de filmes finos de polipirrol preparados eletroquimicamente, enquanto que através das medidas de reflexão interna com radiação polarizada perpendicular ( $s$ ) e paralelamente ( $p$ ) ao plano de incidência o índice de refração complexo de filmes de pACATI obtidos pela técnica de Langmuir-Blodgett. Serão ainda apresentados resultados iniciais de um estudo exploratório das diferenças que surgem no perfil espectral, tanto para o filme de PPY quanto para o de pACATI, como consequência da técnica experimental escolhida. (Apoio: FINEP, CNPq e BNB)

### ESTUDO TEÓRICO DAS PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE POLÍMEROS CONDUTORES BASEADOS NO BORO

ALEXANDRE CAMILO JR, RICARDO POSSAGNO  
*Universidade Estadual de Ponta Grossa - Depto de Física*  
DOUGLAS SOARES GALVÃO

*Universidade Estadual de Campinas - IFGW - DFA*

Em anos recentes, tem-se investigado a possibilidade de se obterem novos polímeros condutores através de mudanças seletivas nas estruturas químicas, procurando obter materiais com propriedades físicas e químicas melhoradas (condutividade elétrica e resistência à oxidação, por exemplo). Tanaka e colaboradores [1] mostraram que é possível o desenvolvimento de polímeros com propriedades metálicas usando seletivamente heteroátomos (como boro e nitrogênio) incorporados no esqueleto de polímeros heterocíclicos, de modo a "modular" o número de elétrons PI que dá origem às propriedades metálicas. Yamanaka e colaboradores [2] realizaram um estudo sobre as estruturas eletrônicas de 3 moléculas de diboranas (1,2-diborana; 1,3-diborana; 1,4-diborana) por meio de cálculos ab initio ao nível HF/6-31G\*. Das moléculas de diboranas estudadas, 1,3-diborana e 1,4-diborana têm propriedades topológicas para serem células unitárias de polímeros condutores [poli(p-2,6-diborafenileno) e poli(p-1,4-diborafenileno)].

Aqui apresentamos resultados do estudo feito nas moléculas de diboranas, por meio de métodos semi-empíricos (MOPAC-AM1). Os resultados semi-empíricos que obtivemos (estrutura geométrica e população do orbital PI) se comparam bem com os ab initio [2], mostrando que o AM1 descreve bem esses compostos. Estudamos então a evolução da estrutura geométrica, em função do tamanho das cadeias, para oligômeros de poli(p-1,4-diborafenileno) e poli(p-2,6-diborafenileno), combinando os resultados obtidos para a geometria com outros métodos semi-empíricos adequados à análise espectroscópica (INDO/CI, Hückel estendido, Hückel simplificado). Esse estudo fornece subsídios para a utilização das propriedades únicas do boro no design de novos polímeros condutores com melhores propriedades estruturais e eletrônicas.

[1] - K.Tanaka, S.Yamanaka, K.Ueda, S.Takeda e T.Yamabe *Synthetic Metals*, 20(1987), 333-345

[2] - S.Yamanaka, T.Inoue, T.Aoyagi e T.Komatsu *Synthetic Metals*, 46(1992), 221-225

### ESTRUTURA ELETRÔNICA EM DERIVADOS DE POLIAZINA EM PRESENÇA DE DEFEITOS CONFORMACIONAIS.

JORDAN DEL NERO, BERNARDO LAKS  
UNICAMP

A descoberta em 1977 por Shirakawa e co-autores de que o trans-poliacetileno, quando controlavelmente dopado, apresenta condutividade elétrica variando de 13 ordens de grandeza, passando de isolante a metal, despertou enorme interesse teórico e experimental no estado dos polímeros orgânicos conjugados. Um desses polímeros são as poliazinas que se obtêm pela repetição

da unidade imina. Estes sistemas são isoeletrônicos ao poliacetileno mas, devido a presença dos átomos de nitrogênio, são muito mais estáveis. Trabalhos experimentais com as poliazinas mostram que, quando dopadas com Iodo, apresentam características metálicas. Os sistemas derivados da poliazina apresentam estrutura planar e, conseqüentemente, pequena interação  $\sigma$ - $\pi$ . Contrariamente ao poliacetileno, o estado fundamental das poliazinas é não degenerado e portanto os portadores de carga são associados a defeitos do tipo pólaron e bipólaron. Neste trabalho nós apresentamos a estrutura eletrônica dos derivados de poliazinas na presença de defeitos conformacionais do tipo bipólaron. Estes defeitos conformacionais foram feitos de forma ordenada e aleatória na cadeia do polímero. A densidade de estados eletrônicos é determinada pela técnica NFC (negative factor counting) e a função de onda correspondente ao HOMO pelo método de iteração. Nossos resultados indicam que à possibilidade do sistema de derivados de poliazina estarem no regime metálico, provocando uma transição isolante metal no sistema.

#### ELECTRICAL CHARACTERIZATION OF POLY(O-METHOXYANILINE) AND POLY(VINYLSULFONIC ACID) SELF-ASSEMBLED FILMS

MARIA RAPOSO

*Departamento de Física, Faculdade de Ciências e  
Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa, 2825 Monte  
Caparica, Portugal*

LUIZ HENRIQUE CAPARELLI MATTOSO

*CNPDIA/EMBRAPA, CP 741, 13560-970, São Carlos,  
SP, Brasil*

OSVALDO NOVAIS OLIVEIRA JR

*Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São  
Paulo, CP 369, 13560-970 São Carlos, SP, Brasil*

This work is aimed at the electrical characterization of self-assembled (SA) films obtained by spontaneous adsorption of alternate layers of poly(o-methoxyaniline) (POMA) and poly(vinylsulfonic acid) (PVS) onto solid substrates. The in-plane electrical conductivity of SA films deposited on hydrophilized glass and Teflon FEP was measured by the four-probe and two-point methods. In the latter method, two vacuum evaporated electrodes of either aluminium or gold were deposited on the SA film surface. The conductivity is dependent upon the environment conditions and also on the time period during which the electrical field is applied. At room conditions, i.e. relative humidity of 50% and  $T = 23^{\circ}\text{C}$ , the conductivity decreases to less than 30% of its original value within two hours, if the sample is submitted to an applied field. When the sample is stored with no applied field the decrease in conductivity is much slower. In a nitrogen atmosphere the conductivity also decays with time but a steady state is attained, whose conductivity value is approximately 0.005 S/cm.

An electrochromic effect was also observed, namely the UV-vis absorbance peak had its intensity decreased and shifted towards shorter wavelengths owing to the application of the electric field. The bulk conductivity is now being measured with the two-probe method by using self-assembled (SA) POMA/PVS films deposited on aluminium and ITO substrates, the second electrode being obtained by vacuum evaporation of aluminium or gold.

#### ADSORPTION ISOTHERMS FOR POLY(O-METHOXYANILINE) ON SELF- ASSEMBLED FILMS

MARIA RAPOSO

*Departamento de Física, Faculdade de Ciências e  
Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa, 2825 Monte  
Caparica, Portugal*

RICARDO SCUDELER PONTES, OSVALDO NOVAIS  
OLIVEIRA JR

*Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São  
Paulo, CP 369, 13560-970 São Carlos, SP, Brasil*

LUIZ HENRIQUE CAPARELLI MATTOSO  
CNPDIA/EMBRAPA, CP 741, 13560-970, São Carlos,  
SP, Brasil

The adsorption mechanisms of poly(o-methoxyaniline) (POMA) on hydrophilized glass substrates were investigated by UV- vis spectroscopy. The time dependence of the adsorbed amount for the first POMA layer showed that the kinetics of adsorption comprises two main processes: a fast, initial nucleation process with a characteristic time of 5-10 s, and a subsequent, much slower process (characteristic time of hundreds of seconds) attributed to the polymer layer buildup. Accordingly, the data were fitted with a fast, first-order kinetics process followed by another one described by a Johnson-Mehl-Avrami function with  $tn$  in the exponential. It was also observed that the amount of POMA adsorbed increases with an increasing number of immersions into the POMA solution, even if the total time of immersion is kept the same. This surprising finding is probably associated with the drying procedure between immersions that apparently makes room for additional polymer molecules to be adsorbed. Such studies were then extended by using various polymer concentrations which then allowed adsorption isotherms to be obtained. At room temperature, the adsorption isotherm for POMA on hydrophilized glass reveals a steep rise at low concentrations, indicating a high affinity between POMA and glass. This rise was followed by a plateau corresponding to an amount of adsorbed POMA per unit area of about 2.8 mg/m<sup>2</sup>, which is a typical value for polymers and is consistent with our kinetics results for the first POMA layer.

## SISTEMAS COMPLEXOS: POLÍMEROS E FLUÍDOS (Aplicações Tecnológicas e RMN de Polímeros)

### SISTEMAS COMPLEXOS: POLÍMEROS E FLUÍDOS (Caracterização, Aplicações Tecnológicas e RMN em Polímeros) – 13/06/97

#### A MODEL FOR PREDICTING ELECTROCHEMICAL PARAMETERS OF A QUARTZ CRYSTAL MICROBALANCE IN CONTACT WITH A LIQUID.

DAVID MENDEZ SOARES, MÁRIO A. TENAN

IFGW - UNICAMP

SABINE WASLE

*Fritz Haber Inst.-Max Planck Gesellschaft-Berlin-Germany*

The Electrochemical Quartz Crystal Microbalance, EQMB, has in recent years been used to provide a wealth of physicochemical information on a variety of chemically diverse systems. The shifts of the resonant frequency  $f_0$  and of the resonant resistance  $R'$  were used to study the viscoelastic properties of liquids and polymers. Kanazawa [K. K. Kanazawa and J. G. Gordon II, *Anal. Chem.* **57**,1771(1985)], developed a formula relating  $f_0$  to properties of newtonian liquids. However, the experimental data values reported for several liquids such as water, sucrose solutions, and ethanol, etc, are generally greater, roughly by a factor of two, than those predicted by Kanazawa's [R. Schumacher, *Angew. Chem. Ind. Ed. Engl* **29**, 329 (1990)]. On the other hand, the resonant resistance  $R'$ , related to the losses in the vibrating medium, was calculated by Muramatsu et al. [H. Muramatsu, E. Tamiya, and I. Karube, *Anal. Chem.* **60**, 2142 (1998)], but it involves a unknown electromechanical coupling factor. To avoid the difficulties of handling with mechanical and electrical parameters of the quartz crystal, without knowing their inter-relationship, and to get a better accordance between theory and experimental data, we developed a simple model to calculate and predict all electrical and mechanical parameters of the EQMB. Experimental values from the literature and our data on water-glucose solutions are in excellent agreement with theory [D. M. Soares and M. A. Tenan, to be published].

#### Ressonância paramagnética eletrônica de fluidos magnéticos dopados

G. J. DA SILVA, P. C. MORAIS, F. A. TOURINHO

*UnB*

A técnica de ressonância paramagnética eletrônica foi recentemente utilizada para estudar fluidos magnéticos iônicos dopados com  $\text{Cu}^{2+}$ . Os fluidos magnéticos iônicos, por apresentarem uma suspensão de partículas nanoscópicas em meio aquoso, permitem que seja introduzida uma grande variedade de íons paramagnéticos como dopantes na fase aquosa. Esta possibilidade amplia consideravelmente a área de aplicabilidade da técnica de ressonância ao estudo de fluidos magnéticos iônicos dopados. A dopagem de uma amostra de fluido magnético iônico à base de  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$ , com  $\text{Cu}^{2+}$  aquoso, permitiu a determinação dos parâmetros característicos da polidispersidade, ou seja, o raio médio ( $R_0$ ) e o desvio padrão ( $\sigma$ ) associados a uma distribuição do tipo log-normal. Foi mostrado que este procedimento de dopagem é especialmente interessante para o caso de fluidos magnéticos iônicos com elevada constante de anisotropia, onde a ressonância magnética da partícula pode ser facilmente subtraída da ressonância magnética do íon dopante. No presente trabalho novas amostras de fluido magnético à base de  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$ , foram dopadas com o centro paramagnético  $\text{Cu}^{2+}$  aquoso. Foram utilizados vários níveis de dopagens e os espectros de ressonância foram obtidos à temperatura ambiente usando um espectômetro de banda-X, sintonizado em uma frequência em torno de 9.65 GHz. A forma de linha de ressonância foi analisada a partir de um modelo que considera uma função para a distribuição dos íons dopantes nas amostras. O modelo leva em consideração a modificação da força iônica do fluido magnético para cada nível de dopagem. Os resultados das análises das formas de linha de ressonância permitiram estimar os parâmetros da polidispersidade, a distância média entre as partículas, e o comprimento de Debye da dupla camada em torno das partículas, para cada uma das amostras.

#### Síntese e caracterização de fluidos magnéticos iônicos à base de partículas ultrafinas (2-5nm)

R. A. DA SILVA, I. D. SANTOS, F. A. TOURINHO,  
P. C. MORAIS

*UnB*

A utilização de fluidos magnéticos em tecnologias de ponta e em diversos campos da ciência tem sido crescente nos últimos anos, o que evidencia a importância de sua pesquisa. O comportamento dos fluidos magnéticos permite o emprego de materiais magnéticos na forma de matriz líquida, onde fluidez e magnetismo se confundem. Por outro lado, os fluidos magnéticos são materiais magnéticos nanoestruturados e portanto apresentam propriedades características de

tais materiais, isto é, propriedades influenciadas fortemente pelas dimensões do sistema. Pesquisas recentes, envolvendo fluidos magnéticos, estão permitindo elucidar importantes fenômenos deste domínio, a exemplo do fenômeno da reorientação de spins na superfície de nanopartículas. A síntese de fluidos magnéticos com partículas à base de ferritas do tipo espinélio  $MF_2O_4$  ( $M^{+2} = Fe, Co, Mn, Cu, Zn$  e  $Ni$ ), com diâmetro médio na faixa de 8 a 15 nm, solubilizadas num largo espectro de solventes, já esta estabelecida. Contudo, a possibilidade de utilização destes materiais em domínios totalmente inéditos (fluidos magnéticos biocompatíveis) requer partículas de diâmetro médio na faixa de 2-5 nm, representando um desafio para as equipes que hoje detêm as tecnologias de síntese. Neste trabalho apresentamos a síntese de fluidos magnéticos iônicos à base de partículas ultrafinas (2-5nm) de ferritas de cobalto e de manganês e sua caracterização com medidas de difração de raios X (diâmetro médio), microscopia eletrônica (diâmetro médio e polidispersão) e magnetização (magnetização a saturação, diâmetro médio e polidispersão). A síntese das partículas ultrafinas foi conduzida hidrotérmicamente onde, parâmetros como pH, força iônica, formação de complexos e densidade do meio intervêm no valor do diâmetro crítico

### ORDENAMENTO INDUZIDO POR SUPERFÍCIE EM FERROFLUIDOS IÔNICOS E SURFACTADOS.

CELSO YUJI MATUO, ANTONIO MARTINS FIGUEIREDO NETO

*Instituto de Física - Universidade de São Paulo*  
ALAIN BOURDON

*Laboratoire d'Acoustique et Optique de la Matière Condensée - Université Pierre et Marie Curie*

AGNÈS BEE

*Laboratoire de Physicochimie Inorganique - Université Pierre et Marie Curie*

Através de medidas ópticas foi realizado um estudo que investiga a existência de um ordenamento de um filme fino de ferrofluido provocado pelas superfícies de um porta-amostras. Foram utilizadas amostras de ferrofluido iônico e surfactado. O arranjo experimental consiste de um "laser" de  $He-Ne$  de  $10mW$  de potência, cuja fase é modulada por um modulador fotoelástico, que atinge a amostra. A intensidade de luz transmitida é detectada por um analisador e um fotodiodo conectado à um amplificador "lock-in". O plano  $x-y$  é perpendicular à direção de propagação da luz (eixo  $z$ ). O porta-amostras consiste de uma cubeta cilíndrica de quartzo com caminho óptico de  $0,5mm$ , que pode ser girada em torno do seu eixo de simetria (eixo  $z$ ) com passos de  $0,5^\circ$ . Foram realizadas medidas da transmitância  $I$  em função do ângulo de rotação  $\theta$ , onde  $\theta$  é o ângulo entre o eixo  $x$  e um eixo arbitrário  $x'$ , fixo na parede da cubeta. A análise dos dados foi re-

alizada através do ajuste de uma equação teórica da transmitância em função de  $\theta$ . A equação teórica foi obtida através de um tratamento matricial para um sistema composto por diferentes camadas birrefringentes. Através dos ajustes foram obtidos os valores das direções de orientação ( $\gamma_1$  e  $\gamma_2$ ) das camadas birrefringentes em relação ao referencial de laboratório, e também o valor da defasagem provocada pelas mesmas. Foi verificado que as paredes de quartzo do porta-amostras induzem uma orientação aos filmes finos de ferrofluido aderidos às superfícies, onde essa orientação é quase perpendicular ao diretor do porta-amostras, resultando numa birrefringência nos ferrofluidos iônicos e surfactados, mesmo na ausência de campo magnético.

Apoio financeiro: FAPESP

### ESTUDO DE MATERIAIS ELETROATIVOS COMPOSITOS (ELETROLITOS POLIMERICOS/CARBO N BLACK)

AUDREY RODRIGUES MOREIRA, JEAN MICHEL PERNAUT, ARMANDO LOPES DE OLIVEIRA

UFMG

As propriedades elétricas dos materiais orgânicos condutores suscitam um grande interesse, tanto sob o ponto de vista da compreensão dos mecanismos de transferências de cargas, como da possibilidade de usá-los em dispositivos eletrônicos, opto-eletrônicos e de estocagem de energia elétrica. Trabalhamos com um material compósito polimérico com condução elétrica mista (eletrônica e iônica), o que nos obrigou a vencer as seguintes etapas: Otimizar o método de preparação do compósito (via solvente e via térmica) e variar a natureza dos componentes, principalmente do carbon black. Desenvolver uma célula para as medidas elétricas com controle rigoroso da temperatura, geometria da amostra e atmosfera interna e uma metodologia de aquisição de dados. Criar e/ou aperfeiçoar programas de tratamento de dados da espectroscopia de impedância e estabelecer os circuitos elétricos equivalentes. Confrontando os resultados elétricos da análise térmica dos materiais, propor um modelo global. Neste ponto, precisamos ressaltar as dificuldades dessa tarefa, sabendo que, segundo a concentração de carbon black no compósito, o material passa de um condutor iônico, a um condutor misto e finalmente a um semiconductor eletrônico. Segundo é de nosso conhecimento, somente existem modelos bem descritos para polímeros condutores iônicos (eletrolito polimérico) e para compósitos de carbon black disperso em polímeros dielétricos. Montar dispositivos capacitores e determinar suas características elétricas. Levando-se em conta a importância do aspecto aplicado do tema do nosso trabalho, fazemos uma curta revisão sobre as propriedades dos materiais estudados, em seguida apresentamos os métodos de investigação e esclarecemos os

fenômenos físico-químicos envolvidos. A discussão dos aspectos mais importantes de nossos resultados é apresentada sucintamente.

### ESTUDO DA INFLUÊNCIA DO ADITIVOS EM MICELAS DIRETAS

CILÁINE VERÔNICA TEIXEIRA, ROSANGELA ITRI,  
LIA QUEIROZ DO AMARAL  
IFUSP

Sistemas binários de lauril sulfato de sódio (SLS)/água e ternários de SLS/água/decanol foram estudados, a altas concentrações de SLS, por espalhamento de raios-X a baixos ângulos. Observou-se que a presença do decanol leva o sistema à transição isotrópica (I) - hexagonal ( $H\alpha$ ) - nemática (N) líquido cristalinas, enquanto que nas fases binárias ocorre uma transição I-H. Isso nos dá indícios de que o decanol deve alterar a forma das micelas, levando-as à formação de diferentes estruturas. Isso ocorre porque o decanol tem a tendência de alojarse nas regiões mais achatadas, evitando as superfícies curvas ou tornando-as achatadas. Como a altas concentrações é difícil obter-se informação sobre a forma micelar independente do fator de interferência entre micelas através das curvas de espalhamento, o presente trabalho tem como objetivo estudar o efeito da adição do decanol a micelas de SLS em sistemas mais diluídos, nos quais temos a predominância do fator de forma. Neste contexto, amostras de 5% e 10% em peso de SLS/água foram estudadas na presença de decanol ( $M_d=0,20$ , onde  $M_d$  é a razão molar decanol/SLS).

As curvas de espalhamento foram analisadas através do ajuste da função distribuição de distâncias ( $p(r)$ ), a partir das quais calculou-se a distribuição de densidade eletrônica das micelas. Os resultados indicam que o decanol altera a simetria da micela, que passa da forma esférica para a cilíndrica. Esse efeito foi comparado com a ação de um anestésico local, a tetracaína, a qual apenas aumentou o tamanho das micelas, sem alterar sua simetria.

vant to investigate the mechanisms determining light emission.

So far, theoretical investigations have been carried out through HF/CI (Hartree-Fock with Configuration Interaction) for small oligomers, and through LDA (Local Density) approaches for infinite periodic chains. A comparison between both approaches would be important in order to discriminate between molecular-like (localized) and extended character of the optical activity. However, HF/CI results are not easily compared to standard LDA results since the latter do not include Coulomb correlation between electrons and holes. Moreover, both approaches do not allow the description of non-linear effects arising in the high-photoexcitation regime typical of laser device operation.

In this work, we start by performing fully *ab initio* LDA calculations of structural and electronic properties of 1D chains of PPP and PPV. Total-energy calculations are based on the pseudopotential and supercell approximations. Atoms are fully relaxed to the ground-state configuration according to their Hellman-Feynman forces. We find structural parameters (bond lengths and angles) in excellent agreement with experimental results. Our calculated band structures are also in agreement with previous LDA results.

To calculate the optical properties, the LDA eigenstates are used as input for a many body description based on semiconductor Bloch equations (SBE), following a theoretical approach successfully applied to quantum wires obtained from conventional compound semiconductors [2]. The role of correlation and excitonic effects is investigated in the linear as well as in the non-linear regimes, and compared to previous findings for other quasi-one dimensional systems.

We acknowledge the use of supercomputer facilities at NACAD-COPPE (UFRJ).

[1] Tessler *et al*, Nature **382**, 695 (1996); Hide *et al*, Science **273**, 1833 (1996).

[2] F. Rossi and E. Molinari, Phys. Rev. B **53**, 16462 (1996); Phys. Rev. Lett. **76**, 3642 (1996).

### AB INITIO STUDIES OF STRUCTURAL, ELECTRONIC AND OPTICAL PROPERTIES OF PPP AND PPV

RODRIGO B. CAPAZ

Instituto de Física, UFRJ

MARÍLIA J. CALDAS

Instituto de Física, USP

FAUSTO ROSSI, ELISA MOLINARI

Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Modena, Italia

Poly(*para*-phenylene) (PPP) and poly(*para*-phenylene vinylene) (PPV) are among the most promising materials for polymer-based optical devices. The recent observation of lasing activity from PPV [1] has attracted even more interest to these materials. It is thus rele-

### FABRICAÇÃO, CARACTERIZAÇÃO E MODELAMENTO DE TRANSISTOR TIPO FET DE POLI(O-METOXIANILINA)

ROBERTO KOJI ONMORI

Escola Politécnica da USP - Brasil

LUÍS HENRIQUE C. MATTOSO

CNPDIA/EMBRAPA São Carlos - SP - Brasil

ROBERTO MENDONÇA FARIA

Instituto de Física de São Carlos - USP - Brasil

Uma das aplicações mais promissoras dos materiais poliméricos condutivos está na área de dispositivos eletrônicos e fotônicos. Esse trabalho apresenta um transistor modulado por campo elétrico (FET) tendo como material de condução a poli(o-metoxianilina) - POMA- dopada com ácido clorídrico. O dispositivo é

montado sobre um substrado de silício fortemente dopado (tipo-p), que serve como eletrodo de porta. Sobre o silício foi crescida uma fina camada de  $SiO_2$ . Ouro evaporado constituiu os eletrodos de fonte e de dreno. Um filme de POMA de aproximadamente 20 nm foi depositado sobre essa estrutura pela técnica de spin-coating. Para a construção do dispositivo foi feito um trabalho de adequação dos processos tradicionais de fotolitografia com os tratamentos químicos recebidos pela POMA no processo de dopagem. O comportamento do dispositivo depende fortemente do grau de dopagem do filme de POMA assim como de sua espessura. A geometria usada para os eletrodos foram em forma de pente,

e as distâncias fonte-dreno variaram de 10 a 30  $\mu m$ . O dispositivo apresentou curvas características  $I_D$  vs  $V_D$  semelhantes a dispositivos FET tradicionais mesmo com  $V_G = 0$ . Para  $V_G < 0$  observou-se aumento de  $I_D$ , e para  $V_G > 0$  uma diminuição. Um modelo de condução do dispositivo baseado em contatos Schottky tendo buracos como portadores de condução foi desenvolvido e ajustou muito bem as curvas do dispositivo. Sob irradiação na faixa do visível houve um considerável aumento na corrente  $I_D$ , mostrando o caráter fotocondutor do dispositivo.

---

## SISTEMAS COMPLEXOS: POLÍMEROS E FLUÍDOS (Mecânica Estatística de Polímeros)

### SISTEMAS COMPLEXOS: POLÍMEROS E FLUÍDOS (Me- cânica Estatística de Polímeros) – 11/06/97

#### CHAOS IN POLYMERS

LIACIR DOS SANTOS LUCENA, JOAQUIM ELIAS DE FREITAS, HÊNIO HENRIQUE ARAGÃO REGO, LUCIANO RODRIGUES DA SILVA

*Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Departamento de Física*

JOSÉ SOARES DE ANDRADE JÚNIOR

*Universidade Federal do Ceará, Departamento de Física*

CONSTANTINO TSALLIS

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas*

Polymers have a very complex structure and dynamics. This is true specially for branched polymers in disordered media because the competition between several conflicting effects. In particular, a model that we have proposed to describe the growth of branched polymers in a media with quenched disorder (*Lucena et al, PRL 72, 230 1994*) has shown a great variety of features related to complexity, including a diverse fractality and criticality, non-linear effects, finite-infinite phase transitions and roughening transitions. This model has attracted a lot of attention from the physicists because of its unexpected results.

Recently it was also reported the occurrence of self-organized criticality in this system (*Andrade, Lucena, Alencar and Freitas, PHYSICA A, in press*). Under certain conditions the system is driven spontaneously to the critical state, without the need of a fine tuning of the parameters. We have studied this phenomenon numerically by computer simulation and also by using mean field differential equations.

In this work we have investigated the chaotic behavior of this system. After the system reaches the stationary regime, near the criticality, we make a copy of it and we introduce in the copy a very small perturbation measured by the initial Hamming distance  $\Delta x(0)$ . We analyse the temporal evolution of both systems, subject to the same conditions. We then measure the Hamming distance at time  $t$ ,  $\Delta x(t)$ . In this problem we have found that the sensitivity to the initial conditions is not characterized by an exponential-law, but rather by a power-law. We have been able to make a connection with the Tsallis Statistics, using a generalized Liapunov exponent,  $\lambda_q$ , defined by the expression

$$\lim_{\Delta x(0) \rightarrow 0} \frac{\Delta x(t)}{\Delta x(0)} = [1 + (1 - q)\lambda_q t]^{1/(1-q)}.$$

The numerical results are consistent with a weak sensitivity to the initial conditions.

#### CRESCIMENTO E CONFINAMENTO DE POLÍMEROS ENTRE PLANOS PARALELOS POR SIMULAÇÃO DE MONTE CARLO

ADRIANO DE OLIVEIRA SOUSA, ANTONIO  
FERNANDES SIQUEIRA

*Universidade Federal do Ceará*

O confinamento de macromoléculas restritas a uma região limitada por superfícies, representa um problema de interesse não apenas tecnológico, mas sobretudo multidisciplinar. As condições de interação entre as paredes e os monômeros da macromolécula são fundamentais no processo de confinamento. Uma vez que são representadas como longas cadeias compostas por pequenas unidades moleculares ligadas por ligações químicas,

e devido ao fato de que estas ligações possuem certos graus de liberdade para rotacionar, obtemos cadeias flexíveis que exibem diversas formas espaciais. A aproximação estatística para o problema da descrição destas cadeias moleculares, seu tamanho médio e outras médias relacionadas com as várias distintas configurações está baseada na simulação das cadeias por uma classe de Self-Avoiding Walk (SAW), denominado Indefinitely Growing SAW (IGSAW). Para o IGSAW a condição de exclusão de volume não pode ser violada, deste modo o crescimento continua indefinidamente, pois o IGSAW analisa a existência de "gaiolas", evitando uma possível interceptação. Esta propriedade do IGSAW permite-nos gerar longas cadeias de self-

avoiding. Investigamos a possibilidade da existência de "bridge", ou seja, a macromolécula conectar com as duas superfícies. Sendo assim, tratamos o problema segundo um modelo de crescimento localmente direcional e anisotrópico. Interpretamos por anisotropia a condição de que a probabilidade para um passo em uma dada direção é diferenciada em relação as outras, e por direcional como sendo que a macromolécula possui maior probabilidade para crescer em uma direção específica. Este fato simula quatro tipos de possibilidades de interação entre as macromoléculas e as paredes, oriundas de: A) interação fraca b) atração c) repulsão. São apresentados resultados das simulações para a função de correlação, distância end-to-end, número de ligações, dimensão fractal. Como também, estabelecemos uma lei de escala que relaciona a separação das paredes com o tamanho da macromolécula, estando em concordância com o resultado numérico obtido por Hong Ji et al[1].

[1] Hong Ji and Daniel Hone, *Macromolecules*, 23, 698 (1990)

### DISTRIBUIÇÕES DE LÉVY NAS VARIÇÕES DA TEMPERATURA DO OCEANO PACÍFICO

MURILO PEREIRA DE ALMEIDA, JOSÉ SOARES DE ANDRADE JR, JOSUÉ MENDES FILHO, JOSÉ EVANGELISTA CARVALHO MOREIRA  
UFC

Neste trabalho analisam-se várias séries temporais da temperatura da água do oceano Pacífico a diversas profundidades nas longitudes 110°W, 124°W e 140°W, ao longo do equador. Estes dados de temperatura são importantes para meteorologistas e oceanógrafos que estudam o fenômeno de interação oceano-atmosfera denominado El Niño. É constatado na presente análise que estas séries apresentam comportamento do tipo *Lévy flight*.

As distribuições das variações diárias destas temperaturas são analisadas, e testadas suas adequações a distribuições estáveis simétricas de Lévy, cujas densidades têm transformadas de Fourier na forma  $\exp(-\gamma\omega^\alpha)$  com  $\gamma > 0$  e  $0 < \alpha \leq 2$ .

As estimativas dos coeficientes  $\alpha$  foram obtidas das transformadas de Fourier empíricas dadas por

$$\varphi(w) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \cos(X_k w),$$

onde  $X_k$ ,  $k = 1, \dots, N$  são as  $N$  variações diárias da temperatura para dada profundidade e longitude. Para remover o efeito do tamanho finito da amostra retira-se a cauda e a parte próxima de  $w = 0$  de  $\varphi(w)$ . Plotando-se  $\ln(-\ln \varphi(w)) \times \ln(w)$  para a parte restante da função obtém-se um gráfico aproximadamente reto, cuja inclinação dá exatamente o valor estimado de  $\alpha$ . Para testar a eficiência do processo de estimativa do

expoente  $\alpha$  foram feitos exaustivos testes com dados simulados de acordo com distribuições de Lévy, recuperando-se os valores usados nas simulações.

Para as diversas longitudes observa-se que os coeficientes  $\alpha$  decrescem com a profundidade até atingirem um valor mínimo próximo de um isto ocorrendo na vizinhança da termoclina, região caracterizada por grandes flutuações no campo de temperatura.

Os dados analisados compreendem observações diárias de temperatura da água do oceano Pacífico compilados pelo projeto NOAA/PMEL/TOGA-TAO, que os coleta com sensores ancorados ao longo do equador.

### SISTEMAS DE COPOLÍMEROS DE BLOCO COM CAMPO EXTERNO

MONICA BAHIANA

Universidade Federal do Rio de Janeiro

Estudamos o efeito de um campo externo, por exemplo o campo gravitacional, na formação dos domínios em misturas de copolímeros de bloco do tipo A-B na fase lamelar. O campo externo tem como efeitos principais o alinhamento das camadas e o retardamento da segregação. O processo de segregação da mistura é simulado por meio de um sistema dinâmico celular semelhante ao já utilizado anteriormente para estudos da dinâmica de separação de fases em diversos sistemas. Nesse método de simulação, normalmente consideramos a conservação do parâmetro de ordem apenas através de uma média sobre um número finito de vizinhos, o que leva, no limite contínuo, à equação de Cahn-Hilliard para a decomposição spinodal. Este procedimento, entretanto, elimina o efeito do campo no *bulk*. O campo apareceria apenas através das condições de contorno e seu efeito poderia ser adiado indefinidamente em sistemas infinitos. A introdução do campo externo neste tipo de modelo não é trivial; é necessário que a dinâmica de troca de Kawasaki será considerada explicitamente. Podemos mostrar que uma versão contínua deste modelo leva a uma equação tipo Cahn-Hilliard modificada em que a mobilidade é uma função do parâmetro de ordem.

### CONDUTIVIDADE DE VOLUME AC EM FILMES DE POLIPROPILENO-GLICOL

RODRIGO FERNANDO BIANCHI, KARIM DAHMOUCHE, TITO JOSÉ BONAGAMBA, ROBERTO MENDONÇA FARIA

Instituto de Física de São Carlos - USP

Sistemas desordenados orgânicos-inorgânicos obtidos pelo processo de sol-gel com a mistura de 3-isocianatopropiltrióxosilano (Iso-TEOS), 0,0'-bis-(2-aminopropil)-polipropilenoglicol e sal de lítio ( $LiCLO_4$ ), denominados pelo termo geral de ORMOLYTE (organically modified electrolytes), apresentam

uma alta estabilidade quando comparados aos OR-MOLYTES convencionais e um comportamento de condutividade elétrica ac, associado aos portadores iônicos, em função da frequência de um campo elétrico aplicado,  $\sigma(\omega)$  vs.  $\omega$ , semelhante aos obtidos por sistemas amorfos inorgânicos. Esse comportamento, às vezes denominado e representado por uma curva universal, mostra que a condutividade elétrica alternada ac independe de  $\omega$  nas regiões de baixas e altas frequências, variando com  $\omega^n$  em uma faixa intermediária entre estes dois patamares. O objetivo deste trabalho é apresentar uma série de medidas

$\sigma(\omega)$  com amostras híbridas orgânica-inorgânicas numa estrutura

reticulada de polipropileno-glicol com sílica e com o portador iônico  $\text{Li}^+$  com concentração fixa, para temperaturas entre nitrogênio líquido a 400K, no intervalo de frequência de 1 a  $10^6$  Hz, utilizando um impedanciômetro Solartron, um criostato Janis e uma estufa de aquecimento. Os resultados são explicados a partir de um modelo simplificado com dois sistemas de relaxação representando os processos intra e intermoleculares relacionados ao material. Um processo, o mais lento, estaria em princípio vinculado a mecanismos onde o portador pode migrar em distâncias relativamente longas. O segundo processo, na região de alta frequência, obtém o sinal de um processo de oscilação de portadores localizados. Os ajustes teórico-experimentais permitem estimar parâmetros como taxas de relaxação de transição de cargas e caminho livre médio dos portadores em função da temperatura.

(FAPESP)

## SISTEMAS COMPLEXOS: POLÍMEROS E FLUÍDOS (Mecânica Estatística de Polímeros)

– 12/06/97

### INJEÇÃO DE CARGA DE BLENDA DE POLIANILINA / POLI METIL METACRELATO PARA O POLI P-FENILENO VENILENO

JOAQUIM ROBERTO DE LIMA, IVO ALEXANDRE  
HÜLMMEGEN

*Laboratório de Materiais, Departamento de Física,  
Universidade Federal do Paraná.*

C. C. M. FORNARI JR, C. A. FERREIRA

*Laboratório de Materiais Poliméricos, Departamento de  
Materiais, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.*

Neste trabalho são apresentadas investigações das propriedades elétricas da interface de blendas de Polianilina (PANI) e Poli Metil Metacrelato (PMMA) com Poli

(1,4 Fenileno Venileno) (PPV); onde o PPV é um semicondutor orgânico e a PANI é um polímero condutor que apresenta: solubilidade (facilidade de processamento), estabilidade no ar e estabilidade térmica. Estas blendas (preparadas com a PANI dopada com Ácido Canfor Sulfônico (CSA) dissolvida em m-cresol (1% w/w) e PMMA dissolvido em m-cresol (4% w/w), numa proporção ajustada para obter uma concentração 5% w/w de PANI em PMMA), foram usadas como eletrodo injetor de buracos em dispositivos Metal/PPV/[PANI-CSA/PMMA]. Para investigar a injeção de carga na interface dos dispositivos Metal/PPV/[PANI-CSA/PMMA], amostras foram preparadas seguindo o caminho: metal evaporado sobre uma laminula de vidro, em seguida coberto com o precursor PPV por "spin-coating", que foi convertido por tratamento térmico a 250°C em atmosfera de argônio por duas horas. Finalmente recoberto com a solução PANI-CSA/PMMA e secada durante 48 horas a 55°C. Os contatos elétricos foram feitos usando cimento carbono. A altura de barreira da interface [PANI-CSA/PMMA]/PPV foi determinada associando dois procedimentos diferentes baseados nas medidas de corrente de tunelamento Fowler-Nordheim. Os dois procedimentos resultaram num valor comum de 0,23 eV. Análises de amostras com concentrações maiores de PANI em PMMA estão em curso, porém medidas preliminares indicam uma tendência de aumento da altura da barreira com o aumento de PANI na blenda.

### Mudanças conformacionais da lisozima em soluções aquosas de tetrametilureia

VALERIA CASTELLETTO

*Laboratório Nacional de Luz Síncrotron*

ELIZABETH P. G. ARÊAS

*Departamento de Química Fundamental, Instituto de  
Química, Universidade de São Paulo*

CLAUDIO BARBERATO, ALDO F. CRAIEVICH

*Laboratório Nacional de Luz Síncrotron*

Certos solventes orgânicos possuem um efeito denaturante sobre as proteínas, o mecanismo do qual não está bem compreendido até o presente. Têm sido realizados estudos no sistema água/solvente orgânico/proteína por espectroscopia Raman utilizando-se uréia, tiouréia, tetrametiluréia (TMU) ou cloreto de guanidina como solventes orgânicos e lisozima como proteína.<sup>1</sup> Estes estudos demonstraram que na presença de lisozima a uréia adquire maior liberdade rotacional e que a estrutura da água está drasticamente afetada nas condições nas quais o denaturante tem o seu máximo efeito. Utilizando-se TMU, dimetilsulfóxido (DMSO), dimetilformamida ou hexametilfosfotriamida como solventes orgânicos, verificou-se, através de uma caracterização reológica do sistema um aumento brusco da viscosidade com evolução de comportamento não newtoniano pseudoplástico, para soluções aquosas de lisozima acima de

concentrações críticas de proteína e solvente orgânico.<sup>2</sup> O processo de geração do comportamento viscoelástico pseudoplástico está caracterizado por dois estágios: na primeira etapa existe uma extensiva mudança conformacional da molécula promovida pelo solvente acima do seu ponto crítico. Numa segunda etapa são estabelecidos entre as proteínas contatos de intercadeia de tempos curtos. Reversibilidade do processo foi observada quando removido o solvente orgânico.

Este trabalho consiste na caracterização do sistema água/tetrametilureia/ lisozima utilizando curvas de espalhamento de raios X a baixos ângulos (SAXS), pois esta técnica é sensível a mudanças conformacionais de proteínas em solução. Os dados obtidos serão então interpretados através da comparação entre as curvas experimentais e as curvas teóricas obtidas através da modificação da estrutura atômica da proteína nativa segundo técnicas já bem estabelecidas.<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Arêas, E. P. G.; Ribeiro, M. C. C.; Santos, P. S. J. *Mol. Struct.* **378**, 111 (1996).

<sup>2</sup> Arêas, E. P. G.; Arêas, J. A. G.; Hamburger, J.; Peticolos, W. L.; Santos, P. S. J. *J. Coll. Sci.* **180**, 578 (1996).

<sup>3</sup> Svergun, D. I.; Barberato, C.; Koch, M. H. J. *J. Appl. Cryst.* **28**, 768 (1995). Svergun, D. I.; Barberato, C.; Koch, M. H.; Fetler, L.; Vachette, P. *Proteins* **27**, 110 (1997).

### FOLDING DE MACROMOLÉCULAS: O PAPEL DAS INTERAÇÕES HIDRÓFÓBICAS.

ROOSEVEL ALVES DA SILVA

F.F.C.L.R.P. - USP

M. A. A. DA SILVA, A. CALIRI

F.C.F.R.P. - USP

O efeito hidrofóbico desempenha papel fundamental no processo de *foldings* de macromoléculas<sup>[1]</sup>. Neste trabalho, simulamos este efeito utilizando a técnica de Monte Carlo, num modelo em rede (cúbica). O modelo considerado constitui-se de uma cadeia polimérica cujos monômeros podem interagir hidrofóbica ou hidrofílicamente com o meio (H<sub>2</sub>O). As interações fluido/cadeia envolvem somente os primeiros vizinhos. O conjunto de movimentos utilizados na simulação são aqueles clássicos, a saber: *end moves*, *corner moves* e *crankshaft moves*. A probabilidade de transição  $T$  entre duas diferentes configurações,  $X_i$  e  $X_j$ , é estabelecida como  $T(X_i \rightarrow X_j) = \exp(\Delta S/k)$  se  $\Delta S < 0$ , e = 1 de outra forma;  $\Delta S$  é a variação de entropia que o sistema sofre em se considerando alternativamente a macromolécula "congelada" na configuração  $X_j$  e  $X_i$ . Na prática da simulação, utilizamos o fato experimental [2] de que  $\Delta S = -\alpha \Delta A$ , onde  $\alpha$  é o grau de hidrofobicidade (dependente da temperatura) e  $\Delta A$  é a correspondente variação de superfície exposta da macromolécula.

Os resultados obtidos mostraram que (i)— mesmo

para sequências polimérica constituída unicamente por monômeros hidrofóbicos, para valores de  $\alpha \approx 0.7$ , a cadeia colapsa rapidamente, permanecendo estável numa conformação de baixa energia, porém com grande maleabilidade (com frequentes visitas à configuração de mínima energia global). (ii)— para um heteropolímero, contendo tanto interações hidrofóbicas quanto hidrofílicas, dependendo de cada sequência em particular, uma conformação muito mais bem definida e estável é alcançada, recobrando propriedades peculiares do comportamento de proteínas reais durante o processo *foldings*. [1]: L.F.O.Rocha, M.A.A.daSilva, A.Caliri; *Phys Lett.A220* (1996)178. [2]:C.Cochia, *Nature* **284** (1974)338.

### PHASE-DIAGRAM FOR NON-SYMMETRIC A-B COPOLYMERS

EDILSON VARGAS, MARCIA C. BARBOSA

UFRGS

Two chemically different polymers,  $A$  and  $B$ , are usually not compatible in the molten state. Therefore, as the temperature is decreased, the two species segregates. However, if the chains are crosslinked at random in such a way that the chains  $A$  becomes attached to the chains  $B$  before the temperature is decreased, then the polymers do not completely segregate because it is kept together by the cross-links. Indeed, the system separates in some microscopic scale  $2\pi/q_c$ . For symmetric composition ratios and for localized cross-links, de Gennes' found that this microphase separation occurs at a critical temperature lower than the critical temperature for complete segregation. According his model the appearance of an ordered phase is accompanied by a local polarization representing the elastic forces due to the crosslinks. For simplicity he assumed that the crosslinks are uniformly distributed and that the two species are symmetric. We generalize his theory to account for non-symmetric composition, spatial fluctuations in the cross-links and an inhomogeneities in the network. For non-symmetric uniform composition we found that the microphase separation becomes first-order. For non-uniform composition and spatial fluctuations in the cross-links, besides the usual microphase, another microphase, an homogeneous phase and a segregation phase also appear. All those phases meet at an end point that is the end of the critical line between the homogeneous phase and the microphase. We show that the first-order between the homogeneous phase and the microphase and the segregation phase exhibit non-analyticities related to the singularities present at the critical line.

## INFLUENCE OF THE TAIL LENGTH ON THE CONDENSATION TEMPERATURE

LUIZ HENRIQUE C. MERSCHMANN, AMÉRICO TRISTÃO BERNARDES

*Universidade Federal de Ouro Preto*

Amphiphilic molecules (like soap) in aqueous solutions can form a large variety of supra-molecular aggregates. Monte Carlo simulations of lattice models have been used in the last years in order to obtain dynamical properties as well as qualitative equilibrium description of the different phases obtained in these complex systems. An important property of these solutions is the condensation transition temperature, i.e., the temperature below which surfactant molecules aggregate to one big cluster. This has some important implications. For example, detergent below that temperature would be useless. In this work we use an improved version of a Larson-type algorithm to study the influence of the tail length on the condensation transition temperature. Computer simulations have been performed in 3 -  $d$  ternary systems (water-oil-surfactants) with low surfactant concentration for different temperatures. The transition temperature is obtained through the dynamical behaviour of the system: the trend to form one cluster or many micelles. We have used molecules with *tail* 4 and 8 monomers. In agreement with experimental data we have observed that the increasing of the tail length increases the transition temperature. The same feature has been discussed recently in the case of the Critical Micelle Concentration. In comparison with previous results, we discuss the influence of the strength of head-head attraction on that temperature. An important aspect observed in our simulations is that the length of the tail plays a more important role than the strength of head-head attraction for molecules with the same length (head plus tail lengths).

## ESTUDO DE PROPRIEDADES DINÂMICAS DE REDES POLIMÉRICAS ATRAVÉS DE SIMULAÇÕES EM COMPUTADOR.

ALVARO VIANNA TEIXEIRA, PEDRO LICINIO UFMG

Informações sobre a dinâmica de redes poliméricas podem ser obtidas com bastante precisão a partir de simulações de estruturas deste tipo em computador. O presente estudo mostra o resultado de simulações de redes poliméricas regulares em uma (polímero linear), duas e três dimensões usando a dinâmica Browniana. Utilizou-se o modelo de Rouse onde as interações entre as unidades poliméricas se resumem aos vizinhos mais próximos através de potenciais quadráticos, isto equivale a uma rede formada por unidades ligadas por molas. Foram ainda consideradas as forças dissipativas e térmicas do meio. Sistemas de organização complexa, como partículas difundindo numa matriz polimérica, podem apresentar uma difusão que segue uma

lei de potência em relação ao tempo (difusão anômala). As simulações mostraram que, não só essas partículas, mas as próprias redes de polímeros difundem desta forma. A análise foi feita a partir do coeficiente de difusão diferencial ( $\bar{D} \equiv d\langle \bar{R}^2 \rangle / dt$ , sendo  $\langle \bar{R}^2 \rangle$  o deslocamento quadrático médio das unidades) que também segue uma lei de potência com o tempo. Observou-se que a potência de  $t$  depende da dimensão topológica das redes de modo linear havendo um ponto crítico para  $d = 2$  que separa os regimes de difusão restrita ( $d > 2$ ) e de difusão "não-limitada" ( $d < 2$ ). Foi medida também a distribuição de probabilidade da posição das unidades com o tempo,  $\Psi(r, t)$ , e a distribuição das distâncias de unidades diferentes. No primeiro caso  $\Psi$  segue uma distribuição normal e no segundo é resultante da soma de duas distribuições gaussianas simétricas. Sabendo-se a forma de  $\Psi$  foi possível determinar o fator de estrutura dinâmico  $S(q, t)$  relativo ao movimento de uma única unidade. Os resultados, para um dado valor do vetor de onda  $q$ , foram exponenciais alongadas no tempo para  $d = 1$  e 3 e, para o regime crítico, o fator de estrutura segue uma lei de potência no tempo.

## ESTUDO NUMÉRICO DA DINÂMICA DE CHAVEAMENTO FERROELÉTRICO DO POLI(VINILIDENO DE FLUOR).

SILVIA MARTINS DOS SANTOS, JAYME DE LUCA, ROBERTO MENDONÇA FÁRIA IFSC-USP

Apresentamos um estudo fenomenológico baseado num modelo de Dinâmica Hamiltoniana para explicar fenômenos de polarização ferroelétrica reversa em poli(vinilideno de fluor) (PVDF) e copolímeros feito com poli(trifluoretileno) (PTrFE). A estrutura cristalina  $\beta$ -PVDF é ortorrômbica, mas muito próxima de uma hexagonal. Por esse motivo apresentamos duas possibilidades para a Hamiltoniana  $H = \sum \frac{P_i^2}{2I} + \frac{k(\theta_{i+1} - \theta_i)^2}{2} + E(1 - \cos(\theta_i)) + A_2(1 - \cos(n\theta_i))$ , a primeira com chaveamentos de  $180^\circ$  ( $n=2$ ) e a segunda com  $60^\circ$  ( $n=3$ ), onde  $A_2 \neq 0$ ,  $E$  é a intensidade do campo elétrico externo aplicado. A parte inicial do trabalho diz respeito à construção de um integrador simplético de quarta ordem para integrar numericamente a dinâmica do Hamiltoniano acima. Esse integrador permite um processamento rápido dos muitos graus de liberdade e tempos de integração longos. Alguns estudos numéricos já foram feitos em um modelo similar ao Hamiltoniano acima, mas com o objetivo de estudar a equipartição da energia na dinâmica, e não o tempo de chaveamento da polarização com resposta a um campo elétrico imposto, a partir de uma condição inicial onde os dipolos estão orientados aleatoriamente como proposto por este trabalho.

## RESOLUÇÃO NÚMERICA DE EQUAÇÕES DE TRANSPORTE DE CARGAS ELÉTRICAS INJETADAS POR FEIXE ELETRÔNICO EM POLÍMEROS

DANTE LUIS CHINAGLIA

*Dep. de Física e Química - UNESP - Ilha Solteira*

ROBERTO MENDONÇA FARIA, MARIANGELA

TASSINARI DE FIGUEIREDO

*Instituto de Física de São Carlos - USP*

Neste trabalho apresentamos a solução numérica do sistema de equações diferenciais parciais, que rege alguns modelos de transporte de cargas elétricas em materiais poliméricos submetidos a irradiação por feixe de elétrons de baixa energia. Este sistema de equações é composto basicamente pelas equações de Poisson, Continuidade e Cinética de Troca entre as cargas da banda de condução e as armadilhas. Consideramos que as cargas podem ser capturadas por armadilhas de superfície e de volume com um nível de aprisionamento para os portadores. Os elétrons do feixe são capturados pelas armadilhas da superfície, sendo posteriormente injetados para o volume. Isto resulta em uma das condições de contorno para o problema: a corrente de condução na superfície é dada pela carga liberada pelas armadilhas da superfície. O método empregado para a solução do sistema de equações é o das diferenças finitas. A análise é realizada para uma amostra colocada em circuito fechado mantendo-se uma ddp constante entre suas faces e um regime contínuo de irradiação. Desta análise obtém-se curvas de corrente em função do tempo que deverá ser comparadas com medidas experimentais. Outros dados como distribuição de portadores e o perfil do campo elétrico no interior da amostra também podem ser obtidos.

## ESTUDO DA CONDUTIVIDADE AC NO POLÍMERO CONDUTOR POLIANILINA

HAROLDO NAOYUKI NAGASHIMA

*DFQ-UNESP-ILHA SOLTEIRA-SP*

ROBERTO MENDONÇA FARIA, ROBERTO NICOLAU

ONODY

*IFSC-USP-SÃO CARLOS-SP*

O estudo dos processos dependentes do tempo em sistemas desordenados tem atraído uma considerável atenção nas últimas duas décadas. De especial interesse é a observação experimental da dependência da condutividade ac com a frequência:  $\sigma(\omega) = \omega^n$ , onde o expoente  $n$  está no intervalo de  $[0,5 - 1,0]$ . Tal dependência foi observada em amostras de polianilina, fracamente dopada. Neste trabalho, analisamos o comportamento da condutividade ac, no limiar de percolação, para diferentes regiões da frequência do campo elétrico aplicado. O sistema de polímeros condutores é modelado por uma rede de resistores e capacitores. A rede contém moléculas lineares que são construídas de forma aleatória, obedecendo uma distribuição gaus-

siana de massa molecular. Os cálculos são realizados utilizando a técnica da matriz de transferência, desenvolvida por B. Derrida e J. Vannimenus. Geramos um código em linguagem FORTRAN, para a determinação da condutividade complexa ac dessas redes. Através dos resultados da componente real de  $\sigma$  reconhecemos diferentes mecanismos de condução que dependem de cada região de frequência. Para baixas frequências, a condução é controlada pelo transporte eletrônico intermolecular, enquanto que para altas frequências o portador fica confinado ao longo de cada molécula. Quanto maior o grau de dopagem, mais efetivo é o mecanismo de transporte intramolecular devido à geração de estados estendidos na molécula. A condução é, em altas frequências, preferencialmente unidimensional. Em baixas frequências, a condutividade medida é pequena devido aos baixos valores de mobilidade dos portadores, que é o resultado de sua deslocalização intermolecular, o que confere ao material uma condução preferencialmente tridimensional.

## POLÍMEROS: SCALING E UNIVERSALIDADE

MARCO ANTONIO A. DA SILVA, ANTONIO CALIRI  
*F.C.F.R.P. - USP*

Classicamente é estabelecido que o raio de giração  $R$  de um polímero depende do número  $N$  de monômeros da forma  $N^\nu$ , para  $N$  grande, onde  $\nu \cong 0.60$  [P. de Gennes, *Scaling Concepts in Polymer Physics* (Cornell University Press, Ithaca, London, 1979, pgs. 39-46)] quando este está imerso em um bom solvente. Em um recente trabalho nosso [to appear in *J. Chem. Phys.*, May, 8th], é mencionado uma possível dependência deste expoente com o número de vizinhos topológicos de cada monômero. Para os casos de cadeias tetraédricas e cúbicas puramente lineares foi estimado  $\nu \cong 0.66$  com  $N$  indo até 140 pelo método EGM (Ensemble Growth Method). Experimentos com espalhamento de luz fornecem  $\nu \cong 0.60$ . O melhor valor teórico obtido fornece  $\nu \cong 0.588$  [Doi and Edwards, *The Theory of Polymer Dynamics* (Oxford University Press, Oxford, 1988, pg. 32)]. Porém dados de alguns polipeptídeos homopolímeros [Cantor and Schimmel, *Biophysical Chemistry, Part III* (W.H. Freeman and Company, New York, 1980, pg. 1008)] dão  $\nu \cong 0.5$ . Esses resultados mostram que pode existir um "crossover" para um  $N$  muito grande, onde o raio de giração muda de comportamento. Nossas recentes investigações apontam para uma mudança gradual de comportamento, a qual apenas para  $N > 1000$  converge para o valor  $\nu = 0.5$ , para qualquer caso. Polímero com este tamanho não pode ser simulado diretamente. Porém encontramos a relação  $R \propto v^{1/2}$  entre  $R$  e o "volume total excluído"  $v$  (o qual estamos considerando proporcional a todos os possíveis "overlaps" no modelo "random walk" para o polímero). Este volume possui o comportamento  $v \propto N^{1.18}$  para  $N < 500$  e

vai gradativamente convergindo para  $N^{1.00}$ , mostrando assim que  $R \propto N^{1/2}$ .

### Movimento de Carga em Amostras Desordenadas

SANDRA CRISTINA COSTA, GUILHERME F. L. FERREIRA  
USP

No estudo do movimento de excesso de cargas em isolantes desordenados, o campo elétrico e a densidade de carga devem ser considerados como funções da posição e do tempo. A densidade de corrente de condução deve ser generalizada para:

$$j_c(x, t) = c^t \int_0^t \phi(t - \tau) \rho(x, \tau) E(x, \tau) d\tau$$

onde  $c$  é uma constante,  $\rho(x, t)$  é a densidade de carga e  $E(x, t)$  é o campo elétrico. A função  $\phi(t)$  deriva da função de distribuição de tempos de saltos dos portadores,  $\psi(t)$  (Scher, H. & Montrol, E. W. - Phys. Rev. B, 12, 2455(1975)). No caso de transporte não dispersivo,  $\psi(t)$  é uma função exponencial e  $\phi(t) = \lambda \delta(t)$ , onde  $\lambda$  é uma constante. Assim, a densidade de corrente é proporcional à densidade de carga e ao campo elétrico e  $(c\lambda)$  é a mobilidade do portador. No caso de meios desordenados, a função  $\psi(t)$  difere fortemente de uma exponencial e o conceito de mobilidade deve ser modificado. Em cada problema, especificado por dadas condições iniciais e de contorno, a complicação devida à função  $\phi(t)$  é superada se trabalharmos com as transformadas de Laplace das equações que descrevem o transporte não dispersivo: estas, quando escritas no espaço de Laplace, têm a mesma estrutura das equações do transporte não dispersivo (Ferreira, G. F. L., Almeida, L. E. C. - "Space Charge Transport in Disordered Media", submetido ao Phys. Rev. B). O nosso trabalho consiste em selecionar situações de interesse experimental (injeção com corrente constante, injeção por eletródio ôhmico, descarga corona) com soluções não dispersivas conhecidas e gerar soluções dispersivas partindo-se de  $\psi(t)$  conhecidas da teoria dos dielétricos (como Cole-Cole, Davison-Cole, Havriliak-Negami e outros).

### Sistemas Complexos e Teorias de Gauge

DANIELE QUINTELLA MENDES, RENATA LENGROBER PINTO, RENATO DORIA  
Universidade Católica de Petrópolis - (UCP)

Ao mesmo tempo que unificação das quatro forças fundamentais, o momento histórico da física nos leva também a tratar a relação entre simplicidade e complexidade nos fenômenos da natureza. Polímeros, fluidos, biofísica representam alguma das regiões que requerem um tratamento sob sistemas complexos. O desafio está

em conectar o conhecimento reducionista com o conhecimento sistêmico. Diferentes pontos-de-vista têm surgido para tratar o fenômeno da complexidade tais como a Física Estatística. Acreditamos ser fundamental uma descrição a partir de Teorias de Gauge. Propõe-se que a partir de primitivos campos potenciais sejam derivados campos medíveis com caráter granular e caráter coletivo. As equações de Maxwell são estendidas. Obtém-se novas leis cujas variáveis são campos eletromagnéticos globais. Representam propostas para se analisar as propriedades de dielétricos, piezoeletricidade e ferroeletricidade a partir de um eletromagnetismo sistêmico. No contexto das teorias-de-gauge com campos granulares e campos globais, uma etapa de fundamental relevância é a busca de soluções explícitas para os campos, geradas por dadas distribuições de cargas e correntes. Devido à não-linearidade do sistema e à não-trivialidade das contribuições advindas de uma eventual dependência temporal dos campos, propõe-se, como passo inicial, o estudo de soluções estáticas, que já revelam fatos notáveis a respeito da não-linearidade. Uma vez compreendido o regime estático, poder-se-á, através de transformações de Lorentz, chegar a soluções com dependência de observadores. Finalmente, o objetivo final será atingir as soluções com dependência temporal genérica, o que deverá, também, expressar propriedades de propagação dos campos granulares e dos campos globais.

### DIFUSÃO DE MACROMOLÉCULAS EM MEIOS COMPLEXOS

HÊNIO HENRIQUE ARAGÃO RÊGO, LIACIR DOS SANTOS LUCENA  
UFRN

Usamos um modelo generalizado de reptação para estudar a difusão de polímeros lineares em meios desordenados. A partir de várias situações iniciais e diferentes condições de contorno, investigamos a evolução temporal destas cadeias em redes quadradas e medimos os tempos característicos de transporte  $\tau$ . Introduzimos um ruído congelado (quenched) representado por uma distribuição de obstáculos (impurezas inertes) de concentração  $C$  aleatoriamente dispostas. Observamos o comportamento do coeficiente de difusão  $D$  em função dos diferentes parâmetros.

Tratamos a reptação através de barreiras retangulares de concentração e de gradientes de concentração de obstáculos fixos. Analisamos os tempos característicos de confinamento  $\tau_c$  das macromoléculas em vales criados por tais barreiras. Em certos casos isto pode representar formas estáveis de obtenção de misturas poliméricas ou mesmo interfaces geradas dinamicamente entre tipos diferentes de cadeias.

Investigamos também o problema em que consideramos os obstáculos descrevendo caminhadas aleatórias sobre a rede. Aparentemente devido ao aumento do valor quadrático médio do diâmetro do tubo dentro do qual

o polímero consegue se deslocar, os resultados obtidos nos mostram um aumento do transporte das cadeias.

Estudamos ainda o caso da difusão em meios que apresentam mínimos locais de energia. Investigamos os tempos de confinamento nesses estados metaestáveis, e pesquisamos a possibilidade das macromoléculas alcançarem os mínimos globais. Introduzimos um método de recozimento simulado (simulated annealing), para otimizar o processo.

Com base nisto tudo, pudemos propor Leis de Escala para a viscosidade bem como para a mobilidade das cadeias. Discutimos o presente problema sobre o ponto de vista da teoria da Estatística Generalizada proposta por Tsallis.

### TRANSPORTE DISPERSIVO EM POLI(TETRAFLUORETILENO-CO- HEXAFLUORPROPILENO)

DANTE LUIS CHINAGLIA

*Dep. de Física e Química - UNESP - Ilha Solteira*

ROBERTO MENDONÇA FARIA, LUCAS FUGIKAWA  
SANTOS

*Instituto de Física de São Carlos - USP*

Neste trabalho utilizamos um canhão de elétrons pul-

sado para medidas que utilizam a técnica de tempo de voo. O feixe de elétrons empregado é desfocalizado, podendo-se ajustar a energia dos elétrons incidentes na faixa entre 0,4keV e 20keV. A duração do pulso pode variar de 100 $\mu$ s a 100s e a densidade de corrente utilizada pode ser menor ou igual a 10<sup>-7</sup> A/cm<sup>2</sup>. A carga é injetada na superfície frontal de uma amostra que se encontra em circuito fechado e submetida a uma ddp constante. As amostras utilizadas são de TEFLON FEP de 25 $\mu$ m de espessura possuindo eletrodos de alumínio depositados por evaporação em ambas as faces. Os resultados obtidos são analisados baseados no modelo de transporte dispersivo proposto inicialmente por Scher-Montroll. A curva log x log da corrente x tempo apresenta duas retas, uma de menor inclinação para  $t < t_r$  ( $t_r$  é o tempo de transito dos portadores e outra de maior inclinação para  $t > t_r$ . A soma das inclinações é igual a -1,96 que é um valor bastante próximo do previsto pelo modelo teórico (-2). O fator de dispersão ( $\alpha$ ) obtido é de 0,6 indicando a baixa dispersividade do sistema se comparado aos semicondutores amorfos. As curva de corrente,  $I(t)/I(t_r)$  em função do tempo,  $t/t_r$  para diferentes campos aplicados, conduzem a uma curva universal como previsto pela teoria.

## SUPERCONDUTIVIDADE (Supercondutividade Experimental)

### SUPERCONDUTIVIDADE (Experimental) – 11/06/97

#### ESTUDO DO DIAGRAMA DE FASES MAGNÉTICAS DO SISTEMA $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$

PAULO NORONHA LISBOA FILHO, WILSON AIRES  
ORTIZ

Grupo de Supercondutividade e Magnetismo Departamento  
de Física - UFSCar

SÔNIA MARIA ZANETTI, EDSON ROBERTO LEITE,  
ELSON LONGO

Laboratório Interdisciplinar de Eletroquímica e Cerâmica  
Departamento de Química - UFSCar

O estudo do diagrama de fases magnéticas do sistema  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  ainda é um problema em aberto. Este diagrama está delineado de forma semi-quantitativa, cabendo ainda determinar com precisão as fronteiras entre as fases antiferromagnética (AF), "spin-glass" (SG) e supercondutora (SC), que são obtidas mediante a variação da concentração relativa de Sr<sup>[1,2]</sup>. Há sugestões na literatura<sup>[3]</sup> de que uma amostra pertencente à estreita faixa de concentrações  $0.05 \leq x \leq 0.07$  possa exibir tanto a fase SC quanto ordenamento SG. Este trabalho tem por objetivo um estudo sistemático deste diagrama de fases tanto em função da concentração relativa de Sr, quanto em função do campo magnético em amostras policristalinas preparadas pelo método de precursores poliméricos conhecido como Processo Pechini<sup>[4]</sup> que, além de um controle absoluto na estequiometria do composto, permite também uma melhor sinterização, potencializando as propriedades microestruturais, mecânicas, elétricas e magnéticas com relação a outros métodos convencionais. A caracterização estrutural das amostras é realizada por Difração de Raios-X (DRX), Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV), "Energy Dispersive Spectroscopy" (EDS) e Termogravimetria (TG), sendo a caracterização magnética DC e AC realizada em um magnetômetro SQUID. [1] F. C. Chou, N. R. Belk, M. A. Kastner, e R. J. Birgeneau, Phys. Rev. Lett. 75 (1995) 2204 [2] R. J. Birgeneau, A. Aharony, N. R. Belk, F. C. Chou, Y. Endoh M. A. Kastner, J. Phys. Chem. Solids 56 (1995) 1913 [3] G. Shirane, R. J. Birgeneau, Y. Endoh e M. A. Kastner, Phys. B 197 (1994) 158 [4] M. Kakihana, J. Sol-Gel Sci. Tech. 6 (1996) 7

#### IRREVERSIBILITY LINE IN DESOXYGENATED $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-d}$ SINGLE CRYSTAL

ILDEMÁN ABREGO CASTILLO, LUIS GHIVELDER  
Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro  
OSVALDO F. SCHILLING

Departamento de Física, Universidade Federal de Santa  
Catarina, Campus Universitário, Trindade, 88040-900,  
Florianópolis, SC

S. SALEM-SUGUI JR  
Department of Physics, Purdue University, West  
Lafayette, In 47905 USA

We have measured the AC susceptibility in fields up to 5 T on oxygen deficient of a  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-d}$  single crystal, and determined the irreversibility line through the dissipation peak in the imaginary component  $\chi''$ . The sample investigated has a transition temperature  $T_c = 62.8$  K, and transition width less than 1.0 K. The experimental data can not be fitted with a single expression in the entire region. At low fields we may fit the results with a typical power law of the type  $(1 - T/T_c)^n$ , with  $n = 1.35$ , the exponent  $n$  agrees quite well with the model which interprets the LI as a transition from vortex liquid at higher temperature to a vortex glass state. The same exponent is found considering critical fluctuations three dimensional XY in the reversible region around  $T_c$ . At high fields and low temperature the experimental data is better fitted with the equation  $H_{irr} = H_o(T_c/T - 1)^{1.0}$ . This  $(1/T)$  dependence occurs when the vortices are weakly couples between planes. We observed a clear change in behavior of the IL at  $H_{cr} = 9.0$  kOe, which characterizes two different regimes related to the dimensionality of the vortex fluctuations. This could be interpreted as a transition from three dimensional-vortex lines to two-dimensional pancake-like vortices. The higher anisotropy of this system, as compared with a fully oxygenated crystal, favors the decoupling of the vortices in adjacent  $\text{CuO}_2$  planes.

#### OBSERVAÇÃO DE PICOS MAGNÉTICOS EM CURVAS DE MAGNETIZAÇÃO VS. TEMPERATURA DE AMOSTRAS DE $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ CAUSADOS POR RELAÇÃO DE FLUXO APRISIONADO

RAQUEL A. RIBEIRO, OSCAR F. DE LIMA  
Instituto de Física, Universidade Estadual de Campinas -  
UNICAMP

O comportamento coletivo dos vórtices, no estado misto dos supercondutores tipo II, afeta várias propriedades

macroscópicas destes materiais, tais como a relaxação magnética, as curvas de magnetização e a densidade de corrente crítica ( $J_C$ ). Neste trabalho vamos descrever dois tipos de picos observados em medidas de magnetização vs. temperatura, do tipo FCW, com amostras de  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ . O primeiro pico ocorre bem próximo a  $T_C(H)$  para pequenos campos aplicados ( $H < 100$  Oe), sendo observado somente em amostras policristalinas ou cristais de baixa qualidade. Nós identificamos este pico como sendo a assinatura de expulsão de fluxo, devido à existência de *weak links*, em consequência do aprisionamento de fluxo durante a etapa de resfriamento com campo e subseqüentemente com a liberação durante a medida de magnetização (*dip effect*). O segundo pico diamagnético é maior e aparece em temperaturas mais baixas e campos mais altos ( $H > 1$  kOe), sendo observado em todas as amostras que estudamos (cristal, MTG, cerâmica de  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ ). Este comportamento é interpretado como consequência da difusão de fluxo ativada termicamente, que leva à expulsão das linhas de fluxo aprisionadas durante a etapa de resfriamento. No cristal de alta qualidade, as curvas de magnetização para diferentes campos aplicados ( $H = 20, 25, 30, 35, 45$  kOe) colapsam em uma curva universal quando se aplica a lei de escala  $M(15t^{2/5} - 3.3t^{7/5})/H^{2/3}$  vs.  $t$ , para  $0.9 < t < 1$  onde  $t = T/T_H$ , e  $T_H$  é a temperatura onde ocorre o pico. Para intervalo de  $t < 0.9$  aplicamos uma outra lei de escala que levou as curvas a também apresentarem um comportamento universal. A lei de escala utilizada foi  $M(0.1t - 0.12t^2)/H^{1.1}$  vs.  $t$ . Estas leis de escala que propomos para a magnetização estão apoiadas no modelo de *creep* coletivo para o regime de pequeno pacote de fluxo (*small - bundle*). Este é um método experimental inédito para abordar o problema de *creep* coletivo, que acreditamos ser de grande utilidade para complementar os estudos tradicionais baseados apenas na relaxação temporal da magnetização. Este trabalho foi parcialmente financiado por FAPESP, CNPq e CAPES.

### TRANSIÇÃO RESISTIVA E MAGNETOCONDUTIVIDADE NO

$GdBa_2Cu_3O_{7-\delta}$

JAIRO ROA-ROJAS, PAULO PUREUR

Laboratório de Resistividade, Instituto de Física,  
Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre,  
RS

PEDRO PRIETO

Laboratorio de Películas Delgadas, Departamento de  
Física, Universidad del Valle, Cali, Colômbia

Utilizando a técnica de sputtering DC em altas pressões de oxigênio, foram crescidos filmes finos in-situ de  $GdBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  orientados ao longo do eixo C, sobre substratos de  $SrTiO_3$  (100), a partir de alvos de  $GdBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ . Os alvos foram preparados por reação

de estado sólido a partir de  $Gd_2O_3$ ,  $BaCO_3$  e  $CuO$ . Os filmes finos apresentaram temperaturas críticas em torno de 90 K. As flutuações na magnetocondutividade de alto campo nos filmes finos foram estudadas através da determinação experimental da derivada logarítmica da condutividade em função da temperatura. Em campo nulo, os resultados nos filmes finos são compatíveis com os resultados publicados para policristais de  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ . Nós achamos um expoente genuinamente crítico  $\lambda_{cr} = 0,33$  e expoentes gaussianos  $\lambda_1 = 0,5$  e  $\lambda_2 = 1,0$ . Apresentamos resultados para os diferentes regimes de flutuações nas proximidades da transição normal-supercondutora na presença de campos magnéticos de 10 Oe até 7 T. Amostras policristalinas foram preparadas oxigenando parte do material sinterizado para o alvo, submetendo-as a tratamentos térmicos diferentes. As amostras apresentaram temperaturas críticas em torno de 95 K. Resultados de flutuações na magnetocondutividade de baixo campo nas amostras volumétricas são apresentados com a elaboração de diagramas de fase H-T para as diferentes regiões de flutuações críticas e gaussianas, para campos magnéticos de 1 Oe até 500 Oe. Como uma consequência dos diferentes tratamentos térmicos efetuados, observa-se uma transformação progressiva, de aumento do efeito granular, na região inter-granular da transição, em temperaturas abaixo da temperatura crítica. Este comportamento se caracteriza pela presença de dois picos na derivada da resistividade em função da temperatura.

### FLUCTUATIONS IN CONDUCTIVITY AND GROWTH OF SINGLE-CRYSTALS

$YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$

ALCIONE ROBERTO JURELO, PAULO PUREUR

UFRGS

GLADYS NIEVA

Centro Atômico Bariloche - Argentina

We report the growth of large, high quality  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  single-crystals by a flux method. The crystals have been characterized by XRD, magnetization experiment and electrical resistivity. The superconducting transition temperature,  $T_c$ , taken as the maximum of  $d\rho/dT$  is 94.150 K. The resistivity measurements were performed with an AC lock-in technique with currents applied parallel to the Cu-O (ab) planes. Several fields from 1 G up to 400 G were applied parallel to the measuring current. We analyse our data by adopting the simplest scaling approach for the fluctuation conductivity, i.e.,  $\Delta\sigma \propto (T - T_c)^{-\lambda}$ . We determine the inverse of the logarithmic derivative of  $\Delta\sigma$  with respect to T, which gives  $\chi_\sigma^{-1} = (T - T_c)/\lambda$ . The identification of straight lines in plots of  $\chi_\sigma^{-1}$  versus T allow us to obtain simultaneously the exponent  $\lambda$  and  $T_c$ , as well as the temperature range of validity of a given scaling behavior. Above the temperature

$T_c$  of the maximum of  $d\rho/dT$  we can readily identify the temperature interval relevant for studying fluctuations in the normal phase. Farther above  $T_c$ , we observe a regime corresponding to Gaussian fluctuations where the 2D or quasi-2D exponents are found. Closer to  $T_c$ , a 3D-XY critical regime ( $\lambda_{cr} = 0.31$ ) is clearly observed. However, between the two regions, a regime can be observed with  $\lambda = 0.25$ . The principal maximum of  $d\rho/dT$ , which denotes the intragranular transition, shows a two-peak splitting. The same two-peak was observed in several samples of polycrystalline  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  and  $Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_{10+\delta}$ , as well as in the single-crystal  $Bi_2Sr_2Ca_1Cu_2O_{8+\delta}$ . This feature strongly suggests the occurrence of a double bulk superconducting transition which is in itself a signature of unconventional order parameter symmetry.

### ESTUDO DE ESTADOS PARAMAGNÉTICOS CONGELADOS EM AMOSTRAS DE $Nb$ e $Ta$ .

OSCAR FERREIRA DE LIMA, MARCOS DE ABREU  
AVILA, CLAUDIO ANTONIO CARDOSO  
*Instituto de Física Gleb Watghin, UNICAMP*

Nos últimos anos vários estudos de curvas de magnetização para materiais supercondutores tanto de baixa quanto de alto  $T_c$  apresentaram evidências do que ficou conhecido como "Efeito Meissner Paramagnético", algumas vezes também chamado de Efeito Wohleben. Várias explicações para estes resultados foram propostas, incluindo correntes espontâneas devido a junções  $\pi$ , aprisionamento inhomogêneo de fluxo, e estados persistentes de vórtice gigante que podem ocorrer abaixo do campo de nucleação superficial  $H_{c3}$ . Neste trabalho nós apresentamos estudos da magnetização em função da temperatura e campo magnético aplicado, usando um magnetômetro SQUID, para várias amostras de  $Ta$  ( $\kappa \approx 1,39$ ) e  $Nb$  que são reconhecidamente supercondutores tipo onda-s. Nossos resultados revelam a ocorrência de estados paramagnéticos congelados para curvas de magnetização FCC (Field cooled, cooling). Este efeito é realçado a baixos campos aplicados ( $H < 100$  Oe) e é fortemente afetado pela qualidade da superfície da amostra e pelo seu fator de demagnetização. Pequenas barras monocristalina ( $1 \times 1 \times 2$  mm<sup>3</sup>), esferas policristalinas ( $R = 0,4$  mm) e anéis de nióbio policristalino apresentam evidências de fluxo aprisionado por uma camada superficial de material de maior  $\kappa$ . Folhas finas de  $Ta$  policristalino ( $0,025 \times 2 \times 2$  mm<sup>3</sup>), apresentando claramente a assinatura de supercondutividade superficial ( $H_{c3} \approx 1,7H_{c2}$ ), também apresentam estados paramagnéticos congelados, ainda que em um intervalo de temperatura menor abaixo de  $T_c$ . Uma característica importante presente em todos os nossos resultados é a ocorrência de um ponto de irreversibilidade na região paramagnética das curvas de magnetização, resultando em uma resposta claramente reversível acima

deste ponto. Na nossa opinião isto leva a uma curva de irreversibilidade especial no plano  $H \times T$ , determinada pelo comportamento das correntes de blindagem induzidas na superfície da amostra.

Este trabalho foi parcialmente financiado pela FAPESP e CNPq.

### CURVAS DE HISTERESE E COMPORTAMENTO DO PICO ANÔMALO EM MONOCRISTAIS DE $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+y}$ .

LEONARDO RIBEIRO EULÁLIO CABRAL, DAVID

LANDINEZ, JOSÉ ALBINO AGUIAR

*Departamento de Física - UFPE*

YAKOV KOPELEVICH

*Instituto de Física - UNICAMP*

É conhecida a importância de existirem correntes críticas altas nos novos supercondutores de alta temperatura devido às eventuais aplicações tecnológicas dos mesmos. A corrente crítica está relacionada com a força de ancoragem. Esta força de ancoragem surge do ancoramento das linhas de vórtices em defeitos (tais como vacâncias de oxigênio) da amostra e é evidenciada na histerese observada em medidas da dependência da magnetização com o campo magnético aplicado. Neste trabalho são apresentadas medidas da magnetização de em função do campo magnético aplicado paralelo ao eixo  $c$  de amostras monocristalinas de  $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+y}$ . Foram obtidas curvas de histerese em temperaturas de 10 K a 70 K. Foi observado que a diferença entre as magnetizações num mesmo campo,  $\Delta M$ , obtidas nas curvas de histerese, é bastante grande abaixo de 20 K, embora quase desapareça acima de 50 K. Entre 22 K e 40 K verifica-se a existência de um pico anômalo quando o valor absoluto do campo é aumentado (p+) e de outro pico quando o valor absoluto do campo é diminuído (p-), onde nota-se que p- ocorre em campos mais baixos que p+. Sendo a corrente crítica proporcional à  $\Delta M$ , são obtidos três diferentes comportamentos da corrente crítica e da força de ancoragem dependendo da faixa de temperatura. Acerca do comportamento dos picos anômalos (p+ e p-), é visto que o campo magnético onde ocorrem cresce com o decréscimo da temperatura, sendo essa dependência mais acentuada para o p+. Salienta-se que a intensidade de  $\Delta M$  depende do tamanho do passo utilizado na variação do campo aplicado, sendo maior para maiores passos. Observa-se também que a intensidade do pico decresce temporalmente com o campo mantido fixo. Através destes dados é verificada a dependência temporal da corrente crítica nestas amostras.

**EFEITO PICO ANÔMALO EM  $J_c$  COMO FUNÇÃO DO CAMPO MAGNÉTICO, EM FIOS SUPERCONDUTORES DE Nb-Ti CONVENCIONAIS E COM CENTROS DE APRISIONAMENTO ARTIFICIAIS (APC)**

CRISTINA BORMIO-NUNES

FAENQUIL / Dep. de Engenharia de Materiais, Caixa Postal 116, 12600-000 Lorena - SP, Brasil

ROBERT W. HEUSSNER, DAVID C. LARBALESTIER  
Applied Superconductivity Center, University of Wisconsin,  
1500 Engineering Dr., Madison WI 53706, USA

Neste trabalho estudamos o comportamento da densidade de corrente crítica  $J_c$  em fios supercondutores de Nb-Ti convencionais e APC, através de medidas de magnetização  $M$ , usando-se um magnetômetro do tipo SQUID. As medidas de  $M$  foram feitas para temperaturas fixadas em 4, 5, 6, 7 e 8 K e variando-se o campo magnético  $H$  continuamente de zero a 5 T para cada temperatura. As amostras consistiam de fios supercondutores cilíndricos monofilamentares. As medidas de magnetização foram feitas de forma que o eixo do fio supercondutor foi alinhado paralelo à direção de  $H$ . Nesta configuração,  $J_c$  é circunferencial à seção transversal do fio  $J_c = J_\theta$  e corresponde à densidade de corrente crítica que tunela através dos centros de aprisionamento. Estes centros de aprisionamento são fitas finas e longas alinhadas na direção ao longo do eixo do fio. Surpreendentemente, observamos que  $J_\theta$  tem um comportamento não monotônico relativo a  $H$ , apresentando um máximo em  $H = H_{max}$ . Este efeito já fora recentemente observado em supercondutores de alta temperatura (High  $T_c$ ) e é comumente atribuído a variações na estequiometria dos centros de aprisionamento. O efeito é conhecido como efeito pico (fishtail ou bow-tie). Para tentarmos compreender a natureza deste efeito pico em fios de Nb-Ti, fizemos experimentos onde variamos a espessura ( $d_p$ ) e espaçamento ( $d_s$ ) entre os centros de aprisionamento, bem como o material destes, Nb, Ti, Nb-10%W e precipitados Ti- $\alpha$ , para a matriz fixa na composição Nb-47%Ti. Concluímos que o efeito pico observado nas curvas  $J_\theta$  vs.  $H$  é um efeito relacionado ao comportamento elástico da rede de vórtices e portanto das propriedades supercondutoras da matriz ( $\xi$ ). Conseqüentemente, o efeito não depende das propriedades eletromagnéticas do centro de aprisionamento no estado normal, nem de suas dimensões e portanto não está associado ao tunelamento da corrente supercondutora através dos centros de aprisionamento.

**SUPERCONDUTIVIDADE (Experimental) – 11/06/97**

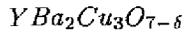
**CRESCIMENTO E CARACTERIZAÇÃO DE MONOCRISTAIS DE  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  EM CADINHOS DE  $BaZrO_3$**

MARCOS A. AVILA, RAQUEL A. RIBEIRO, OSCAR F. DE LIMA

Instituto de Física, Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP

A obtenção de monocristais grandes e puros do supercondutor  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  apresenta diversas dificuldades. Com relação ao processo de crescimento, proporções corretas dos reagentes, rampas de temperatura bastante precisas e longos tempos de reação são necessários para a obtenção de cristais homogêneos e de tamanho mensurável. Estes processos estão atualmente bem desenvolvidos. Outro problema, porém, é o fato da mistura dos materiais precursores ( $Y_2O_3$ ,  $BaCO_3$ ,  $CuO$ ) serem bastante reativos em altas temperaturas. Esta segunda característica faz com que estes reagentes ataquem os cadinhos normalmente usados na preparação do cristal, levando à contaminação deste pelo material dos cadinhos. Desde a sua descoberta em 1987 foram publicados inúmeros trabalhos abordando o crescimento de  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  em diversos cadinhos como os de Pt, Au,  $Al_2O_3$ ,  $ZrO_2$ , etc. e as conseqüentes influências da contaminação nas propriedades do material. Em 1995, foi proposto um novo cadinho, feito de  $BaZrO_3$ , que parece ser o mais resistente até o momento ao ataque dos reagentes. Esta descoberta abre a perspectiva de crescimento de monocristais puros de  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  e a possibilidade de estudar as características intrínsecas do material. O cadinho de  $BaZrO_3$  permite também a utilização de tempos mais longos de crescimento, o que pode levar à obtenção de cristais maiores. Neste trabalho, descrevemos em detalhe os procedimentos que desenvolvemos para: a) a obtenção da fase  $BaZrO_3$  a partir dos reagentes  $BaCO_3$  e  $ZrO_2$ ; b) a moldagem e sinterização de cadinhos deste material; c) o crescimento de cristais de  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  nestes cadinhos e d) tratamentos térmicos posteriores de homogeneização/oxigenação. Apresentamos também caracterizações cristalográficas (metalografia, difratogramas de raio-x) e magnéticas (curvas de magnetização com magnetômetro SQUID) dos monocristais, comparando-os com outros cristais que crescemos em cadinhos de  $Al_2O_3$ , Au e  $ZrO_2$ . Este trabalho foi parcialmente financiado por FAPESP, CNPq e CAPES.

## ESTUDO DO EFEITO DA SUBSTITUIÇÃO PARCIAL DO Ba POR Ca, Sr OU Mg NO



VALDEMAR VIEIRA, JACOB SCHAF, PAULO PUREUR  
UFRGS

Reportamos sobre a preparação, caracterização e o estudo das propriedades magnéticas e de transporte elétrico de amostras policristalinas de  $Y(Ba_{1-x}R_x)_2Cu_3O_{7-\delta}$  onde  $R = Ca, Sr$  ou  $Mg$  e  $x = 0, 0.5, 1.0, 1.5$ . Utilizamos um método de reação em sólido a partir dos óxidos e carbonatos precursores:  $Y_2O_3, BaCO_3, CaCO_3, SrCO_3, CuO$  e  $MgO$  de alta pureza. Tal método consiste em misturar os compostos por intensa moagem em ágata, aquecimento em cadinho de alumina a  $950^\circ C$  por 4 horas, prensagem em pastilhas, sinterização a  $950^\circ C$  durante 24 horas em atmosfera de  $O_2$  puro, esfriamento lento através de  $700^\circ C$  e  $350^\circ C$ , onde ocorrem respectivamente a transformação estrutural tetragonal-ortorrômbica e a absorção de oxigênio. A difração de raio-X revelou em todas as amostras a estrutura ortorrômbica do  $YBCO - 123$ . Medidas de suscetibilidade magnética DC, em função da temperatura, nas condições de esfriamento em campo nulo (ZFC) e em campo (FC) mostraram, que a temperatura crítica de transição supercondutora ( $T_c$ ) decresce em função da concentração  $x$ . Foram realizadas medidas de suscetibilidade ZFC e FC para vários valores de campo, desde 0.01 até 7 kOe e, a partir destas foram obtidos os limites de irreversibilidade ( $T_{ir}$ ), que são, por definição, os pontos de temperatura onde as curvas ZFC e FC passam a coincidir. O conjunto de todos os  $T_{ir}$  de cada amostra definem uma linha de irreversibilidade num diagrama  $H - T$ . Os resultados mostram, que a linha de irreversibilidade, para os diferentes  $x$ , ao mesmo tempo que mantém a sua forma bem conhecida para o  $YBCO - 123$ , qual seja, uma linha tipo de Almeida-Thouless (AT) para campos abaixo de 1 kOe e divergindo para campos mais altos, ela desloca-se gradativamente para temperaturas mais baixas acompanhando o "shift" do  $T_c$ . Este comportamento não surpreende se levarmos em conta que o sítio do Ba só tem participação indireta nas propriedades supercondutoras destes materiais, através do espectro de fônons e da estrutura eletrônica.

## MAGNETIC PROPERTIES OF THE $(La_{1-x}Pr_x)_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$ SYSTEM ( $0 < x < 0.5$ ) IN THE NORMAL STATE: CORRELATION WITH $T_c$ SUPPRESSION.

JORGE MUSA  
CBPF

SERGIO GARCÍA  
Univ. de la Habana

BORIS GIORDANENGO, ELISA M.  
BAGGIO-SAITOVITCH

CBPF

Since the discovery of the high critical temperature superconductors (HTc) eleven years ago despite the enormous efforts of experimentalists and theoreticians all over the world the mechanism of superconductivity in these materials remains an open question. Measurements of the magnetic properties of the HTc materials in both the superconducting and normal ( $T > T_c$ ) states have played a central role in clarifying their nature. Of particular interest here are normal state magnetic measurements versus temperature, composition and structure, which have a bearing on the mechanism for the extraordinarily high  $T_c$ 's. These measurements have shown that Cu ions in the  $CuO_2$  layers of the high  $T_c$  cuprate carry a (nearly) localized magnetic moment and that these moments are strongly coupled. Since the superconductivity is apparently associated with these  $CuO_2$  layers, this feature strongly distinguishes the cuprates from all other known superconducting materials. A systematic study of the  $(La_{1-x}Pr_x)_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$  system ( $0 < x < 0.5$ ) comprising magnetic measurements is presented. A deviation from the  $Pr^{3+}$  Curie-Weiss behavior is detected in the  $\chi(T)$  curves below 120 K. This contribution is quantitatively described revealing that Pr is essentially trivalent (no hybridization seems to be present as in  $(Y, Pr)BCO$ ). The possibility of short range magnetic order, is analyzed as the source of such behavior on the light of dynamical antiferromagnetic correlations and structural considerations. Furthermore, we compared the magnetic behavior of this system with  $La_2CuO_4$ -parent compound.

## AC susceptibility study of intergranular irreversibility line in BSCCO ceramic superconductors

JORGE LUÍS GONZÁLEZ  
CBPF

PEDRO MUNÉ, LUÍS FLORES, ERNESTO ALTSCHULER  
Univ. de la Habana

In the H-T phase diagram of a high- $T_c$  superconductor (HTSC) the existence of the irreversibility line is well established. Below this line, a finite critical current density exists, while it turns to zero above, corresponding to irreversible and reversible magnetic behaviors, respectively. This was initially reported by Müller et al. in 1987 and it has been the subject of many scientific efforts up to now. Various methods have been used to determine this line such as magnetization, magnetic relaxation, AC susceptibility and so on. The origin of this boundary has been attributed to depinning (giant flux creep), the melting of the vortex lattice into a vortex fluid due to thermal fluctuations (flux-lattice melting) and the transition from the vortex-liquid into vortex-glass. In the case of ceramic superconductors, the phase

diagram is more complex, because the system can be regarded as an array of superconducting grains interconnected by weak links. Consequently, one can talk about intragranular or intergranular irreversibility line above which the transport critical current disappears. In this work we found the intergranular irreversibility line of a Pb doped Bi-2223 ceramic through complex susceptibility measurements and we compare the results with the model of giant flux-creep of Malozemoff conveniently adapted to the intergranular case with an adequate choosing of parameters. The shape of the irreversibility line in the H-T plane strongly depends on the type of junctions involved.

**CARACTERIZAÇÃO DA  
MICROESTRUTURA DE DEFEITOS EM  
SUPERCONDUTORES E SUA RELAÇÃO  
COM O APRISIONAMENTO DE FLUXO  
MAGNÉTICO E AS PROPRIEDADES DE  
TRANSPORTE**

DURVAL RODRIGUES JÚNIOR

*Departamento de Engenharia de Materiais, Faculdade de  
Engenharia Química de Lorena*

ANTHONY J. GARRATT-REED

*Center for Materials Science and Engineering,  
Massachusetts Institute of Technology*

A otimização das propriedades de transporte dos materiais supercondutores é importante para sua utilização em aplicações de altos campos magnéticos. Estas propriedades estão diretamente relacionadas com o aprisionamento de fluxo magnético nesses materiais, que por sua vez está relacionado com a microestrutura de defeitos presente no supercondutor. A caracterização microscópica desses materiais supercondutores é de vital importância no entendimento dos mecanismos de aprisionamento de fluxo magnético pela microestrutura do material. Este trabalho apresenta o uso de MEV na determinação do grau de reação e da área transversal dos filamentos supercondutores em fios multifilamentares de material A-15 com e sem dopagem. É apresentado o uso de MET para a determinação da distribuição de tamanhos de grãos, e do seu tamanho médio, na fase supercondutora formada após tratamento térmico. Devido às reações de estado sólido envolvidas no processo, as distribuições são sempre muito largas, tendo tamanhos de grãos entre 10 nm e 260 nm, dependendo do tipo de material analisado. É mostrado que a posição do ponto médio das distribuições (tamanho médio de grão) está diretamente relacionada com a intensidade das forças de aprisionamento  $F_p$  agindo nas amostras. Também é apresentado o uso de STEM na determinação dos perfis de concentração de elementos ao longo dos grãos supercondutores e sua influência no aprisionamento de fluxo pelos contornos de grãos e nas propriedades de transporte dos materiais analisados.

**CRITICAL CURRENT DENSITY  
MEASUREMENTS IN**

*Hg<sub>0.8</sub>Re<sub>0.2</sub>Ba<sub>2</sub>Ca<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>8+δ</sub>*

MARCOS T. ORLANDO

*CBPF and UFES*

SERGEY L. BUD'KO

*CBPF*

XAVIER OBRADORS

*Institut de Ciència de Materials de Barcelona, Spain*

LUIZ GALLEGÓ

*IPEN*

ELISA BAGGIO-SAITOVITCH

*CBPF*

The Hg - based high  $T_c$  superconductors are considered as a promising material for future applications due to their high transition temperature. From the point of view of basic science, measurements of critical current density in these compounds can give more information about the mechanism of pinning. We will present the measurements of critical current density of Hg-1223 doped with Re as a function of temperature. The polycrystalline samples were prepared at ambient pressure, which allows rather small variation of Re concentration ( $x = 0.14-0.20$ ). Resistance vs. temperature was measured by standard four-probe technique. The (resistive) transition width was found to be less than 4 K. The normal state resistance has a metallic behavior. X-ray analysis shows that the samples are single phase. The critical current measurements were performed with home - made DC set up (four-probe with the possibility of the reversion of the current). The contacts were made with pure In. The accuracy in temperature stabilization was better than 0.1 K. The sample was glued with GE varnish to thin (0.8 mm thickness) sapphire plate. The overall sample dimensions were 10 x 1 x 1 mm<sup>3</sup>. The active area of the sample was decreased down to 0.15 mm<sup>2</sup> by careful milling. The 1  $\mu$ V/cm criterion was used to determine the value of the critical current. The fitting of the  $J_c(T)$  curves is consistent with exponential behavior down to 120 K (the temperature limit imposed by our experimental set up). This temperature dependence is expected because the measurements were made close to  $T_c$ . The shape of I-V curves indicates two different pinning regimes, the possible interpretations will be discussed. Critical current measurements in applied field are under way with the goal to estimate the pinning potential.

## ENSAIOS NÃO-DESTRUTIVOS DE PLACAS CONDUTORAS COM ISOLAMENTO UTILIZANDO O MAGNETÔMETRO SQUID

CARLOS R. HALL BARBOSA, ANTONIO CARLOS BRUNO  
PUC-Rio

O magnetômetro SQUID (Superconducting Quantum Interference Device) foi utilizado para realizar Ensaios Não-Destrutivos (END) em placas de alumínio no Laboratório de Supercondutividade Aplicada e Magnetismo do Departamento de Física da PUC-Rio, em situações onde não era possível ter acesso à placa. As placas medem 1m x 1m x 1mm, e utilizou-se o método de END conhecido como *Electric Current Injection*, aplicando-se uma corrente elétrica cc de 10 A à amostra, e medindo-se o campo magnético com o SQUID. Havendo defeitos no material, são introduzidas distorções na imagem magnética medida, que indicam a presença e a posição espacial do defeito. Contudo, observou-se que, quando a distância entre o sensor e a placa excede 5 vezes o tamanho do defeito, a inspeção visual é extremamente difícil, devido ao ruído magnético ambiente e ao sinal magnético gerado pelo restante da placa, que tem a forma de uma rampa bidimensional. Para solucionar este problema, foram utilizadas técnicas de processamento de imagem para realçar as imagens magnéticas. O procedimento consiste em inicialmente filtrar a imagem com um filtro espacial passa-baixa cuja ordem depende da distância do sensor à placa e do nível de ruído magnético. Em seguida, um filtro espacial passa-alta é aplicado, de modo a melhorar a visualização do sinal característico dos defeitos, reduzindo a rampa devido ao restante da placa. Aplicando-se essa técnica de filtragem espacial, as distorções introduzidas nas imagens magnéticas devido aos defeitos podem ser visualizadas até distâncias de cerca de 10 vezes o tamanho do defeito. Simulou-se ainda a aplicação de um filtro espacial passa-alta *on-line*, que poderia ser construído com bobinas de fio supercondutor, obtendo-se resultados satisfatórios em termos de detecção de defeitos.

## EVOLUÇÃO DA DUPLA TRANSIÇÃO SUPERCONDUTORA NO $GdBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ CERÂMICO EM FUNÇÃO DO TRATAMENTO TÉRMICO

J. ROA-ROJAS, P. PUREAUR

Instituto de Física - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, cp 15051, Porto Alegre, RS, 91501-970  
ILDEMÁN ABREGO CASTILLO, LUIS GHIVELDER  
Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro, c.p. 68528, Rio de Janeiro, Rj. 21945-970

Neste trabalho foi estudada a evolução da transição inter e intra-granular em função do tratamento térmico

feito em uma amostra cerâmica de  $GdBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ . Todos os dados obtidos são da mesma amostra submetida a vários tratamentos térmicos. As técnicas de difração de R-X, microscopia ótica, resistividade, susceptibilidade, magnetização e calor específico foram utilizadas a fim de observar este comportamento anômalo no supercondutor cerâmico. A derivada na resistividade mostra dois picos distintos associados com a transição inter e intra-granular. O onset da transição supercondutora acontece aproximadamente no mesmo valor da temperatura de transição da amostra inicial, isto é, em torno de  $T_c = 94.6$  K. Porém, a largura da transição inter-granular tende a aumentar e a posição evolui a mais baixa temperatura com o número de tratamentos térmicos. O estudo da estrutura cristalina foi feito utilizando difração de R-X revelando uma considerável diferença do parâmetro  $c$ , este parâmetro é muito sensível ao conteúdo de oxigênio. Resultados da susceptibilidade e magnetização revelam também esta dupla transição supercondutora. Este comportamento sugere que a distribuição de oxigênio é superficial e espacialmente não homogêneo sobre cada grão em torno da alta concentração de oxigênio. A presença de uma estrutura de duplo pico em torno do  $T_c$  nas medidas do calor específico mostra que a mesma acontece em amostra de alta concentração de oxigênio. A amplitude da anomalia no salto de calor específico  $\Delta T/T_c$  tende a diminuir com o número de tratamentos térmicos.

## FABRICAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE FIOS SUPERCONDUTORES DE Nb-Ti COM CENTROS DE APRISIONAMENTO ARTIFICIAIS (APC) DE Nb.

ROSEMILE S. FUKUOKA, CRISTINA BORMIO-NUNES  
FAENQUIL / Dep. de Engenharia de Materiais, Caixa Postal 116, 12600-000 Lorena - SP, Brasil

Neste trabalho apresentamos fatos relacionados à fabricação e caracterização de fios supercondutores de Nb-Ti contendo centros de aprisionamento artificiais de Nb. A liga de Nb-Ti usada tem composição de 47% em peso de Ti. O composto inicial (Nb-Ti + Nb) foi fabricado fazendo-se 7 furos de diâmetro 5 mm e arranjados hexagonalmente em uma barra de Nb-Ti de diâmetro  $\phi$  (30 e 25 mm). Os furos da barra de Nb-Ti foram preenchidos por barras de Nb comercialmente puro. Assim, obtivemos 2 compostos com frações volumétricas de Nb de 20% ( $\phi = 30mm$ ) e 30% ( $\phi = 25mm$ ). A redução do tamanho dos centros de aprisionamento à escala nanométrica foi feita por meio de seqüências de embutimentos seguidos de forjamento rotativo. A fabricação do fio final foi feita via laminação, obtendo-se fios de seção transversal quadrada. A caracterização microestrutural por MEV mos-

trou que os filamentos de Nb, inicialmente redondos, passam a se apresentar em forma de fitas e perdem a simetria hexagonal logo nos primeiros estágios de fabricação do fio. Medidas da densidade de corrente crítica  $J_c$  em  $H = 2T$ , para os compósitos com 20% e 30% e contendo 2527 subfilamentos de Nb, resultaram em  $J_c = 1,3510^4 A/cm^2$  e  $J_c = 1,9210^4 A/cm^2$ , respectivamente. Neste caso, a espessura  $d_p$  dos centros de aprisionamento eram da ordem de  $3\mu m$ . Para o compósito com 30% e contendo 48031 subfilamentos de Nb obtivemos  $J_c = 7,6410^4 A/cm^2$ , para  $d_p = 325nm$ . Os baixos valores de  $J_c$  obtidos, se comparados a fios de Nb-Ti convencional comerciais, são atribuídos a espessuras não ideais dos centros de aprisionamento, bem como a má qualidade da superfície dos filamentos, que é consequência do processo utilizado para a fabricação dos fios.

que utiliza gás hélio. Através do gráfico da suscetibilidade ac em função da densidade verdadeira pôde-se observar que não existe uma relação linear entre essas grandezas, mas existe um comportamento assintótico mostrando que o sinal da suscetibilidade ac aumenta rapidamente quando a densidade verdadeira aproxima-se do valor esperado ( $6,384 \cdot 10^3 kg/m^3$ ), calculado através dos parâmetros de rede de medidas de raios-x do composto puro de YBaCuO. Medidas sucessivas de suscetibilidade ac e densidade verdadeira numa mesma amostra em função do tempo de calcinação mostraram que o sinal de suscetibilidade ac e densidade verdadeira apresentam máximos e depois decaem indicando que o tempo excessivo de calcinação deteriora a qualidade do composto devido a contaminação pelo material do cadinho. Este trabalho mostra que a medida da densidade verdadeira pode ser usada para controle de qualidade de supercondutores cerâmicos.

#### ACOMPANHAMENTO DA SUSCETIBILIDADE MAGNÉTICA AC DA PRODUÇÃO DO SUPERCONDUTOR DE YBaCuO ATRAVÉS DE MEDIDA DA DENSIDADE VERDADEIRA

ANTÔNIO LOPES DE SOUZA NETO, ALVIMAR FERREIRA, BRUNELLE BARROS, MARCOS TADEU DE AZEREDO ORLANDO, ALFREDO GONÇALVES CUNHA  
*Departamento de Física - Universidade Federal do Espírito Santo*

YUKIO NISHIDA

*CST - Centro de Controle*

LUIS GALLEGO MARTINEZ

*Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN*

No Laboratório de Materiais Carbonosos e Plasma Térmico da UFES está sendo utilizado a técnica de plasma spray para a produção de filmes espessos supercondutores de YBaCuO sobre diversos substratos. Para isso é necessária a utilização de grandes quantidades do composto a ser usado na deposição. Dessa forma foi necessário produzir quantidades razoáveis do material e com qualidade aceitável. Para isso foram realizadas várias produções do composto supercondutor YBaCuO a partir de precursores óxidos e carbonatos. O processo envolveu várias fases de calcinações a  $985^\circ C$  e oxigenações sucessivas a  $480^\circ C$  utilizando cadinhos de alumina de alta densidade e níquel em uma mufla controlada por microcomputador. Para as caracterizações os compostos foram pulverizados a um diâmetro máximo de  $0,062mm$ . Os materiais foram caracterizados por medidas de suscetibilidade ac e densidade verdadeira. Para a medida de densidade verdadeira utilizou-se um multi-picnômetro marca Quantachome modelo MVP-1,

#### OPTIMIZATION OF YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7</sub> SUPERCONDUCTING THICK LAYERS PRODUCED BY PLASMA SPRAY TECHNIQUE

ALFREDO GONÇALVES CUNHA, MARCOS TADEU DE AZEREDO ORLANDO, FRANCISCO GUILHERME EMMERICH, CARLOS LARICA

*Departamento de Física - Universidade Federal do Espírito Santo*

ELISA BAGGIO-SAITOVITCH

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF*

The Plasma Spray technique is adequate for coating on large ceramic or metal surfaces, with a deposition rate three orders of magnitude larger than the sputtering technique. Hemmes et al report plasma sprayed YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7</sub> superconductor coating with buffer-layer. In this paper a new method to produce thick layers of YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7</sub> using Plasma Spray Technique (PST) is proposed. Good superconducting thick layers were prepared without bond-layer, buffer layer and annealing. The compound was deposited on a stainless steel substrate by a plasma spray torch using nitrogen as the working gas. The only heat treatment was performed during the sample oxygenating process at  $480^\circ C$ . The resultant thick layers had a good adherence. The thickness of the layers is between 10 and  $60\mu m$ . The use of the nitrogen plasma increases the substrate temperature as compared to the argon one. This effect reduces the formation of micro-cracks produced during the quenching of the sample, which is characteristic of the PST. The SEM (Scanning Electronic Microscope) picture revealed the good quality of the obtai-

ned thick layers. Resistivity measurements of the as prepared samples showed semiconductor behavior. After oxygenating process the samples exhibit a metallic behavior down to 90K where the superconductivity appear (onset), reaching a zero resistance at temperature close to 85K. The Critical Current densities obtained in this work are similar to those found in the literature for thick layers annealed at 960°C, around 10<sup>5</sup>A/m<sup>2</sup> at 42K.

**PRODUÇÃO DE Hg<sub>2</sub>Ba<sub>2</sub>Ca<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>8+d</sub> A PARTIR DE PRECURSORES ÓXIDOS E CARBONATOS EM ATMOSFERA CONTROLADA ATÉ 40bar**

MARCOS TADEU DE AZEREDO ORLANDO, ALFREDO GONÇALVES CUNHA, ANTÔNIO LOPES DE SOUZA NETO, ALVIMAR FERREIRA, BRUNELLE BARROS  
*Departamento de Física - Universidade Federal do Espírito Santo*

LUIS GALLEGO MARTINEZ

*Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN*

YUKIO NISHIDA

*CST - Centro de Controle*

ELISA BAGGIO-SAITOVITCH

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF*

Com a descoberta dos compostos supercondutores à base de mercúrio e com uma temperatura de transição bem superior aos compostos anteriores, este composto tornou-se muito atraente do ponto de vista de aplicação. O inconveniente na preparação deste composto tem sido a alta pressão necessária para sua síntese. Neste trabalho procura-se produzir o composto com pressões menores que são mais fáceis de trabalhar. A partir de óxidos e carbonatos de alta pureza (99,999%), foram produzidos precursores do composto Hg<sub>2</sub>Ba<sub>2</sub>Ca<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>8+d</sub> com fluxo de oxigênio a pressão ambiente. Após vários estágios de calcinação e pulverização foi adicionado óxido de mercúrio aos precursores. O material assim preparado foi compactado a 10GPa na forma de três pastilhas de 10mm de diâmetro e 1mm de espessura, sendo então encapsulados em uma ampola de quartzo, com dois milímetros de espessura, sob vácuo. Posteriormente a isso tal ampola foi submetida a um tratamento térmico, em um forno especialmente construído para suportar pressões até 40bar. O material foi tratado a 800°C com uma pressão externa de argônio de 40bar durante doze horas, resfriado lentamente até 300°C e permanecendo nesta temperatura por 24 horas e então resfriado lentamente até a temperatura ambiente. Após esse tratamento as amostras foram submetidas a um novo tratamento a 300°C sob uma pressão de 22bar de oxigênio durante 30horas. Medidas de suscetibili-

dade magnética ac revelaram a presença de duas fases supercondutoras após a oxigenação a 300°C, sendo a primeira com Tc onset em 115K e a segunda em 137K.

**SUPERCONDUTIVIDADE (Experimental) - 13/06/97**

**SUPERCONDUTIVIDADE NA SOLUÇÃO SÓLIDA (Sm<sub>1-x</sub>Eu<sub>x</sub>)<sub>1.85</sub>Ce<sub>0.15</sub>CuO<sub>4-y</sub> (0 ≤ x ≤ 1)**

PAULO ATSUSHI SUZUKI

*FAENQUIL*

RENATO DE FIGUEIREDO JARDIM

*IFUSP*

truem O composto Sm<sub>1.85</sub>Ce<sub>0.15</sub>CuO<sub>4-y</sub> apresenta temperatura crítica supercondutora da ordem de 20K enquanto que a maior temperatura crítica observada no Eu<sub>1.85</sub>Ce<sub>0.15</sub>CuO<sub>4-y</sub> foi de ≈ 13K. Neste trabalho exploramos sistematicamente as propriedades estruturais e supercondutoras da solução sólida (Sm<sub>1-x</sub>Eu<sub>x</sub>)<sub>1.85</sub>Ce<sub>0.15</sub>CuO<sub>4-y</sub> (0 ≤ x ≤ 1). Amostras policristalinas de (Sm<sub>1-x</sub>Eu<sub>x</sub>)<sub>1.85</sub>Ce<sub>0.15</sub>CuO<sub>4-y</sub> foram preparadas por processo sol-gel, sinterizadas na forma de pastilhas e reduzidas em fluxo de argônio a duas temperaturas: 900°C e 950°C. Medidas de difração de raios-X revelaram que as amostras são de fase única e a determinação dos parâmetros de rede a e c mostraram que o sistema forma efetivamente uma solução sólida. Medidas de magnetização M(T) como função da temperatura, 2K ≤ T ≤ 30K, revelaram transições diamagnéticas que variaram entre 14K e 7K dependendo da concentração de Eu. As amostras ricas em Sm apresentam maiores temperaturas de transição supercondutora. Foi constatado também que amostras ricas em Eu revelam uma separação das curvas ZFC e FC bem acima da temperatura onde diamagnetismo é observado. Medidas de resistividade elétrica ρ(T) como função da temperatura mostraram queda na magnitude de ρ(T) nas vizinhanças da temperatura crítica obtida magneticamente. Foi também observado um aumento abrupto na magnitude de ρ(T) acima da transição supercondutora nas amostras ricas em Eu. Estes comportamentos sugerem a formação de pares de Cooper em temperaturas bem acima da temperatura onde ρ(T) e M(T) indicam propriedades supercondutoras. (Trabalho financiado pela FAPESP -Processo N°96/08416-4 e CNPq - Processo N° 304647/90-0).

### NORMAL AND SUPERCONDUCTING PROPERTIES OF SnTe:In BASED SEMICONDUCTOR COMPOUNDS

KONSTANTINOV P. P., PARFENIEV R. V

*A.F.Ioffe Physical-Technical Institute, St.Petersburg, Russia*

NEMOV S. A

*State Technical University, St. Petersburg, Russia*

MASHOVETS D. V, SHAMSHUR D. V

*International Center of Condensed Matter Physics, UnB, Brasilia, Brazil.*

POPOV D. I

*Clarkson University, ICGMSA, Potsdam, NY, USA*

The comparative studies of temperature dependences on Hall coefficient  $R(T)$  and resistivity  $\rho(T)$  ( $T=77\div 350K$ ) and parameters of superconducting (SC) transition ( $T_c$  and  $\partial H_{C2}/\partial T|_{T_c}$ ) at low ( $0.4\div 4.2K$ ) temperature in semiconducting solid solutions  $Sn_{0.8}Pb_{0.2}Te:In$ ,  $SnTe:In$  and  $Sn_{0.8}Ge_{0.2}Te:In$  (In content  $N_{In}=5$  at.%) have been performed. The investigated materials belong to a new class of SC-semiconducting compounds based on  $A^{IV}B^{VI}$  solid solutions with deep impurity resonant states of group III elements. Specific features of these materials are connected with the presense of an impurity band (IB) quasi-local states in the valence band (in the present case formed by In). It was found out that the In states effectively interact with the Bloch states of the valence band resulting in the strong resonance scattering of carriers (holes) into the IB. There are correlations of SC parameters of these materials and the resonance scattering intensity with the hole filling factor of the IB. Critical SC parameters depend crucially on the matrix composition and the dopant impurity concentration. The substitution of Pb for Sn in  $PbTe-SnTe:In$  solid solutions affects strongly the parameters of SC state and allows to rise  $T_c$  up to 4.2K (instead of  $T_{cmax} \approx 0.2K$  for SnTe). In the case of  $Sn_{1-z}Ge_zTe:In$  the changes of the band structure and the IB position and occupation may be also caused by a structural phase transition - the rhombohedral deformation of the lattice with temperature decrease near  $T_{SPT} \sim 210K$  was observed. It was found that  $R$  and  $\rho$  in  $(Sn_{0.8}Pb_{0.2})In_{0.05}Te$  decrease approximately linearly with  $T$  (down to 77K), while in  $(Sn_{0.8}Ge_{0.2})In_{0.05}Te$  case reversed dependences were observed. The results for  $(Sn_{0.8}Ge_{0.2})In_{0.05}Te$  also reveal the tendency to break near  $T_{SPT}$ . Substitutional impurities Pb or Ge in  $Sn_{0.95}In_{0.05}Te$  produce opposite effects also on the  $T_c$  values:  $T_c = 1.2K$  for  $Sn_{0.95}In_{0.05}Te$ , 20% Pb substitution leads to  $T_c = 2.8K$ , while 20% Ge - to  $T_c = 0.5K$ . This work was partially supported by Russian Foundation for Basic Research grant 96-02-17848a.

### SUPERCONDUCTING COPLANAR POWER SPLITTER

MARCOS TAVARES DE MELO, YOGENDRA PRASAD YADAVA, DAVID ARSENIO LANDINEZ TELLEZ, JOSÉ ALBINO AGUIAR, JOSÉ MARCILIO CAVALCANTI FERREIRA

*UFPE*

M. J. LANCASTER, J. S. HONG

*Electronic and Electrical Engineering, Birmingham University, Edgbaston, Birmingham B15 2TT, United Kingdom.*

The use of superconducting films in transmission lines has many advantages for signal- processing applications, such as low dispersion, low loss and wide bandwidth. The difficulty in producing double-sided HTS films has created interest in structures requiring a single conducting plane. Coplanar waveguide (CPW) is used extensively for microwave components including power splitters, filters, couplers, mixers and amplifiers for the emerging wireless communication industry. However, as these components become more complex, problems occur due to imbalances between the two ground planes. This leads to unwanted slotline modes and signal distortion especially when bends are extensively needed. In order to keep the structure balanced after the bends one often uses air bridges of aluminium ultrasonically bonded at regular intervals. However, implementing these air bridges in the microwave circuit is a time-consuming process. Any residual deposit might increase the parasitic capacitance to the strip that runs underneath. For power splitters one possible solution to this problem is to use coplanar strips (CPS) in its arms. CPS may keep the structure balanced after the arms bend. Primarily a copper version is etched on only one side of an RT/duroid 6010 with relative permittivity  $\epsilon_r = 10.8$ , height  $h = 0.64$  mm, conductor thickness  $t = 35\mu m$ . The fabrication itself was accomplished by a single photo-resist pattern, followed by the etch. Secondly a superconducting version is accomplished. Microwave substrates are prepared and optimised based on a class of complex perovskites  $REBa_2NBO_6$  (where  $RE=Pr, Nd, Sm$  and  $Eu$ ) sinterized as single phase material having a high sintered density and stability. The YBCO thin film is then deposited using sputtering technique. Insertion loss and return loss return results are presented.

### SYNTHESIS AND STUDY OF CHEMICAL COMPATIBILITY OF $DyBa_2ZrO_{5.5}$ CERAMIC OXIDE WITH YBCO SUPERCONDUCTOR FOR ITS POSSIBLE APPLICATION AS A SUBSTRATE MATERIAL

YOGENDRA PRASAD YADAVA, MARCOS TAVARES DE

MELO, DAVID LANDINEZ TELLEZ, JOSÉ ALBINO  
AGUIAR, JOSÉ MARCILIO FERREIRA  
UFPE

In the fabrication of thick and thin film YBCO superconductor, substrate play a vital role. Most of the commonly available substrates i.e. Si, Ge, SiO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> etc react with YBCO at the processing temperature. MgO is the most suitable substrate for this application but in this case also there is a Ba interlayer formation at the YBCO-MgO interface. It is reported in literature that complex perovskite oxides of rare-earth could be good substrate materials for high temperature superconductors. Based on the doubling of the lattice constant these materials have a fairly well lattice matching with YBCO. In view of these observations, we have synthesised a complex perovskite oxide DyBa<sub>2</sub>ZrO<sub>5.5</sub> and studied its chemical compatibility with YBCO for its possible application as a substrate material. DyBa<sub>2</sub>ZrO<sub>5.5</sub> was synthesised by solid state reaction method. Stoichiometric ratio of Dy<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, BaCO<sub>3</sub> and ZrO<sub>2</sub> were mixed and calcined at 1200°C for 24h with two intermediate grindings. The calcined powder was pressed at 5 ton/cm<sup>2</sup> pressure and sintered at 1350°C for 24h at ambient atmosphere. The XRD spectra of the sample show that it has complex cubic perovskite structure with lattice constant  $a = 8.398 \text{ \AA}$ . To study its chemical compatibility with YBCO superconductor, DyBa<sub>2</sub>ZnO<sub>5.5</sub> was mixed with YBCO at 2 to 20 wt %. The mixture was compacted and heated at 960°C for 6h. After the heat treatment the samples were cooled down to room temperature XRD spectra of the composite show that YBCO and DyBa<sub>2</sub>ZrO<sub>5.5</sub> remain as two distinct separate phases in the composite. Resistivity studies made on the YBCO-DyBa<sub>2</sub>ZrO<sub>5.5</sub> composites, show that there is no degradation in the superconducting transition temperature T<sub>c</sub> even after this severe heat treatment. Thus the above studies show that DyBa<sub>2</sub>ZrO<sub>5.5</sub> could be a good substrate material for thick and thin film YBCO superconductors. Further studies are in progress to study the dielectric properties of DyBa<sub>2</sub>ZrO<sub>5.5</sub> ceramic for its possible application as substrate material for microwave application.

Work financed by RHAE, CNPq and FINEP

**LINHA DE ATRASO INTERDIGITAL  
COPLANAR PARA USO EM SISTEMAS  
SUPERCONDUTORES DE MEDIDA  
INSTANTÂNEA DE FREQUÊNCIA**

MARCOS TAVARES DE MELO  
UFPE

M. J. LANCASTER, J. S. HONG

*Electronic and Electrical Engineering, Birmingham  
University, Edgbaston, Birmingham B15 2TT, United  
Kingdom.*

Num guia de onda de curvaturas coplanar (CPW) as

perdas de retorno e perdas por inserção são causadas pela distorção na fase de onda ao passar pelas curvaturas. A distorção na fase é causada pelos diferentes caminhos com diferentes raios de curvatura. Estruturas de linhas coplanares conseguem minimizar este tipo de problema. Por outro lado as linhas coplanares com impedência característica de 50Ω, e constante dielétrica elevada são difíceis de serem fabricadas, respeitando a tolerância no processo de *etching*. Para atingir 50Ω com substrato de constante dielétrica relativa  $\epsilon_r = 10.8$ , a largura de linha  $w$  precisa ser aproximadamente 20 vezes maior do que o espaçamento de linha,  $s$ . Este problema pode ser contornado aumentando-se a capacitância entre as linhas, diminuindo assim a velocidade de fase. Estruturas periódicas de linhas de transmissão com baixo valor de velocidade são usadas com frequência para aumentar os atrasos de linha em circuitos monolíticos integrados de microondas (MMICs). Este trabalho tem como objetivo otimizar uma nova linha de transmissão interdigital através de análises usando impedância característica e *group delay* para que possa ser usada como atraso de linha. Aumentando-se o comprimento dos dedos e mantendo-se todos os outros parâmetro fixos, pode-se facilmente atingir 50Ω, respeitando a tolerância no processo de *etching*. Estes atrasos de linha interdigital serão usados como componentes de um sistema de medida instantânea de frequência.

**LOCAL STRUCTURE OF  
(La<sub>1-x</sub>Eu<sub>x</sub>)<sub>1.85</sub>Sr<sub>0.15</sub>CuO<sub>4</sub> INVESTIGATED BY  
<sup>151</sup>Eu MÖSSBAUER SPECTROSCOPY**

M. A. C. DE MELO, ADA P. LOPEZ, D. SÁNCHEZ,  
S. GARCIA GARCIA, I. SOUZA AZEVEDO, E.

BAGGIO-SAITOVITCH

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - Rio de Janeiro -  
Brasil*

The tilting of the CuO<sub>6</sub> octahedra occurring in the structure of low-temperature phases of the rare-earth (RE) doped superconductor (La<sub>1-x</sub>RE<sub>x</sub>)<sub>1.85</sub>Sr<sub>0.15</sub>CuO<sub>4</sub> results in a buckling of the CuO<sub>2</sub> planes. This buckling seems to be an important parameter for the occurrence of superconductivity in these compounds. Usually macroscopic measurements, like x-ray or neutron diffraction, have been used in order to determine the tilting structure of the CuO<sub>6</sub> octahedra. On the other hand, Mössbauer spectroscopy is one of the microscopic methods for local structure determination via electrical quadrupole interaction. We have studied the series of (La<sub>1-x</sub>Eu<sub>x</sub>)<sub>1.85</sub>Sr<sub>0.15</sub>CuO<sub>4</sub> compounds by <sup>151</sup>Eu Mössbauer spectroscopy. For  $0 < x \leq 0.10$  (T phase with CuO<sub>6</sub> octahedra), the Mössbauer spectra exhibit a quadrupole interaction which seems to be dependent on the Eu content and temperature. In this range of composition the resistivity measurements show that the T<sub>c</sub> decreases with the increase of Eu content.. For non-

superconducting samples in the  $T^*$  and  $T'$  phases, with higher Eu content ( $0.10 \leq x \leq 1$ ), the Mössbauer spectra consist only of a single line, whose hyperfine parameters are temperature independent. Since the quadrupole interaction in the  $T$  phase show a dependence on the Eu content and on the temperature, this behavior may be directly connected with the local  $\text{CuO}_6$  octahedra tilting angle. These tilting can not be observed in the  $T^*$  and  $T'$  phases because in these phases there are no  $\text{CuO}_6$  octahedra. The absence of quadrupole interaction in the  $T^*$  and  $T'$  phases indicate that the Eu have a higher local point symmetry, which corresponds to a tetragonal structure.

**EFFECT OF PRESSURE ON  
SUPERCONDUCTIVITY OF  $Hg - 1223$   
HTSC DOPED WITH  $Re$ .**

SERGEY L. BUD'KO  
CBPF

MARCOS T. ORLANDO  
CBPF and UFES

XAVIER OBRADORS

*Institut de Ciència de Materials de Barcelona, Spain*

ELISA M. BAGGIO-SAITOVITCH  
CBPF

Measurements under pressure in superconductors serve as well established instrument both to get insight into the possible mechanisms of superconductivity in the material and to provide a guide line to the synthesis of superconductors with higher critical temperature, in the most simple case through the assumed similarity between chemical (substitution) and hydrostatic (physical) pressure. In contrast to many conventional (low  $T_c$ ) superconductors, in high  $T_c$  superconductors the non-equivalence of the chemical and physical pressure is quite usual due to non-uniform variation of interatomic distances. Measurements under pressure in  $Hg$ -HTSC were performed almost immediately after discovery of this promising class of high  $T_c$  superconductors. For pure (without doping)  $Hg$ -HTSC:  $Hg - 1201$ ,  $Hg - 1212$  and  $Hg - 1223$  the initial pressure derivatives  $dT_c/dP$  were found to be remarkably the same [1]. In the present work the measurements under pressure were performed on  $Re$ -doped  $Hg - 1223$  superconductors. The polycrystalline samples were prepared at ambient pressure, which allows rather small variation of  $Re$  concentration ( $x = 0.14 - 0.20$ ). Resistance under pressure was measured by standard 4-probe technique in piston-cylinder type hydrostatic pressure cell. The pressure derivative of the superconducting transition temperature for  $Re$ -doped  $Hg - 1223$  appears to be different from the  $dT_c/dP$  of pure samples in the same pressure range (for the sample with  $x = 0.20$  concentration of  $Re$  the difference is about 35%). The possible reasons for the change of the pressure derivatives with the  $Re$ -substitution will be discussed within the frame of exist-

ing models of superconductivity in  $Hg$ -HTSC and crystallographic changes induced by  $Re$  substitution. [1] A.K.Klehe et al., *Physica C*, 223 (1994) 313.

**ESTUDO DA DINÂMICA DE VÓRTICES  
NO  $YBa_2Cu_3O_7$  MONOCRISTALINO A  
PARTIR DA DERIVADA NUMÉRICA DA  
MAGNETOCONDUTIVIDADE**

R. MENEGOTTO COSTA, PAULO PUREUR  
*Laboratório de Resistividade, Instituto de Física,  
Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre,  
RS*

S. SENOSSI, K. BEHNIA  
*Laboratoire de Physique des Solides, Université de  
Paris-Sud 91405 Orsay, France*  
L. TAILLEFER, R. GAGNON  
*Department of Physics, McGill University, 3600  
University Street, Québec, Canadá*

Através da determinação experimental da derivada numérica da resistividade em função da temperatura, estudamos a região de temperaturas inferiores à temperatura de transição supercondutora em uma amostra monocristalina de  $YBa_2Cu_3O_7$  na presença de campo magnético aplicado. Campos magnéticos desde 10 Oe até 14 T foram aplicados nas direções paralela e perpendicular aos planos de cobre e oxigênio. A partir de 5000 Oe, nas configurações de campo magnético aplicado perpendicularmente à corrente de excitação, observamos o aparecimento de dois picos na derivada numérica da resistividade em função da temperatura. Na nossa interpretação, estes picos estão relacionados à dinâmica de vórtices indicando as sucessivas perdas de correlação do sólido de vórtices nas direções longitudinal e transversal ao campo magnético aplicado. Este comportamento é determinado pela competição entre as flutuações térmicas e as interações inter-vórtices. Com o aumento da temperatura as flutuações térmicas predominam e acontece a perda de correlação transversal do sólido de vórtices, resultando na fase de líquido de vórtices. Em temperaturas mais altas acontece a perda de correlação na direção longitudinal ao campo e a consequente formação de um líquido 2D de vórtices "pancake" desacoplados: o vapor de vórtices. O pico de mais baixa temperatura observado é um pico agudo indicando uma possível transição de primeira ordem relacionada à fusão do sólido de vórtices, enquanto que o pico de mais alta temperatura é um pico secundário que pode estar relacionado à uma transição de segunda ordem. A partir dos resultados obtidos construímos diagramas de fase H-T correspondentes às configurações, de campo magnético/corrente de excitação, estudadas.

## SUPERCONDUTIVIDADE (Experimental - Teoria) – 13/06/97

---

### Structural and Macroscopic Properties of $\text{LnMO}_y$ (Ln = rare earth; M = Mn, Ni, Cu) Compounds

RENATO DE FIGUEIREDO JARDIM

*Instituto de Física, Universidade de São Paulo*

We report on the synthesis, structural, and physical properties of  $\text{LnMO}_y$  (Ln = rare earth; M = Mn, Ni, Cu) compounds. These families of oxides provide a remarkable opportunity to study the relationship between structural and physical properties since, by moving along the 4f rare earth series, the evolution of several transport and magnetic properties can be nicely correlated to the steric effects associated with the lanthanide contraction. Compounds with these stoichiometries exhibit, depending on the nature of the transition metal, a great variety of macroscopic physical phenomena including effects of colossal magnetoresistance, metal-insulator transition, and high- $T_c$  superconductivity. Phenomena of colossal magnetoresistance (MR) or magnetic-field-induced metal-insulator transitions are discussed for perovskite-type manganese oxides with controlled carrier density and one-electron bandwidth. In addition to the canonical MR behaviors close to the Curie temperature, the first-order phase transition accompanying a several orders of magnitude change in resistivity has been observed under an external magnetic field.  $\text{LnNiO}_3$  perovskites (Ln  $\neq$  La) show metal-insulator (MI) transition with critical temperature  $T_{MI}$  increasing with decreasing size of the Ln ion. Results of different experimental techniques are reviewed, with special emphasis on the relationship between the structural and the physical properties. Possible mechanisms responsible for the MI transition are also discussed. Finally, we discuss some properties of  $T'$ -type copper oxides  $\text{Ln}_{2-x}\text{T}_x\text{CuO}_{4-y}$  (T = Ce, Th) in which superconductivity is observed below 30 K. These copper oxide materials are yet another class of magnetic superconductors in which antiferromagnetic order of the Ln ions coexists with superconductivity. Also, polycrystalline samples of these materials reveal strong evidence of granularity and Josephson coupling. (Work supported by the Brazilian agencies FAPESP under contract No. 96/8416-4 and CNPq under contract No. 304647/90-0).

---

### SYNTHESIS OF A NEW RARE-EARTH COMPLEX PEROVSKITE OXIDE $\text{HoBa}_2\text{NbO}_6$ FOR ITS USE AS SUBSTRATE FOR HIGH $T_c$ SUPERCONDUCTORS

JOSÉ ALBINO AGUIAR, YOGENDRA PRASAD YADAVA, DAVID A. LANDINEZ TELLEZ, JOSÉ MARCILIO FERREIRA, MARCOS TAVARES DE MELO

*UFPE*

In recent years, complex perovskite oxide materials are being investigated for their use as substrate for high  $T_c$  superconductors. These oxides generally have  $\text{A}_2\text{BB}'\text{O}_6$  or  $\text{A}_3\text{B}_2\text{B}'\text{O}_9$  formula and result from the ordering of B and B' on octahedral sites of a simple  $\text{ABO}_3$  perovskite lattice. Because of the increased complexity of the unit cell, large variety of such materials could be synthesised and hence a more continuous progression of lattice parameters could be produced to achieve the matching lattice constant requirements for high  $T_c$  superconductor substrate applications. We have synthesised a new rare-earth perovskite oxide  $\text{HoBa}_2\text{NbO}_6$ , not reported in JCPDS file, for its use as substrate application. The compound  $\text{HoBa}_2\text{NbO}_6$  has been synthesised by solid state reaction method. Stoichiometric mixture of  $\text{Ho}_2\text{O}_3$ ,  $\text{BaCO}_3$  and  $\text{Nb}_2\text{O}_5$  precursor powder was calcined at  $1000^\circ\text{C}$ , 24h for two cycles and annealed at  $1100^\circ\text{C}$ , 12h for one cycle of heat treatment in ambient atmosphere. XRD patterns were recorded at each stage of preparation - the XRD pattern of the annealed sample show that this compound is isostructural with  $\text{YBa}_2\text{NbO}_6$  and  $\text{EuBa}_2\text{NbO}_6$  materials reported in JCPDS file and have an ordered complex perovskite ( $\text{A}_2\text{BB}'\text{O}_6$ ) structure. Electrical and magnetic properties of  $\text{HoBa}_2\text{NbO}_6$  are under study and will be presented in the conference.

Work financed by RHAЕ, CNPq and FINEP

---

**PROPRIEDADES DE LINHAS DE VÓRTICES EM FILMES SUPERCONDUTORES TIPO-II  
SOB A AÇÃO DE UM CAMPO PARALELO**

GILSON CARNEIRO  
*Instituto de Física-UFRJ*

Configurações de linhas de vórtices em filmes supercondutores tipo-II, sem defeitos, submetidos a um campo magnético aplicado paralelamente à superfície do filme, são estudadas teoricamente. A espessura do filme,  $D$ , é suposta ser comparável ao comprimento de penetração,  $\lambda$ . Essas configurações são determinadas minimizando a energia livre de Gibbs para temperatura zero, calculada a partir da solução exata da equação de London, obtida para essa geometria supondo o seguinte: i) as linhas de vórtices são retas, paralelas às superfícies do filme e ao campo magnético aplicado, ii) essas linhas de vórtices formam uma cadeia unidimensional periódica constituída de células retangulares, de dimensão  $D$  perpendicular à superfície do filme e  $a_v$  na direção perpendicular ao campo aplicado, com  $n_v$  vórtices por célula. O método de minimização empregado é o resfriamento simulado, utilizando técnicas de simulação Monte Carlo. Por esse método  $n_v$ ,  $a_v$  e as posições dos vórtices na célula são calculados em função do campo aplicado  $H$ . Os resultados obtidos se aplicam para supercondutores isotrópicos e com anisotropia uniaxial perpendicular à superfície do filme.

Esse método permite ainda estudar o efeito nas redes de vórtice de uma corrente de transporte,  $J_t$ , escoando paralelamente à superfície do filme e perpendicularmente à direção de  $H$ . As dependências de  $n_v$ ,  $a_v$  e das posições dos vórtices na célula em  $J_t$  são obtidas minimizando a energia livre de Gibbs. A corrente crítica é obtida, em função  $H$ , determinando do valor da corrente a partir do qual a energia livre não possui mínimo estável.

---

## SUPERCONDUTIVIDADE (Supercondutividade Teórica)

Palestra Convidada – 11/06/97

---

### VORTEX PINNING IN HIGH-TEMPERATURE SUPERCONDUCTORS

ERNST HELMUT BRANDT

*Max-Planck Institut für Metallforschung*

High-Temperature Superconductors (HTSC) contain magnetic Abrikosov vortices (flux lines, fluxons) in a large range of applied magnetic fields between two critical fields  $B_{c1} \approx 0.01\text{T}$  and  $B_{c2} \approx 100\text{T}$ . Apart from their high transition temperatures  $T_c \approx 90\text{...}135\text{K}$ , HTSC differ from conventional superconductors by their short coherence length  $\xi$ , large magnetic penetration depth  $\lambda$ , and by their pronounced material anisotropy and layered structure. These four properties strongly enhance the thermally activated depinning of flux lines: Small  $\xi$  reduces the pinning energy. Large  $\lambda$  softens the flux-line lattice (FLL) and thus reduces the size of the correlated volume in which the FLL is pinned collectively; the tilt stiffness of the FLL (line tension) becomes particularly small at small tilting wavelengths, such that short flux line segments can depin individually with very small activation energy. As a consequence of thermal depinning the electric resistivity of a HTSC in a magnetic field does not completely vanish even at low current densities. The layered structure of HTSC causes two novel phenomena: (1) A flux line is now a stack of two-dimensional (2D) "pancake vortices" in the superconducting CuO layers. These 2D vortices interact magnetically over a distance  $\lambda$  and by the long-range Josephson coupling between neighboring layers. If this coupling between the pancakes is strong, each stack of 2D vortices behaves as a usual 3D flux line. For weak coupling (large anisotropy) the flux lines are very flexible and can evaporate into independent 2D pancake vortices. Furthermore, uncorrelated 2D vortex lattices can occur in the CuO layers, and in zero magnetic field spontaneous nucleation of vortex-anti-vortex pairs can cause a Kosterlitz-Thouless phase transition. (2) Flux lines parallel to the CuO layers are "Josephson vortices", which have their core inbetween two layers, where the superconducting order parameter is reduced or zero. In oblique applied field the vortices form kinks consisting of pancake vortices connected by Josephson vortices. These kinks can stretch and climb. All these features strongly influence the electric resistivity of HTSC.

---

## SUPERCONDUTIVIDADE (Experimental - Teoria) – 11/06/97

### Coupled Quantum Spin Chains, Pure and Impure: the Path to Understanding High T Superconductivity?

PASCAL LEDERER

*Instituto de Física-UFRJ and Departamento de Física-PUC-Rio*

A new attempt at understanding the strongly correlated 2D electron problem, has developed recently. Since the 1D electron problem is solved exactly, it is hoped that by coupling an increasingly large number of chains, one will reach the 2D thermodynamic limit. This new route has been rich with experimental and theoretical surprises. Odd-leg ladders have, when doped, a non Fermi liquid ground state, with long range AF spin correlations. On the other hand even-leg ladders have a quantum spin liquid ground state which is spin disordered, even in the undoped case, has a gap in the spin excitation spectrum, and a superconducting ground state when doped. Agreement between theory and favour of a Resonating Valence Bond state in even leg ladders. It is a strong indication of a purely repulsive electron-electron interaction mechanism for superconductivity in cuprates.

Experiments on the two-leg quantum spin ladder  $SrCu_{2-x}Zn_xO_3$  have revealed a spectacular destruction of the spin gap by Zn impurities, along with the reappearance of the full magnetic correlations of the single quantum spin chain. I have suggested a quantum phase transition between an AF phase and a short range RVB phase (Pascal Lederer, C. R. Acad. Sci.,(Paris) dec. 1996). Attempts at checking this suggestion by detailed microscopic calculations will be described.

---

## ON CRITICAL CURRENT ENHANCEMENT IN DISLOCATED, DEOXYGENATED AND IRRADIATED SUPERCONDUCTORS: A UNIFIED APPROACH

SERGEI A. SERGEENKOV\*,\*\*

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

\*BOGOLIUBOV LABORATORY OF THEORETICAL PHYSICS, DUBNA - MOSKOW REGION

\*\* *Work support in part by CNPq grant*

Due to the smallness of the coherence length, practically any defects (imperfections) will contribute to both the weak-link properties and flux pinning in high-Tc superconductors (HTS). To take advantage of such an inevitable dualism, a possible scenario for the unified description of the critical current density enhancement in dislocated, deoxygenated and irradiated superconductors is proposed based on the concept of vortex pinning via defect-induced weak links. As is known, any external force leading to the redistribution of defects in the crystal, changes the volume content of the martensite phase in HTS sample. Under an influence of external magnetic field, for instance, the defect structure will be affected by additional stress fields due to the difference between the magnetic susceptibilities of two phases. When one of these phases falls into the superconducting state, its magnetic properties will change drastically in the external magnetic field. Namely, when the applied magnetic field reaches some threshold (defined by the intrinsic defect structure of a given crystal and/or its oxygen stoichiometry), the local defect structure will adjust itself to the penetrating vortex lines, leading to the optimization of pinning forces. By considering a subtle balance between different forces acting upon an extended (dislocations) and point (oxygen vacancies) defects to stabilize their equilibrium position inside a crystal, the model allows us to introduce external fields which control the defect behavior of the superconducting sample and, as a result, enables to describe a rather wide set of some anomalous and peculiar properties of HTS observed experimentally, including: (i) behavior of critical current density in heavily dislocated thin films and related electric field induced phenomena (via converse piezoelectric effect); (ii) "fishtail" anomaly in oxygen-depleted single crystals and stoichiometric melt-textured materials; and (iii) essential pinning improvement in particle irradiated crystals.

## SUPERCONDUTIVIDADE (Supercondutividade Teórica) — 12/06/97

### ONDAS DE PLASMA EM FILMES SUPERCONDUTORES ANISOTRÓPICOS ACIMA E ABAIXO DA FREQUÊNCIA DE PLASMA

MAURO M. DORIA

*Universidade Federal Fluminense*

GILBERTO HOLLAUER

*Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.*

F. PARAGE, O. BUISSON

*Centre de Recherches sur les Très Basses Températures,  
Laboratoire Associé à l'Université*

*Joseph Fourier, C.N.R.S.*

Consideramos a propagação de ondas de plasma no interior de um filme supercondutor anisotrópico via teoria de London-Maxwell, entre dois meios dielétricos semi-infinitos, de modo que ao longo do eixo-c, perpendicular às superfícies, a frequência de plasma  $\omega_p$  situa-se abaixo da frequência de gap do supercondutor. A propagação é assumida ser paralela às superfícies com decaimento exponencial no meio dielétrico. Abaixo da frequência de plasma, ocorre decaimento exponencial no interior

do filme supercondutor. Nesta região o acoplamento entre as duas interfaces supercondutor-dielétrico define três regimes distintos de propagação na frequência: regime óptico, regime acoplado e um regime assintótico respectivamente a medida que  $\beta$  aumenta. Perto da origem,  $\beta \approx 0$ , os modos são ditos ópticos, isto é, são essencialmente ondas planas e o filme supercondutor tem pouca influência. No regime acoplado o campo evanesce a partir das interfaces para dentro do filme suavemente resultando em dois modos distintos: Um modo simétrico e outro anti-simétrico. Para o modo simétrico recuperamos o comportamento experimental medido,  $\omega \propto \sqrt{\beta}$ . O ramo superior da relação de dispersão (anti-simétrico), recentemente proposto,  $\omega \propto 1/\sqrt{\beta}$  também é derivado. Para  $\beta$  suficientemente alto os dois modos, simétrico e anti-simétrico, convergem para o mesmo comportamento. Acima da frequência de plasma, a propagação assemelha-se a que ocorre em um guia de onda isto é, uma onda plana dispersiva confinada no interior do filme que se reflete nas interfaces dielétricas. Neste caso os modos não mais são evanescentes e temos oscilações ao longo do plano de cobre-oxigênio. Ainda neste caso podemos definir modos simétrico e anti-simétrico. A relação de dispersão é aproximadamente descrito nos dois casos, aproximadamente por  $\omega \approx \omega_p \sqrt{1 + (\beta/\beta_0)^2}$  onde  $\beta_0$  é definido.

### Oscilações Coletivas em Filmes Finos Supercondutores na Presença de Vórtices

MAURO M. DORIA

*Universidade Federal Fluminense*

FLÁVIO M. R. D'ALMEIDA

*Pontifícia Universidade Católica*

O. BUISSON

*Centre de Recherches sur les Très Basses Températures,*

*Laboratoire Associé à l'Université*

*Joseph Fourier*

Neste trabalho estudamos a propagação de uma onda de plasma em um filme supercondutor. O filme supercondutor é uniaxialmente anisotrópico e está limitado por dois semi-espacos infinitos. Estes semi-espacos estão completamente preenchidos por um meio dielétrico não condutor de alta constante dielétrica, sem o que, a energia do modo propagante seria alta demais, ultrapassando o hiato de energia e destruindo o estado supercondutor.

Um campo magnético uniforme e estático é aplicado paralelamente ao eixo  $c$  do supercondutor, que no arranjo geométrico escolhido, está perpendicularmente orientado com relação às superfícies do filme. Este campo é responsável pela estabilidade termodinâmica da rede de vórtices, cujo movimento está diretamente acoplado ao movimento da onda de plasma.

O presente trabalho foi feito numa teoria de London que generaliza a abordagem de Gittleman-Rosenblum acoplada às equações de Maxwell. Dentro deste escopo mostramos como vórtices, reconhecidamente causadores de dissipação e modificadores da profundidade de penetração, afetam a onda eletromagnética que se propaga abaixo da frequência de plasma.

Entre nossos resultados está o cálculo do número de onda complexo de um modo simétrico propagante. A partir deste resultado podemos definir vários regimes de comportamento dentro de um diagrama frequência vs campo magnético aplicado. Entre eles um regime óptico, de quase nenhum acoplamento do dielétrico com o filme supercondutor, um regime acoplado, no qual a relação de dispersão não é mais linear, um regime ditado pelo acoplamento da onda com a rede de vórtices e uma região do diagrama dominada pela dissipação. Usando  $YBCO$  a  $4 K$  como um exemplo, determinamos uma região onde a contribuição dos vórtices é dominante em relação à contribuição dos superelétrons e onde a dissipação é suficientemente pequena para permitir a propagação do modo por mais de uma dezena de comprimentos de onda.

### Flutuações Térmicas em Supercondutores em Camadas na Presença de um Campo Magnético Ortogonal.

FLÁVIO M. R. D'ALMEIDA, GILBERTO HOLAUER

*Pontifícia Universidade Católica*

MAURO M. DORIA

*Universidade Federal Fluminense*

SILVANA M. WEINSCHÜTZ

*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas*

A importância das flutuações térmicas em supercondutores de alta temperatura é muito maior que nos supercondutores convencionais e isto ocorre por diversas razões: o valor baixo do comprimento de coerência nos planos de cobre oxigênio, o valor alto da temperatura de transição ( $T_c$ ) e a estrutura intrinsecamente em camadas desses compostos. Esta estrutura em camadas pode levar a um regime de flutuações quase-bidimensional. Alguns experimentos tem indicado a importância de flutuações térmicas na presença de um campo magnético. Em particular para  $BiSCCO$ , a ancoragem de vórtices é desprezível em uma larga faixa de temperaturas abaixo de  $T_c$ . Isto leva à supressão da corrente crítica e ao aparecimento de uma longa calda na transição resistiva até valores de temperaturas da ordem de  $35 K$ . Tal comportamento está relacionado com a destruição da rede de vórtices devida a flutuações térmicas. Na presença de um campo magnético, o amortecimento de oscilações mecânicas causadas em amostras de  $BiSCCO$  muda de caráter drasticamente para a mesma faixa de temperaturas,  $30 K \leq T \leq 40 K$ . Isto também tem sido interpretado como manifestações de derretimento da rede.

Neste trabalho revisamos e estudamos flutuações térmicas em supercondutores em camadas na presença de um campo magnético aplicado perpendicularmente às camadas. Discutimos um diagrama de fase para o caso em questão. Na região de campo fraco, as flutuações da rede de vórtices tem um caráter tridimensional. Isto leva a um derretimento em duas etapas: uma vez que a temperatura é elevada, ocorre uma transição de fase para um estado onde sistemas bidimensionais de vórtices no estado líquido passam a existir nas diversas camadas. Para campos maiores que um determinado valor, tanto as flutuações quanto o derretimento da rede de vórtices são de natureza bidimensional. Nós estudamos o efeito de flutuações da rede na ordem supercondutora de longo alcance. E comprovamos a existência de uma transição dentro do estado da rede de vórtices: a coerência supercondutora entre camadas distantes desaparece em uma temperatura que é substancialmente menor que a temperatura de derretimento.

### Interferometria com Filmes Supercondutores Uniaxiais

FLÁVIO M. R. D'ALMEIDA, GILBERTO HOLAUER

*Pontifícia Universidade Católica*

MAURO M. DORIA

*Universidade Federal Fluminense*

Neste trabalho consideramos a transmissão de uma onda plana, com ângulo de incidência  $\theta$ , linearmente polarizada com campo elétrico paralelo ao plano de

incidência, através de um filme supercondutor uniaxialmente anisotrópico. Na geometria escolhida o filme é espacialmente limitado por dois meios dielétricos idênticos e semi-infinitos. O eixo  $c$  do supercondutor é perpendicular às superfícies do filme. Tomando-se materiais de elevada anisotropia garante-se que a frequência de plasma associada ao eixo  $c$  esteja abaixo daquela necessária ao desemparelhamento de pares de Cooper. O comportamento da transmissão é determinado acima e abaixo da frequência de plasma ( $\omega_p$ ). Abaixo de  $\omega_p$  temos um padrão de transmissão por tunelamento, pois a onda no interior do filme é evanescente. No entanto, acima de  $\omega_p$  abre-se uma janela, cujo tamanho depende do ângulo de incidência, na qual a propagação se dá sem atenuação. Este comportamento permite a construção de um interferômetro capaz de caracterizar propriedades intrínsecas do material supercondutor com elevada precisão. Aqui calculamos as posições dos máximos e zeros de transmissão e a largura da janela.

Em continuação a estes cálculos, investigamos a resposta interferométrica na presença de um campo magnético estático e uniforme. Este campo foi tomado perpendicularmente às superfícies do filme, sendo responsável pela estabilidade termodinâmica de uma rede de vórtices. A teoria utilizada está limitada a comprimentos de onda no interior do filme muito maiores que o parâmetro da rede de vórtices. Também restringimos a temperaturas nas quais efeitos devidos à agitação térmica podem ser desprezados, o que inclui tomarmos como nula a parte normal da corrente elétrica. Via transmissão, calculamos o parâmetro de anisotropia, o coeficiente de arraste viscoso e a constante de Labusch da rede de vórtices. Em qualquer técnica interferométrica os parâmetros são levantados por observações dos deslocamentos dos máximos e zeros de transmissão. Contudo, diferentemente de um Fabry-Perot usual, nosso interferômetro apresenta um distanciamento não uniforme entre máximos sucessivos, o que permite a investigação dos parâmetros de interesse com precisão variável.

### COEXISTÊNCIA DE DIFERENTES ESPÉCIES DE VÓRTICES EM SUPERCONDUTORES ANISOTRÓPICOS

EDSON SARDELLA  
UNESP

Consideramos um sistema de duas linhas de vórtices apontando em diferentes direções com relação a direção média dos vórtices (indução magnética) fazendo um ângulo arbitrário  $\theta$  com relação ao eixo cristalino  $c$ . O modelo utilizado é o de London o qual é válido no limite de baixa indução magnética e grandes valores de  $\kappa$  (parâmetro de Ginzburg-Landau). O modelo de London é falho no limite de distâncias curtas, uma vez que não leva em conta as dimensões do caroço do vórtice. Assim, utilizamos o modelo Gaussiano para regulari-

zar a teoria de London. Dentro deste contexto, a energia livre desse sistema é calculada como uma função do ângulo relativo  $2\alpha$  entre as duas linhas de vórtices inclinadas uma em relação a outra. Para valores de anisotropia suficientemente alta, mostra-se que, na medida em que a inclinação da indução magnética com relação ao eixo cristalino  $c$  ( $\theta \neq 0$ ) é aumentada, as linhas de vórtices inclinadas ( $\alpha \neq 0$ ) subitamente torna-se mais estável que a configuração com as linhas de vórtices paralelas ( $\alpha = 0$ ). Na medida que se aumenta o valor de  $\theta$ , o sistema continuamente muda em direção a configuração de linhas paralelas antes que o ângulo  $\theta$  aproxima-se  $90^\circ$ .

### AUXILIARY BOSON APPROACH FOR ELECTRONIC STATES IN THE DOPED TWO-DIMENSIONAL HUBBARD MODEL

TAIICHIRO SAIKAWA, ALVARO FERRAZ  
Centro Internacional de Física da Materia Condensada,  
UnB

PAULO EDUARDO DE BRITO  
Tokyo Institute of Technology, Tokyo, Japan  
HIROYUKI KAGA  
Niigata Univ., Niigata, Japan

Many interesting features in the low energy excitations of the strongly correlated systems have been observed in recent experimental and theoretical studies including numerical simulations. These features must be closely related to the origins of both the anomalous metallic state and superconductivity in the high- $T_c$  materials. They also provide important information to understand the basic nature of strongly correlated systems. In this work we study evolution of the electronic states of the two-dimensional Hubbard model as we vary the Coulomb interaction  $U$  and doping concentration  $\delta$ . The Hubbard model is one of the most fundamental models which describes strongly correlated systems. Using a Hubbard-Stratonovich transformation in the functional integral formulation, four auxiliary bosons corresponding to one charge and three spin fluctuations are introduced. From this, an effective model including a fermion-boson interaction is formulated. Going beyond the saddle point approximation, the Dyson equations for both the boson propagators and the fermion Green's function are derived by the explicit calculation of the self-energies in one-loop order. Considering a restriction due to the Stoner criterion, we have calculated self-energy, spectral functions and density of states. For small doping ( $\delta = 0.2$ ), as  $U$  approaches a critical value determined by the Stoner criterion, the spectrum of the spin boson propagator has a remarkable low energy enhancement around  $\mathbf{q} \sim 2\mathbf{k}_F$ , which is near  $(\pi, \pi)$ . This enhancement of the spin fluctuation produces a non-Fermi-liquid like low energy  $\omega$  linear dependence in the imaginary part of the self-energy. Due to the self-energy effects, the spectral functions are drastically

changed. As a result, the density of states has pseudo-gap structures around the narrow quasi-particle band on the Fermi energy. These features seem to be precursors of the Mott-Hubbard transition. Our results show qualitative agreement with the data of the numerical simulations.

### SUPERCONDUCTING PROPERTIES OF THE ONE-DIMENSIONAL EXACTLY SOLVABLE MODEL WITH CORRELATED HOPPING

R. Z. BARIEV, F. C. ALCARAZ  
*Universidade Federal de São Carlos*

The study of strongly correlated fermion systems has attracted considerable attention during the last decade in particular due to the discovery of high-temperature superconductivity. Two well-studied models are the Hubbard model and  $t - J$  model. In a one-dimensional lattice these models are both exactly solvable by Bethe ansatz method. Previously a new model was proposed by Bariev, which is again solvable in one dimension, and is relevant to the theory of hole superconductivity by Hirsch, who showed that the introduction of correlated hopping term in the Hubbard Hamiltonian leads to an attractive effective interaction between the holes and the formation of Cooper pairs. Although this picture was confirmed by a BCS-type mean-field theory, it is desirable to find exact results confirming this behaviour. A first step in this direction has been made by Bariev et al. who have studied a simplified version of Hirsch's Hamiltonian and found that this model has a strong tendency towards superconductivity although it does not have finite off-diagonal long-range order. In this report we consider this model with additional interaction between the holes. The total Hamiltonian contains correlating hopping term  $t_1$  and static interaction between holes  $V$ . We show that this model is integrable provided that  $t_1 = t$  where  $t$  is the hopping matrix element and study the superconducting properties at this point analytically and in the general case numerically. The phase diagram is very rich with a crossover from a regime exhibiting off-diagonal long range superconducting order to a regime with a complicated antiferromagnetic order. The region with dominating superconducting pair correlation and with dominating density-density correlation without long-range order also exists.

### SCALING IN BCS TO BOSE CROSSOVER PROBLEM IN DIFFERENT PARTIAL WAVES

ANGSULA GHOSH, SADHAN K. ADHIKARI  
*IFT, UNESP*

The Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) superconductivity to Bose condensation crossover problem gained new impetus after the discovery of high temperature superconductors. We studied the Cooper pair, BCS gap and the number equations for different partial waves (S, P and D) with a finite range potential in two dimensions at zero temperature. The objective of the work is to find out to what extent the universal nature of the solution of the crossover problem is modified after introducing a smooth potential of medium range in place of the constant potential as used in original BCS theory. The two-body problem, the Cooper and BCS models all exhibit ultraviolet divergences for zero range potential and require renormalisation to produce final results. The present study with finite range potential leads to well-defined mathematical problem without the necessity for renormalisation. We calculated the zero-temperature chemical potential  $\mu$  and the gap parameter  $\Delta$  in the entire crossover region and the coherence length  $\xi$  and the critical temperature  $T_c$  in the BCS region for different values of the range parameter using the Cooper-pair binding  $B_c$  as the reference variable. We found robust universal scaling relations in each case valid over several decades of the Cooper-pair binding which does not significantly change with the range of the potential. The scaling exponents are roughly constant for all angular momentums. The general trend is also maintained when the form factors are changed. The present model also produced an appropriate  $T_c$  and a small  $\xi$  in the BCS region in accord with experiments on high- $T_c$  cuprate superconductors.

### SUPERCONDUTIVIDADE (Experimental - Teoria) - 12/06/97

### RESPONSE OF SUPERCONDUCTORS IN A PERPENDICULAR MAGNETIC FIELD

ERNST HELMUT BRANDT  
*Max-Planck Institut für Metallforschung*

Magnetic and electric measurements yield valuable information on the motion and pinning of the Abrikosov vortices in type-II superconductors. To obtain large magnetic signals, in typical experiments the superconductor is a thin platelet or film in a **perpendicular** magnetic field. Up to quite recently, appropriate theories for the evaluation of such experiments were not available. Instead, one resorted to theories which were derived for the "wrong" **longitudinal** geometry, e.g., long slabs or cylinders, for which the linear (Ohm's law) and nonlinear (Bean model)

a.c. susceptibility was calculated. For other specimen shapes one used corrections by a demagnetization factor, but this works only for homogeneous elliptical specimens with linear response. These simple theories in general give inaccurate or even qualitatively wrong interpretation of transverse measurements. Recent exact analytical results extend the static Bean model to thin disks and strips of constant thickness in a perpendicular magnetic field. Analytical and numerical methods yield the dynamics of penetration and exit of magnetic flux in thin strips, disks, squares, and rectangles treated as nonlinear conductors. Remarkably, during flux creep the electric field decreases as one over time and attains a universal profile which depends only on the geometry; therefore, the linear magnetic response during flux creep is independent of any material properties. These results for thin disks and strips can be extended to specimens of finite thickness. Equations and solution methods are presented and some results are given for disks and bars of arbitrary thickness.

### Linha de Irreversibilidade do Hg-1212 - Evidências de Mudança de Dimensionalidade

RUBENS DE ANDRADE JR, ALEXANDRE JOSÉ DE CASTRO LANFREDI, WILSON AIRES ORTIZ

UFSCar - Departamento de Física

EDSON ROBERTO LEITE

UFSCar - Departamento de Química

Apresentamos neste trabalho a análise da linha de irreversibilidade de uma amostra com grãos alinhados de  $HgBa_2CaCu_2O_{6+x}$  (Hg-1212) obtida campo magnético aplicado paralelamente ao eixo  $c$  da amostra. Os pontos de irreversibilidade foram tomados de medidas de magnetização em função da temperatura realizadas em um magnetômetro comercial (Quantum Design, mod. MPMS-5S). A amostra de grãos alinhados foi preparada misturando-se o pó de amostras policristalinas previamente preparadas com epoxi. A mistura foi submetida a um campo magnético de 94 kOe (na temperatura ambiente) pelo tempo de cura da epoxi (aproximadamente 12 horas). Após a cura da epoxi o compósito foi removido e analisado por difração de raios-X. A "rocking curve" medida para o pico (005) do Hg-1212 têm um FWHM de  $2,3^\circ$  e o difratograma mostra apenas linhas pertencentes a direção (001). As amostras policristalinas foram preparadas usando o método de reação controlada sólido/vapor e oxigenadas a  $300^\circ\text{C}$  em fluxo de oxigênio por 20 horas. A linha de irreversibilidade obtida apresenta duas regiões com comportamentos distintos. Em campos baixos,  $H < 10\text{kOe}$ , a linha de irreversibilidade do Hg-1212 é bem ajustada pelo modelo de fusão da rede de vórtices devido apenas a flutuações térmicas. Enquanto que para campos elevados, o campo de irreversibilidade,  $B_{irr}$ , apresenta um comportamento exponencial de com o inverso da temperatura,  $1/T$ . Esta mudança de comportamento da linha de irreversibilidade provavelmente está relacionada com a variação no caráter da flutuação que levam a fusão da rede de vórtices deste material. Ou seja, devemos ter em campos elevados um comportamento quase bidimensional da rede de vórtices do Hg-1212. Trabalho financiado pelo CNPq e FAPESP

## SUPERCONDUTIVIDADE (Teoria) – 12/06/97

### PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DE BIPOLARONS NUM CAMPO MAGNÉTICO

W. B. DA COSTA

Departamento de Física - UFMS

FRANÇOIS M. PEETERS

Departement Natuurkunde - Universiteit Antwerpen - UIA

O recente interesse nos bipolarons surgiu devido ao esforço de se compreender a supercondutividade à alta temperatura [1,2]. Neste presente trabalho visamos generalizar a teoria do bipolaron óptico 2D de Feynman para arbitrários campos magnéticos e arbitrárias temperaturas. Calculamos a energia livre de Helmholtz  $F$  para o bipolaron óptico 2D para temperaturas di-

ferente de zero num campo magnético  $B$ . O comportamento da massa do bipolaron, será estudada como função do campo magnético, da intensidade de acoplamento elétron-fônon  $\alpha$  e da repulsão de Coulomb entre os dois elétrons  $U$ . As quantidades termodinâmicas como: a magnetização, a susceptibilidade magnética, a energia interna, a entropia e o calor específico serão calculadas na vizinhança do ponto crítico. A massa bipolarônica, a energia interna, a entropia e o calor específico serão determinados como função da temperatura para diferentes valores de  $\alpha$  e  $U$  na ausência do campo magnético. A influência da temperatura e do campo magnético sobre o comportamento da transição do bipolaron será estudada, primeiro como função do campo magnético e subsequentemente como função da temperatura para diferentes valores da repulsão de Coulomb.

[1] D. Emin, Phys. Rev. Lett. **62**, 1544 (1989) and D.

Emin and M. S. Hillery, Phys. Rev. B **39**, 6575 (1989).  
 [2] J. G. Bednorz and K. A. Müller, Z. Phys. B **64**, 189 (1986).

**STRUCTURAL, MAGNETIC AND  
 TRANSPORT CHARACTERIZATION OF  
 THE  $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{Cu}_{1-x}\text{Li}_x\text{O}_4$  SYSTEM ( $0 \leq$   
 $x \leq 0.05$ ) IN THE SUPERCONDUCTING  
 AND NORMAL STATES**

SERGIO GARCÍA

*Univ. de la Habana*

JORGE MUSA, BORIS GIORDANENGO, ELISA M.

BAGGIO-SAITOVICH

*CBPF*

The effects of Cu substitution for different cations in the LaSrCuO (214) system have been intensively studied in order to obtain information about the nature of the onset mechanism of the superconducting state and about the origin of the critical temperature suppression with doping. However, there are only a few reports on the Li-doped 214 compound. This is an outstanding case, since  $\text{Cu}^{2+}$  replacement for monovalent  $\text{Li}^+$  creates holes directly at the Cu-O<sub>2</sub> conduction layers, been the unique in plane substitution with this characteristic. A systematic study of the effects of this hole doping in the transport properties of the  $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{Cu}_{1-x}\text{Li}_x\text{O}_4$  series of compounds ( $0 \leq x \leq 0.05$ ) is presented, comprising x-ray diffraction, magnetic and resistivity versus temperature measurements. The normal state region (below 100K) of the experimental resistivity curves for different x values were fitted according to the temperature dependence predicted by several conduction mechanism as semiconducting activation, uncorrelated and correlated variable-range hopping processes, localization and correlation of the itinerant carries in the presence of disorder in two-dimensional systems, and Kondo effect. The critical temperature reduction with doping is correlated with the resistivity parameters and its origin discussed in terms of different pair-breaking mechanisms.

**Magneto-resistência a Baixos Campos em**

$\text{Sm}_{1.82}\text{Ce}_{0.18}\text{CuO}_{4-y}$

MARIA JOSÉ RAMOS SANDIM

*Departamento de Engenharia de Materiais, FAENQUIL,*

*C.P. 116, 12600-000, Lorena, SP*

RENATO DE FIGUEIREDO JARDIM

*Instituto de Física, Universidade de São Paulo, C.P.*

*66318, 05315-970, São Paulo*

Medidas de magneto-resistência  $R(H)$  foram efetuadas no óxido supercondutor  $\text{Sm}_{1.82}\text{Ce}_{0.18}\text{CuO}_{4-y}$  no limite de baixos campos magnéticos  $H$  ( $0.1 < H < 200\text{Oe}$ ) e a temperatura  $T = 4.2\text{K}$ . Diversos valores de corrente de excitação  $I_{ex}$  ( $0.5 \leq I \leq 5\text{mA}$ ) foram utilizados nestes experimentos. O material em questão é policris-

talino e apresenta a dupla transição supercondutora. A primeira transição, relacionada com o desenvolvimento da amplitude do parâmetro de ordem supercondutor em regiões isoladas do material, ocorre a uma temperatura  $T_{ci} = 20\text{K}$ , provoca uma queda parcial em  $R(T)$  e independe de  $I_{ex}$ . A segunda transição, associada a coerência de fase do parâmetro de ordem através do material, ocorre a uma temperatura mais baixa  $T = 10\text{K}$  e leva o sistema ao estado de resistência zero. Uma vez que todas as medidas foram realizadas a  $T = 4.2\text{K}$ , variações na resistência da amostra são provocadas pela destruição da coerência de fase do parâmetro de ordem supercondutor sob a ação do campo magnético aplicado. Através de medidas de  $R(H)$  identificamos um campo  $H = H_x$  como sendo o campo magnético acima do qual a resistência da amostra torna-se mensurável. Foi também observado que  $R(H) \propto H$  para um pequeno intervalo de campo  $H > H_x$  ( $5 \leq H \leq 25\text{Oe}$ ) e que  $H_x$  diminui sensivelmente com o aumento da corrente de excitação. Para campos magnéticos  $H \gg H_x$  ( $30 \leq H \leq 200\text{Oe}$ ),  $R(H) \propto H^{-1}$ . Nós interpretamos  $H_x = \Phi_0/A$ ,  $\Phi_0$  é o quantum de fluxo supercondutor e  $A$  é uma área máxima em que supercorrentes podem ser sustentadas, em termos do tamanho das regiões com coerência de fase supercondutora. Estimativas de  $A$  resultam em regiões de coerência de fase no material no intervalo  $3 < A < 6\mu^2$ . Estes valores são comparáveis aqueles encontrados nos grãos físicos deste composto.

Projeto financiado pela FAPESP (Processo No. 96/08416-4) e CNPq (Processo No. 304647/90-0).

**OTIMIZAÇÃO POR ELEMENTOS FINITOS  
 DE MAGNETÔMETROS SQUID PARA  
 ENSAIOS NÃO-DESTRUTIVOS**

GUILHERME SESTO KÜHNER, CARLOS R. HALL

BARBOSA, ANTONIO CARLOS BRUNO

*PUC-Rio*

A motivação para o desenvolvimento deste trabalho foi a de aprimorar as técnicas de projeto de magnetômetros supercondutores SQUID (Superconducting Quantum Interference Device) aplicados à detecção de pontos localizados (*pits*) de corrosão em estruturas ferromagnéticas. A técnica de ensaio utilizada no Laboratório de Supercondutividade Aplicada e Magnetismo do Departamento de Física da PUC-Rio foi a de *magnetic flux leakage*, que consiste na detecção de perturbações causadas por não-homogeneidades em um campo magnético constante ao qual a estrutura em estudo é submetida. A utilização de SQUIDS em ambientes sem blindagem magnética torna necessário a utilização de magnetômetros diferenciais (gradiômetros). As técnicas de otimização de gradiômetros apresentadas até hoje na literatura fundamentam-se na hipótese de que a perturbação do campo magnético possa ser modelada como um dipolo magnético. A partir desta suposição foram desenvolvidos métodos para a definição

da geometria do sensor que leva à otimização da sensibilidade ou da resolução do magnetômetro. Entretanto, a perturbação gerada no campo magnético aplicado depende da geometria do defeito presente na estrutura, e é de se esperar portanto que também a otimização do sensor dependa das características específicas da fonte de campo que se deseja detectar, ou seja, do formato do defeito. Com base no Método de Elementos Finitos (FEM) este trabalho buscou levantar a característica real do sinal gerado por um *pit* de corrosão em um tubo de aço (tipicamente utilizado na indústria do petróleo), permitindo uma comparação com a hipótese de fonte dipolar citada acima. A solução numérica do problema permitiu ainda avaliar a influência dos principais parâmetros de projeto de um gradiômetro tradicional (linha de base e diâmetro das bobinas) sobre sua sensibilidade e resolução, quando utilizado na detecção de defeitos com a geometria em questão.

### SOLUÇÃO DO PROBLEMA INVERSO EM ENSAIOS NÃO DESTRUTIVOS COM O SQUID UTILIZANDO O MÉTODO DA INVERSA GENERALIZADA

EDUARDO ANDRADE LIMA, ANTONIO CARLOS BRUNO  
PUC-Rio

O desenvolvimento dos SQUIDS (Superconducting QUantum Interference Devices) abriu novas perspectivas para a área de Ensaio Não-Destrutivo quantitativo. Isto permitiu o aumento substancial da precisão das medidas realizadas, possibilitando a aplicação de técnicas para solução do problema inverso aos sinais magnéticos obtidos. O objetivo da técnica utilizada é reconstruir a distribuição de fontes magnéticas dentro de um volume inacessível a partir de medidas magnéticas feitas no exterior deste volume. Em muitas situações, quando o material está magnetizado, campos de fuga devido a falhas no material podem ser modelados por um dipolo magnético ou por um conjunto de dipolos corretamente posicionados na região do defeito. A abordagem utilizada consiste em modelar a distribuição desconhecida por uma matriz de dipolos com posições fixas e com amplitudes a serem determinadas. Dessa forma, o campo magnético medido  $\mathbf{B} = \mathbf{LM}$  pode ser descrito com uma função linear das amplitudes a serem determinadas  $\mathbf{M}$ , onde  $\mathbf{L}$  é a matriz que descreve a geometria da distribuição de dipolos. A solução deste sistema é do tipo  $\mathbf{M} = \mathbf{L}^+\mathbf{B}$ , onde  $\mathbf{L}^+$  é a inversa generalizada de  $\mathbf{L}$ , obtida por meio da decomposição em valores singulares da matriz  $\mathbf{L}$ . Esta inversa minimiza o quadrado da diferença entre o campo magnético medido e o campo magnético resultante da distribuição de dipolos encontrada. Além disso, a solução encontrada tem norma mínima. Esta técnica foi aplicada com sucesso em situações onde é difícil distinguir diversos tipos de defeito pela simples observação do campo magnético

associado.

### SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE REDES TRIDIMENSIONAIS DE JUNÇÕES JOSEPHSON: EFEITOS DE CAMPO MAGNÉTICO E CORRENTE AC EM CURVAS I-V

CLAUDIA CRISTINA DE FARIA, WILSON AIRES ORTIZ  
Universidade Federal de São Carlos - Depto. de Física

Curvas corrente-voltagem (I-V) de redes bidimensionais (2D) de Junções Josephson (JJ) têm sido tratadas através de simulação computacional. A aplicação de campos magnéticos estacionários (DC) e correntes alternadas (AC) em redes 2D causam efeitos marcantes nas curvas I-V. Um destes efeitos é o aparecimento de degraus gigantes de Shapiro para voltagens tais que  $V_n = n(Nh\nu/2e)$  e de degraus fracionários gigantes de Shapiro para voltagens tais que  $V_n = n(Nh\nu/q2e)$ , onde  $n$  é um número inteiro,  $\nu$  é a frequência da corrente aplicada,  $N$  é o número de junções por linha da rede e  $f = p/q = \Phi/\Phi_0$  está relacionado ao campo magnético aplicado, sendo que  $f$  é tal que há um número  $p$  de quantum de fluxo para um número  $q$  de células unitárias ( $p$  e  $q$  também são inteiros e  $\Phi_0$  é o quantum de fluxo). Neste trabalho apresentamos o estudo, por meio de simulação computacional, do efeito da aplicação de correntes AC, bem como de campos magnéticos DC, nas curvas I-V de redes tridimensionais (3D) de Junções Josephson. Nossos resultados indicam a existência de um novo efeito para redes  $3 \times N \times 3$  ( $N=4,7,10,\dots$ ) submetidas a um campo magnético correspondente a  $f=1/3$ , aplicado na direção da corrente DC de "bias". Para essas redes observamos o aparecimento de voltagem para um valor de corrente DC menor do que o previsto a partir dos resultados 2D. Além de exibir regularidade com  $N$ , o efeito, que não existe em sistemas bidimensionais, parece ter relação com a finitude da rede estudada, diminuindo à medida em que  $N$  aumenta. Além disso, estudamos também a dependência dos degraus fracionários gigantes de Shapiro com ângulo entre o campo aplicado e as direções principais da rede 3D.

### UM MODELO DE CAMPO EFETIVO PARA A SUPERCONDUTIVIDADE DE ALTAS TC; CÁLCULO DA LACUNA DE ENERGIA E AJUSTE AOS DADOS EXPERIMENTAIS DO $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$

ERIKA DE CARVALHO BASTONE, PAULO ROBERTO SILVA  
UFMG

Inspirados na expressão da energia livre de Gorter e Casimir, Gaona Jurado e Silva propuseram um modelo hamiltoniano que descreve tanto a supercondutividade de baixas temperaturas críticas (metais) quanto as de altas temperaturas críticas (cupratos). A relação

de dispersão, que fornece a frequência das excitações elementares, pode ser considerada como um gás de férmions de dois níveis e de potencial químico nulo ( $\mu=0$ ). Considerando-se este sistema efetivo de dois níveis e usando-se a estatística de Fermi Dirac, com  $\mu=0$ , obtemos uma expressão para o parâmetro de ordem supercondutor que se mapeia no parâmetro de ordem de um modelo de Ising na aproximação do campo molecular, mas com a temperatura absoluta multiplicada por um fator dois. Como a dependência na temperatura para o parâmetro de ordem para o modelo de Ising em duas dimensões é exatamente conhecida, espera-se que para um sistema supercondutor, também em duas dimensões, onde as correlações não possam ser desprezadas, a expressão "exata" para o parâmetro de ordem também possa ser mapeada no resultado exato para o modelo de Ising, com o devido reescalonamento de temperatura. Essa idéia é usada para ajustar os dados experimentais em mono cristais de  $Bi_2Sr_2CaCuO_8$  (phys. rev. lett. 68, 1069(1992)). Em vista do aparente sucesso obtido no ajuste acima citado, pretende-se no futuro aplicar este mapeamento, usando-se a técnica do operador diferencial, para estudar o efeito da diluição ou seja, a diminuição da temperatura crítica em função da adição de impurezas em alguns materiais supercondutores, como, por exemplo, os cupratos.

### TÉCNICAS DE CAMPO EFETIVO APLICADAS AOS SUPERCONDUTORES

SONIA GAONA JURADO, PAULO ROBERTO SILVA  
UFMG

Em 1934 foi proposto por Gorter e Casimir (G-C) um modelo para a supercondutividade baseado na hipótese dos dois fluidos e válida para todo o intervalo de temperaturas. Inspirados na expressão para a energia livre do modelo G-C e fazendo uso da mais simples extensão do modelo de Ising com uma propriedade dinâmica, o modelo de Ising transverso, TIM, proposto inicialmente por De Gennes e baseado em argumentos desenvolvidos por Blinc para representar as características do  $KH_2PO_4$ , propomos neste trabalho um hamiltoniano efetivo para descrever alguns resultados do estado supercondutor. Escrevemos nosso hamiltoniano da forma:

$$H = -\frac{1}{2}\Omega(T) \sum X_i - \frac{1}{2} \sum J_{ij} Z_i Z_j \quad (1)$$

onde  $X_i$  e  $Z_i$  são operadores relacionados com a função de onda dos elétrons normais e condensados, respectivamente;  $J_{ij}$  é a constante de acoplamento que favorece o emparelhamento dos elétrons em dois sítios de rede diferentes e  $\Omega(T)$  é o "campo transverso" dado pela expressão:

$$\Omega(T) = \frac{1}{2} \Gamma T^2$$

onde T é a temperatura absoluta e  $\Gamma$  é uma constante relacionada com o coeficiente do calor específico dos

elétrons nos metais,  $\gamma$ . A partir de (1) fazemos um estudo dinâmico usando as equações de movimento de Heisenberg na aproximação de fase aleatória (RPA), encontrando expressões para o parâmetro de ordem supercondutor,  $\langle Z \rangle$ , a energia interna do sistema e o calor específico. Neste trabalho temos também uma interpretação para a lacuna de energia, o que é uma característica dos materiais supercondutores. É importante explicitar que embora o modelo de Ising transverso já tenha sido usado na literatura para tratar sistemas ferromagnéticos, entre outros, neste trabalho a interpretação das grandezas calculadas diferem substancialmente daquilo que usualmente é feito na literatura para aqueles sistemas. Isto está diretamente relacionado ao fato de que no presente modelo o coeficiente  $\Omega$  depende explicitamente da temperatura.

### MODELO SIMPLIFICADO PARA O CÁLCULO NUMÉRICO DAS CURVAS DE CORRENTE VERSUS VOLTAGEM DE JUNÇÕES JOSEPHSON SNS.

LUIZ AMÉRICO ALVES PEREIRA, ROBERTO  
NICOLSKY

Universidade Federal do Rio de Janeiro

A teoria microscópica recente para junções SNS (supercondutor-metal normal-supercondutor)[1], basicamente para supercondutores com lacuna de energia (energy gap) isotrópica, na presença de voltagem aplicada, é hábil para expressar as curvas características da corrente versus voltagem (CVC). Entretanto nessa teoria é utilizada uma densidade de estados auto-consistente e devido a sua complexidade, as CVC resultantes não são ajustáveis às curvas experimentais. Neste trabalho nós calculamos teoricamente uma densidade de estados de Andreev aproximada e mostramos que é possível simplificar substancialmente a expressão para a CVC, substituindo a densidade de estados auto-consistente por uma analítica. A expressão resultante é numericamente integrável e a CVC obtida tem todos os fatores essenciais da original e a mesma forma. Usando essa nova expressão é possível ajustar curvas experimentais quando são conhecidos os parâmetros relevantes da junção tais como a resistência e o livre caminho médio da região normal (ou estado normal) e as dimensões da junção. A expressão obtida foi aplicada para algumas junções obtidas na literatura, e a CVC gerada foi comparada com algumas curvas experimentais, mostrando um razoável acordo. Portanto, essa expressão simples pode ser uma ferramenta útil para o estudo de junções SNS.

1. R. Kümmel, U. Günsenheimer and R. Nicolisky, Phys. Rev. B42,3992 (1990)

**SUPERCONDUCTIVITY AND ORDERING OF PR IN CaLaPrBaCuO COMPOUND.**

DAVID LANDINEZ TELLEZ, VEER PAL SINGH AWANA,  
JOSÉ MARCILIO FERREIRA, JOSÉ ALBINO AGUIAR  
*UFPE*

We present the results of Superconductivity, normal state magnetism, heat capacity and neutron diffraction of the La-site Pr substituted  $\text{Ca}_{1-x}\text{Pr}_x\text{BaCu}_3\text{O}_7$  system. AC susceptibility measurements show that the superconducting transition temperature of this system decreases with an increased Pr concentration. The  $T_c$  vs X (Pr concentration) behaviour of this compound appears to be different than that predicted for orthorhombic  $\text{La}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  system. Normal state dc magnetic measurements done in an applied field of 5 KOe shows a Curie-Weiss behaviour in terms of the paramagnetic moment of Pr. The effective paramagnetic moment of Pr appears to be the intermediate between that of the free  $\text{Pr}^{+3}/\text{Pr}^{+4}$  known moments. For the non superconducting samples, i. e, for  $x = 0.70$  and  $1.0$ , we observe an antiferromagnetic ordering temperature TN of nearly 4K for the former and 8 K for

the latter from our dc magnetic and heat capacity measurements. The x-ray and neutron diffraction result show that Pr substitutes isostructurally until  $x = 1.0$  in  $\text{Ca}_{1-x}\text{Pr}_x\text{BaCu}_3\text{O}_7$  system with a few small intensity unreacted lines of  $\text{BaCuO}_2$  and  $\text{CaCuO}_2$  present in the final compound. The lower TN (8 K) of  $\text{CaPrBaCu}_3\text{O}_7$  compound than 17 K of  $\text{PrBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ , warrants a less deleterious effect of Pr in the former than the latter. In RE:123 system the unusual high TN (17 K) of Pr results of hybridisation of extended Pr 4f orbital with adjacent Cu-O conduction band. Our neutron diffraction results show that in present  $\text{CaPrBaCu}_3\text{O}_7$  compound the Pr - (CuO) conduction band distances are more than that observed earlier for  $\text{PrBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ . This implies hybridisation of Pr with Cu-O conduction band for the  $\text{CaPrBaCu}_3\text{O}_7$  compound and hence a lower TN of 8 K for the same, in comparison to the  $\text{PrBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ , resulting in a less deleterious effect of Pr in  $\text{Ca}_{1-x}\text{Pr}_x\text{BaCu}_3\text{O}_7$  system than the widely studied RE $_{1-x}$ Pr $_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ .

## SUPERFÍCIES E FILMES FINOS (Implantação Iônica)

Palestra Convidada – 12/06/97

### From the Dynamics and Energetics of Surface Processes to the Control of Catalytic Reactions

DAVID A. KING

*University of Cambridge, Department of Chemistry, Lensfield Road, Cambridge CB2 1EW, UK*

Modern surface science techniques provide a means for a detailed unravelling of the mechanisms of catalytic reactions and the surface processes which accompany them.

The focus of the present review will be on one surface, Pt100, and several important catalytic reactions: CO oxidation, a critical reaction in car exhaust catalysis, and NH<sub>3</sub> oxidation, the industrial process used to manufacture NO and hence nitric acid. The 100 surface of Pt is of particular interest, because it can be prepared in two forms, a metastable (1x1) bulk termination structure and the stable hexagonal-top-layer structure, denoted hex. Using a novel single crystal adsorption calorimeter, we have determined the energy differences between the clean (1x1) and hex surfaces, and also between the two surfaces with adsorbates which lift the hex reconstruction.[1] Molecular beam studies with CO and D<sub>2</sub> revealed the mechanism for this adsorbate restructuring process [2,3]: it proved to be strongly non-linear. This non-linearity was subsequently shown to be critical in the widespread observation of regimes of sustained oscillations in catalytic processes, such as CO + O<sub>2</sub>, [4] CO + NO, [5] and NO + H<sub>2</sub>, [6] observed on Pt100. Detailed modelling using only experimentally determined kinetic parameters gives remarkably good agreement with experimental measurements of oscillatory existence regimes and periods [4-6]. Finally, a combination of calorimetric and molecular beam techniques have produced a new mechanism for the industrially important ammonia oxidation reaction (the Ostwald process) over Pt catalysts. This includes a tested recipe for a very substantial improvement in the operating conditions, with high selectivity to the desired product (NO) at low temperatures, and with high rates.

1.Y. Y. Yeo, C. E. Wartnaby and D. A. King, *Science*, 268 (1995) 1731.

2.A. Hopkinson, J. M. Bradley, X.CEC. Guo and D. A. King, *Phys. Rev. Lett.*, 71 (1993) 1597.

3.A. T. Pasteur, St. J. Dixon-Warren and D. A. King, *J. Chem. Phys.*, 103 (1995) 2251.

4.M. Gruyters, T. Ali and D.A. King, *J. Phys. Chem.*, 100 (1996) 14417.

5.A. Hopkinson and D. A. King, *Chem. Phys.*, 177 (1993) 433; *J. Chem. Soc. Faraday Disc.* 96 (1993) 255.

6.M. Gruyters, A. T. Pasteur and D. A. King, *J. C. S. Faraday Trans.*, 92 (1996) 2941; A. V. Walker, M. Gruyters and D. A. King, *Surf. Sci.*, in press.

7.J. M. Bradley, A. Hopkinson and D. A. King, *J. Phys Chem.*, 99 (1995) 17032.

## SUPERFÍCIES E FILMES FINOS (Implantação Iônica, Propriedades Mecânicas e Revestimentos Protetores) – 13/06/97

*IL, USA*

E. A. RYAN

*Materials Science Division, Argonne National Laboratory, IL, USA*

S. R. TEIXEIRA, M. E. BRÜCKMANN, L. AMARAL  
*Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, RS*

### ESTUDO DA REAÇÃO DE ESTADO SÓLIDO EM MULTICAMADAS DE Fe/Zr POR MICROSCOPIA ELETRÔNICA

A. PAESANO JR

*Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, PR*

A. T. MOTTA

*Department of Nuclear Engineering, The Pennsylvania State University, USA*

R. C. BIRTCHE

*Materials Science Division, Argonne National Laboratory,*

Multicamadas de filmes finos de Fe-Zr com duas composições (50% e 55% at Fe) e várias modulações (soma da espessura de uma camada individual de Fe e uma camada de Zr) foram produzidas por evaporação por feixe de elétrons sobre substrato de óxido de silício e substrato de sal. Estas amostras foram irradiadas in situ no "Intermediate Voltage Electron Microscope at Argonne National Laboratory" usando íons de Kr a 300 keV e temperaturas durante irradiação entre 25 e 623 K para uma dose total de  $2 \times 10^6 \text{ Kr/cm}^2$ . Um conjunto de amostras foi simplesmente recozido a 773 K. Sob irradiação todas as amostras apresentaram como

produto final da reação de estado sólido um composto amorfo, mas a dose para amorfização mostrou-se dependente de temperatura e da modulação. Para o caso de amostras apenas recozidas e concentração rica em Fe a reação apresenta dois comportamentos: para amostras de pequena modulação forma-se a fase amorfa enquanto que, para maiores modulações, além desta fase amorfa, também se verifica a ocorrência de compostos intermetálicos  $ZrFe_2$  e  $Zr_3Fe$ . Os resultados obtidos são discutidos em termos dos modelos existentes para cinética de reação e regras de seleção de fase aplicáveis em reação de estado sólido em multicamadas.

### Estudo teórico-experimental de perfis de Bi implantado em condição canalizada em alvos de Si cristalino.

GUSTAVO DE MEDEIROS AZEVEDO, JULIO CÉSAR MARTINI, PEDRO LUIS GRANDE, MONI BEHAR  
*Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul*

O conhecimento da distribuição final de ions implantados em alvos sólidos é de fundamental importância em diversas áreas, tais como, dopagem de semi-condutores, dosimetria e modificação de propriedades elétricas e tribológicas de materiais. Para que se possa fazer uma previsão a priori da distribuição final de ions implantados num dado material é necessário que se disponha de uma teoria confiável, bem testada experimentalmente, dos processos de freamento de ions no material em estudo. Os dados experimentais encontrados na literatura referem-se principalmente a implantações em alvos amorfos ou alvos cristalinos implantados em direção aleatória. Dados relatando implantações em condição canalizada são praticamente inexistentes. O presente trabalho tem por objetivo estudar os processos de freamento eletrônico e nuclear de ions pesados implantados em direção canalizada em alvos de Si cristalino. Tal estudo foi realizado de maneira indireta por intermédio da comparação de perfis de implantação experimentais com perfis obtidos por simulações Monte-Carlo realizadas com o programa MARLOWE. Com este fim, implantamos Bi a 20, 30 e 50 keV ao longo da direção  $\langle 100 \rangle$  do Si. As implantações foram realizadas a  $350^\circ\text{C}$  a fim de evitar a amorfização dos alvos. Comparamos os perfis simulados com os perfis experimentais e discutimos a influência da utilização nas simulações de diferentes modelos de perda de energia eletrônica e de diferentes potenciais de interação íon-alvo. O excelente acordo das simulações com os resultados experimentais indica que as teorias correntes de freamento eletrônico e de potenciais interatômicos descrevem satisfatoriamente os processos de freamento de ions de Bi implantados ao longo da direção  $\langle 100 \rangle$  do Si.

### MAPPING OF BRAGG-SURFACE DIFFRACTION TO CHARACTERIZE ION-IMPLANTED SEMICONDUCTORS

MARCELO ASSAOKA HAYASHI, LUÍS HUMBERTO AVANCI, LISANDRO PAVIE CARDOSO  
*Instituto de Física Gleb Wataghin, UNICAMP, CP6165, 13083-970, Campinas, SP, Brazil*

SÉRGIO LUIZ MORELHÃO  
*Laboratório Nacional de Luz Síncrotron / LNLS, CP 6192, 13083-970, Campinas, SP, Brazil*

JOSÉ MARCOS SASAKI<sup>§</sup>, LUIZ CARLOS KRETLY  
*LED(CCS), DEMIC, FEE, UNICAMP, 13083-970, Campinas, SP, Brazil*

SHIH-LIN CHANG  
*Synchrotron Radiation Research Center and Tsing Hua University, Hsinchu, Taiwan, R.O.C.*

The mapping of Bragg-surface diffraction condition of the multiple diffraction (MD) phenomenon is used to study defects in ion-implanted semiconductor crystals. Differences in the MD peak profile due to the diffraction regime, inter-block (kinematical) or intra-block (dynamical), are directly related to the energy exchange among the MD beams (Morelhão & Cardoso, *J. Appl. Cryst.* (1996) **29**, 446). For imperfect crystals with perfect diffracting regions (mosaic blocks) small enough to avoid primary extinction, inter-block diffraction takes place, while large perfect regions enhance dynamical diffraction, therefore primary extinction becomes important and intra-block dominates, which is the case for semiconductors, even those ion-implanted. Broadening of multiple diffraction peaks even in the absence of any ion implantation, which can be introduced by surface finishing process, are due to the limited size of perfect diffracting regions (shortening of the coherence length to the secondary beam) rather than in-plane mosaicity effect as obtained from grazing-incidence measurements. The measured intensity distribution and peak positions of three-beam Bragg-surface diffractions, from the crystal matrix and the implanted layers in Renninger scans, allow for the simultaneous determination of lattice strains and mosaic spread in both directions with respect to the sample surface, in-plane and perpendicular, at very high resolution. The comparison between the strain and mosaic spread measured with this technique and grazing incidence using the in-plane 220 diffraction vector is also reported. <sup>§</sup>Present address: Dept. Física, Universidade Federal do Ceará, CP 6030, 60455-760, Fortaleza, Ceará, Brazil

## RESISTÊNCIA AO RISCO DE FILMES DE FERRO CRESCIDOS EPITAXIALMENTE EM ESTRUTURAS $\text{CaF}_2(111)/\text{Si}(111)$

CARLOS M. LEPIENSKI, NEY P. MATTOSO, DANTE H. MOSCA, WIDO H. SCHREINER, IRINEU MAZZARO

*Departamento de Física - UFPR*

SÉRGIO R. TEIXEIRA

*Instituto de Física - UFRGS*

Filmes epitaxiais de Fe com orientação (110) e espessura de 30 nm, foram depositados em uma camada de  $\text{CaF}_2(111)$ , com espessura de 40 nm, crescida em um substrato  $\text{Si}(111)$ . A caracterização estrutural dos filmes foi realizada utilizando técnicas de raios X e microscopia eletrônica. A qualidade dos filmes de Fe depende da temperatura do substrato durante a deposição. Foram analisadas amostras crescidas com temperaturas do substratos iguais a 25°C, 150°C, 300°C e 450°C. A resistência ao risco foi determinada utilizando um nanoindentador com a capacidade de realização de ensaios de resistência ao risco. Esse equipamento permite realizar riscos, onde pode-se medir o perfil inicial da amostra, controlar a taxa de aplicação da carga e a velocidade de translação da amostra durante o risco. Após o risco ser realizado é possível determinar o perfil da amostra após a aplicação da carga. Outra grandeza que pode ser medida é o coeficiente de atrito entre a ponta de diamante e o material. O processo de riscamento foi realizado com cargas entre 200  $\mu\text{N}$  e 8000  $\mu\text{N}$ . Com estas cargas foi possível riscar as amostras, penetrando somente na camada de ferro ou nas camadas ferro + fluorita. A maior resistência ao risco, isto é, a menor penetração do indentador, foi observada nas amostras de 150°C e 300°C. A menor resistência ocorreu na amostra de 450°C. Esses resultados estão de acordo com as características estruturais dos filmes que indicavam previamente uma maior resistência ao risco para as amostras com a temperatura do substrato iguais a 150°C e 300°C durante a deposição.

## SUPERFÍCIES E FILMES FINOS (Implantação Iônica, Propriedades Mecânicas e Revestimentos Protetores) – 13/06/97

### Alteração do comportamento térmico de polímeros induzida por irradiação de feixes iônicos.

UILSON SCHWANTZ SIAS, GUILLERMO SÁNCHEZ, MONI BEHAR, LIVIO AMARAL

*Instituto de Física - UFRGS*

Os polímeros em geral e os fotoresistes em particular são materiais que estão sendo utilizados em tecnologia de ponta, como por exemplo micromecânica e microeletrônica. É sabido que a maioria dos fotoresistes permanecem estáveis termicamente até 300 - 400°C e a partir destas temperaturas começam a decompor perdendo componentes moleculares. De fato amostras de filmes do fotoresiste AZ1350-J, depositados sobre substratos de silício e aquecidas a 450°C, perdem cerca de 50% de O e 25% de C tendo conseqüentemente sua espessura reduzida de 16000 para 8000 Å. O objetivo deste trabalho é investigar as alterações produzidas pela irradiação iônica quanto ao comportamento térmico dos fotoresistes. Amostras de AZ1350-J foram irradiadas a temperatura ambiente com ions de He, B, F e Ne com energias entre 20 e 800KeV e fluências desde  $10^{13}$  até  $10^{16}$  at/cm<sup>2</sup>. Após implantação as amostras foram recozidas em vácuo por 30 min a temperaturas entre 300 e 600°C. A caracterização das amostras tanto em com-

posição como em espessura foi realizada utilizando a técnica de Retroespalhamento Rutherford (RBS) com feixes de He. Os resultados obtidos mostraram basicamente os seguintes fatos: a) A decomposição passa a ocorrer a 450°C, indicando que a irradiação modifica o comportamento térmico do fotoresiste; b) Existe uma fluência limiar para a qual a proteção a 450°C é máxima; c) Esta fluência depende da energia e do tipo de íon implantado; d) Existe uma importante relação entre a porcentagem de perda de material e o produto da fluência do íon implantado pelo seu poder de freamento eletrônico; e) Os efeitos químicos são desprezíveis frente aos de irradiação (efeitos balísticos).

### STRUCTURAL CHANGES INDUCED BY ION IMPLANTATION ON PLASMA-DEPOSITED POLYMERS

ELIDIANE C. RANGEL, NILSON C. DA CRUZ, MÁRIO A. BICA DE MORAES

*Laboratório de Processos de Plasma, DFA, IFGW, UNICAMP.*

LUIS CARLOS KRETLY

*Centro de Componentes Semicondutores, CCS, e Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação, FEEC, UNICAMP, Campinas, SP, 13083-970*

Exposition to an energetic ion-beam is a well known method used to change the surface layer properties of materials. The modification degree is strongly related to the ion-beam parameters, such as ion species, ion energy and dose and to the nature of the target material. Most ion-implantation studies have been so far directed to semiconductors, metals, ceramics, glasses

and plastics. Much less effort has been expended to investigate the influence of ion implantation in polymeric thin films deposited in low pressure glow discharges. This work describes ion implantation studies of  $P^+$ ,  $N_2^+$  and  $Ar^+$  in films deposited in rf (40 MHz, 70 W) glow discharges of  $C_2H_2$  and He mixtures. Ion energies and ion doses ranging from 150 to 170 keV and from  $10^{15}$  to  $10^{17}$  ions/cm<sup>2</sup> were used. The implantation profiles were calculated using the TRIM (TRansport of Ions in Matter) simulation code. The structural and optical properties of the films were examined by infrared spectroscopy (IRS) and ultraviolet-visible spectroscopy (UVS), respectively. After ion irradiation, the IR spectra of the films show decrease of the absorption bands related to CH bonds, as a result of bond cleavage by the ion beam interaction with the polymeric chains. The chemical structure modifications were found to depend strongly on the ion dose. From the UVS spectra, the index of refraction and the optical gap  $E_g$  were evaluated. The optical gap decreases with increasing ion dose. The electrical resistivity  $\rho$  of the films was measured as a function of ion dose using a two-point probe. A resistivity decrease of approximately ten orders of magnitude was observed at the higher ( $10^{17}$  ions/cm<sup>2</sup>) dose. The dependence of  $E_g$  and  $\rho$  on the chemical structure modification is discussed.

#### Estudo da Difusão de In em $\alpha$ -Ti

MÁRCIO R. FARIAS SOARES, RODOLFO A. PÉREZ,  
MONI BEHAR  
UFRGS

O estudo da difusão de impurezas em elementos do tipo IVB da tabela periódica (Hf, Zr, Ti) é de grande interesse tecnológico. Esses elementos têm em comum duas fases, a fase  $\beta$  (bcc) e a fase  $\alpha$  (hcp), sendo que a temperatura de transformação da fase  $\alpha$  para a  $\beta$  é da ordem de 1150K. Na literatura existem muitos estudos de difusão para a fase  $\beta$ , não ocorrendo o mesmo para a fase  $\alpha$ . Este último fato se deve a duas razões: a) A temperatura estudada é baixa e limitada em um estreito intervalo. b) Os coeficientes de difusão esperados são pequenos ( $D < 10^{-17}$  m<sup>2</sup>s<sup>-1</sup>). Estas duas características reduzem fortemente o número de possíveis técnicas de análise. Medidas prévias de difusão em  $\alpha$ -Zr, mostraram um comportamento anômalo. Porém este fato foi atribuído a impurezas de rápida difusão (como Fe). Essas impurezas possuem uma baixa solubilidade e tendem a precipitar-se a baixas temperaturas sendo isto observado na representação da curva de Arrhenius. Por outro lado medidas recentes de difusão em  $\alpha$ -Ti mostram um comportamento regular. Com o fim de sistematizar os dados experimentais, apresentamos neste trabalho resultados de difusão de In em  $\alpha$ -Ti. A difusão de In implantada em  $\alpha$ -Ti foi estudada num intervalo de temperatura entre 823-1073K usando a técnica Espalhamento Rutherford (RBS). Os experi-

mentos mostram que os coeficientes de difusão seguem um comportamento linear na representação de Arrhenius, sendo a expressão correspondente.

$$D(T) = (2,0 \pm 1,3) 10^{-6} \exp\left[-\frac{(260 \pm 40) KJ/mol}{RT}\right] m^2 s^{-1}$$

Os parâmetros  $D_0$  e  $Q$  são típicos de uma difusão substitucional normal. Comparando os presentes resultados com os prévios publicados de difusão de impurezas em  $\alpha$ -Ti, não mostram evidências dos efeitos de massa ou de tamanho no mecanismo de difusão.

#### MEDIDAS DE PROPRIEDADES MECÂNICAS DE SUPERFÍCIES USANDO O MICROSCÓPIO DE FORÇA ATÔMICA EM AR

RODRIGO PRIOLI MENEZES, VALÉRIA BATISTA  
NUNES, SUSANA ISABEL ZANETTE, ANÍBAL OMAR  
CARIDE  
CBPF

O microscópio de força atômica (AFM) é uma ferramenta poderosa para a obtenção de informação física e topológica de superfícies com resolução nanométrica ou atômica. O AFM é capaz de medir forças da ordem de  $10^{-13}$  e também atinge resoluções laterais da ordem de angstroms. O estudo de propriedades mecânicas tais como atrito, desgaste, rugosidade e dureza são de suma importância para a caracterização de filmes finos, e o AFM se apresenta como uma técnica não destrutiva e que não sofre influência do substrato, já que somente a superfície do material estudado entra em contato com a ponta do AFM. Neste trabalho são apresentadas medidas de atrito, desgaste, rugosidade e dureza das superfícies de mica, atômica e lisa, e do vidro, que apresenta rugosidade em escala nanométrica. O estudo destas superfícies é importante, pois as mesmas são usadas como padrão de calibração para medidas de microfritação. Os dados foram adquiridos no regime de força lateral, para o estudo de fricção e desgaste, e nos modos de força e altura constantes para medidas de rugosidade. Os coeficientes de atrito foram medidos através da aquisição do loop de fricção, onde imagens de força lateral em ambas as direções de varredura são adquiridas enquanto a força normal entre a ponta do AFM e a superfície é variada. As curvas de força lateral x força normal indicam que existe mais do que um único ponto de contato entre a ponta do AFM e a superfície, apesar da alta umidade encontrada no ar ambiente. A rugosidade foi analisada através das imagens de topografia das amostras. Para medidas de dureza o AFM é usado como um nanoindentador onde mede-se a torção normal do cantilever enquanto este se aproxima da amostra. Neste trabalho foram utilizadas pontas de  $Si_3N_4$ .

### TENSÃO MECÂNICA RESIDUAL NA SUPERFÍCIE DE VIDROS GERADA POR MIGRAÇÃO IÔNICA

GILBERTO Y. ODO, LEONARDO N. NOGUEIRA,  
CARLOS M. LEPIENSKI

Laboratório de Propriedades Nanomecânicas -  
Departamento de Física - UFPR

Sob um campo elétrico externo os íons alcalinos presentes nos vidros alcalinos migram em direção ao cátodo. Dependendo do material utilizado como anodo vários tipos de íons podem penetrar no vidro substituindo os íons alcalinos ( $Na^+$ ,  $K^+$ ). Utilizando eletrodos de prata, evaporada a vácuo, os íons  $Ag^+$  penetram no vidro ocupando todos os sítios deixados pelo sódio. Nesse caso a região superficial do vidro próximo ao anodo fica comprimida. Isto pode ser explicado pelo fato dos íons de prata serem maiores que os de sódio. Utilizando-se eletrodos de alumínio em forma de disco, simplesmente pressionados sobre a superfície, observa-se a penetração de íons  $H^+$  que substituem os íons  $Na^+$ , formando uma camada cuja espessura depende da quantidade de carga que circula pelo vidro. Neste caso aparece uma tensão superficial de tração na região próxima da superfície do vidro. A espessura da camada modificada é determinada pela quantidade de carga que atravessa a amostra durante a aplicação do campo elétrico. Neste estudo foram utilizadas amostras em que a espessura da camada modificada estava entre  $1\mu m$  e  $5\mu m$ . Com a presença de tensões superficiais ocorre uma modificação na propagação de trincas na superfície do vidro, alterando o valor da tenacidade à fratura. Para medir as tensões de tração e compressão nas regiões alteradas, determinamos a diferença da tenacidade à fratura das diferentes regiões, através da medida dos comprimentos da trincas provocadas pela penetração de uma ponta de diamante do tipo Vickers. Para o caso de penetração de íons  $Ag^+$ , a tensão medida foi compressiva e igual a 110 MPa. No caso de penetração de hidrogênio, a tensão medida foi de tração.

### CARACTERIZAÇÃO DE CAMADAS NITRETADAS DO FERRO, UTILIZANDO TÉCNICAS DE DESGASTE E DE DIFRATOMETRIA DE RAIOS X

EDUARDO JOSÉ MIOLA, DIRCEU SPINELLI  
EESC-USP

MARISTELA OLZON DIONYSIO DE SOUZA, SYLVIO  
DIONYSIO DE SOUZA  
UFSCAR

O processo de nitretação por iônica consiste em bombardear a superfície que se deseja nitretar com íons de nitrogênio. Os átomos dessa superfície interagem com os íons formando nitretos instáveis, que se depositam na superfície, recombina-se para formar nitretos mais estáveis do tipo  $Fe_{2,3}N-\epsilon$  e  $Fe_4N-\gamma'$ . A nitretação

possibilita a melhoria de propriedades dos, tais como resistência ao desgaste, resistência à fadiga e resistência à corrosão. Neste estudo aplicou-se o processo nitretação iônica no ferro puro (99%) sob o fluxo de uma mistura gasosa contendo 90%  $N_2$  + 10%  $H_2$  a baixa pressão (6 mbar), durante 6 horas. A voltagem aplicada na câmara de nitretação é da ordem de 200 a 1000 V (DC) à temperatura de 773 K, com o objetivo de determinarmos as fases de nitretos formadas e resistência ao desgaste, bem como os valores da microdureza. Utilizamos a difração de raios X (DRX) em cada etapa do desgaste progressivo. Desta forma foi possível observar qualitativamente as fases presentes em função da profundidade. Observou-se na camada interna da matriz a formação de uma solução sólida de nitrogênio com alguns nitretos dispersos. Enquanto que na camada mais externa, é formada pelas fases  $Fe_{2,3}N-\epsilon$  e  $Fe_4N-\gamma'$ . A fase *epsilon* desapareceu no primeiro desgaste e fase *gamma'* só desapareceu após vários desgastes. Isto significa que a camada *gamma'* apresenta propriedades mecânicas superiores àquelas polifásicas mais internas a amostra, enquanto a fase *epsilon* possui ótima resistência a corrosão, mas com uma menor ductilidade que a camada *gamma'*.

(CAPES, FAPESP E IPT-SP)

### CARACTERIZAÇÃO DE REVESTIMENTOS DE TiCN DEPOSITADOS PELO PROCESSO DE MAGNETRON SPUTTER-ION PLATTING: ANÁLISES

COMPLEMENTARES DE RBS E GDOS  
LILIAN FERREIRA DE SENNA, CARLOS ALBERTO  
ACHETE

COPPE/UFRJ-Programa de Engenharia Metalúrgica e de  
Materiais

FERNANDO LÁZARO FREIRE JR

Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica  
do Rio de Janeiro

THOMAS HIRSCH

Stiftung Institut für Werkstofftechnik (iwt) - Bremen,  
Alemanha

O desempenho de componentes mecânicos em ambientes sujeitos a desgaste, corrosão ou carregamento mecânico é determinado, principalmente, pelas propriedades das camadas próximas à superfície. A fim de melhorar este desempenho, várias camadas são usadas na indústria. Entre elas, filmes duros de TiCN vêm sendo estudados intensivamente. Neste trabalho reportamos os resultados de composição química e análises do perfil de profundidade de filmes de TiCN, usando RBS e GDOS. O uso de feixes de 2Mev-He<sup>+</sup> em vez de feixes de alta energia, apesar de sua baixa sensibilidade para elementos como carbono e nitrogênio, per-

mite medidas absolutas, desde que as seções retas sejam bem conhecidas. Por outro lado, GDOS permite um rápido perfil para camadas de  $5\mu\text{m}$  de espessura. Neste caso, o uso de padrões é necessário para a determinação da composição do filme. Tais padrões podem ser facilmente calibrados por RBS. As fases, determinadas pelas análises de difração de raio X, também serão apresentadas. Filmes de TiCN ( $1-1,5\mu\text{m}$ ) foram depositados por magnetron sputter-ion plating, sobre aço rápido M2, aço 1045 e, em alguns casos, silício (100). Um alvo de titânio puro foi usado e os filmes foram depositados numa mistura de  $\text{Ar-CH}_4\text{-N}_2$ . O fluxo de argônio foi mantido constante, enquanto que apenas os fluxos dos gases reativos foram variados. A polarização do substrato,  $v_b$ , e a temperatura do substrato,  $T_s$ , variaram entre 0 e  $-150\text{V}$  e  $300$  a  $450^\circ\text{C}$ , respectivamente. A composição química do filme, em uma larga faixa de teores de carbono e nitrogênio foi determinada, e observou-se a presença das fases  $\delta\text{-TiN}$  e  $\delta\text{-TiC}$  por xrd. Em particular, para filmes depositados a  $V_b = -100\text{V}$ ,  $T_s = 350^\circ\text{C}$  e composição da mistura reativa  $10\%\text{CH}_4/90\%\text{N}_2$ , a camada é bastante homogênea em composição e próxima da estequiometria. É importante, contudo, ressaltar alguns efeitos que deterioram a qualidade das camadas, como polimento insuficiente do substrato e envenenamento do alvo. Ambos os casos podem ser facilmente detectados por RBS ou GDOS, resultando numa interface imperfeita ou estruturas em multicamadas.

### INFLUÊNCIA DOS PARÂMETROS DE DEPOSIÇÃO NA MICROESTRUTURA DOS FILMES DUROS DE $\text{TiC}_x\text{N}_y$

LILIAN FERREIRA DE SENNA, FREDERICO BICHARA HENRIQUES, CARLOS ALBERTO ACHETE  
COPPE/UFRI-Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais

THOMAS HIRSCH

Stiftung Institut für Werkstofftechnik (IWT) - Bremen, Alemanha

A microestrutura dos revestimentos duros, como nitrato e carbonitrato de titânio, definem as propriedades físico químicas e, em consequência, o comportamento tribológico do sistema camada-substrato, numa aplicação em engenharia. A difração de raio X é a técnica comumente utilizada para investigar a microestrutura de filmes finos utilizados como revestimentos, já que esta é uma técnica não destrutiva e relativamente simples. Em nosso trabalho, estas investigações foram realizadas com filmes duros de carbonitrato de titânio,  $\text{TiC}_x\text{N}_y$ , os quais foram depositados via magnetron sputtering, sobre substratos de aço rápido. A influência da concentração de carbono no filme, cau-

sada pela variação no teor de nitrogênio e metano na mistura dos gases reativos, foi o principal parâmetro estudado. Avaliou-se ainda a influência da temperatura de deposição e da polarização do substrato. Foi observado que o aumento do teor de carbono no filme provoca a diminuição do pico (111), bastante intenso nos filmes de TiN, além de um aumento do parâmetro de rede e da tensão interna do filme. Já um aumento na temperatura de deposição não apresentou uma influência significativa sobre os parâmetros de rede, embora tivesse causado certo alívio na tensão interna, conforme esperado. Por outro lado, a polarização do substrato afetou sensivelmente tanto os parâmetros de rede, como a tensão interna do filme. Com isso, é possível observar que os parâmetros de deposição vão influir decisivamente no comportamento mecânico do revestimento duro depositado.

### EFEITO DO BOMBARDEAMENTO DE GÁS NOBRE ASSOCIADO COM TEMPERATURA SOBRE NITRETOS DE FERRO

EDUARDO CERETTA MOREIRA, GUILLERMO SÁNCHEZ, LIVIO AMARAL, MONI BEHAR  
UFRGS

No presente trabalho, investigaram-se as transformações de fases induzidas pelo efeito concomitante de irradiação de argônio e temperatura sobre nitretos, produzidos pela implantação iônica de nitrogênio em ferro. Foram realizadas implantações de nitrogênio monoenergético ( $50\text{ keV}$ ) em matrizes de ferro com fluências  $\phi = 2,5$  e  $4 \times 10^{17}\text{at/cm}^2$  e posteriormente bombardeadas com feixe de argônio ( $300\text{ keV}$ ) com correntes de  $1,5\mu\text{A/cm}^2$ , sendo que a temperatura das amostras foram mantidas entre  $150$  e  $400^\circ\text{C}$ . A identificação e quantificação dos nitretos formados foram realizados através da técnica de espectroscopia Mössbauer por elétrons de conversão (CEMS). O perfil de distribuição e concentração de nitrogênio na camada implantada foi acompanhado por intermédio da análise por reação nuclear (NRA). Implantações de N com  $\phi = 4 \times 10^{17}\text{at/cm}^2$  formam diretamente precipitados  $\epsilon\text{-Fe}_2\text{N}$  que são basicamente estáveis frente ao bombardeamento iônico realizado em temperatura ambiente. Porém, uma significativa transformação  $\epsilon\text{-Fe}_2\text{N} \rightarrow \epsilon\text{-Fe}_{3,2}\text{N}$  ocorre com o uso combinado de feixe de Ar e temperatura do substrato em  $250^\circ\text{C}$ . Outra transformação acontece em  $300^\circ\text{C}$  induzindo uma transformação  $\epsilon\text{-Fe}_2\text{N} \rightarrow \epsilon\text{-Fe}_{3,2}\text{N} + \gamma'\text{Fe}_4\text{N}$ . Estas transformações ocorrem a temperaturas que são  $50^\circ\text{C}$  mais baixas que as correspondentes induzidas somente por recozimento térmico. Por outro lado, implantações de N com  $\phi = 2,5 \times 10^{17}\text{at/cm}^2$  formam inicialmente

precipitados  $\epsilon - Fe_2N + \epsilon - Fe_{2+x}N$ . A transformação  $\epsilon - Fe_2N + \epsilon - Fe_{2+x}N \rightarrow \epsilon - Fe_{3,2}N$  acontece com irradiação de argônio a  $150^\circ C$ , enquanto que o simples tratamento térmico provoca esta transformação a temperaturas do substrato da ordem de  $220^\circ C$ . Portanto, a

redução na temperatura de transformação de uma certa fase pelo efeito conjunto de temperatura e bombardeamento iônico é independente das características iniciais dos nitretos.

---

## SUPERFÍCIES E FILMES FINOS (Física de Superfícies)

### SUPERFÍCIES E FILMES FINOS (Física de Superfícies) – 13/06/97

#### ANÁLISE POR STM E AFM DE FILMES ULTRA FINOS DE RUTÊNIO DEPOSITADOS EM ULTRA ALTO VÁCUO SOBRE Si(111)7x7.

RENATA ANTOUN SIMÃO, CARLOS ALBERTO ACHETE

*Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais - COPPE - UFRJ*

Muito pouco trabalho tem sido desenvolvido sobre crescimento de filmes de Ru/Si(111) apesar da existência de uma fase (RuSi) cujo plano (111) possui parâmetro de rede exatamente igual ao da superfície de Si(111)<sup>1</sup>. Além disto, dependendo da temperatura de tratamento térmico, é possível observar a formação de filmes epitaxiais de RuSi ou  $Ru_2Si_3$ .  $Ru_2Si_3$  foi identificado na literatura como uma fase semicondutora com largura de gap de aproximadamente 0,7eV<sup>5</sup>. Provavelmente devido ao alto ponto de fusão do rutênio, aproximadamente 2900K, apenas um trabalho foi encontrado na literatura versando na formação de filmes finos de Ru/Si(111) crescidos por evaporação por feixe de elétrons<sup>2</sup>. Neste trabalho serão descritos os resultados obtidos evaporando-se por bombardeamento de elétrons filmes de rutênio sobre Si(111)-7x7. Filmes depositados a temperatura ambiente sobre Si(111)7x7 e tratados termicamente a 600°C por 6 minutos apresentam um padrão LEED 1x1 bem definido. O STM mostra que a superfície está completamente recoberta por aglomerados de rutênio de diâmetro médio de 5nm regularmente distribuídos. Tratamento térmico a temperaturas acima de 900°C leva ao reaparecimento da estrutura de Si(111)7x7 em todas as áreas analisadas. Aglomerados de siliceto de rutênio de aproximadamente 2.5nm de diâmetro com formas bastante regulares estão distribuídos sobre a estrutura do silício. Perto dos degraus na superfície há uma depleção de rutênio e a superfície se apresenta reconstruída Si(111)7x7 sem nenhum contaminante. Por outro lado grandes cristais podem ser observados por STM próximos aos degraus monoatômicos da superfície. Imagens de Microscopia de Força Atômica (AFM) feitas ex-situ, imediatamente após retirar as amostras do vácuo, mostram que os cristais estão prendendo ("pinning") os degraus monoatômicos do substrato.

#### Referências:

- A.Zur, T.C.McGill and M-A. Nicolet, J. Appl. Phys. 57, 600 (1985)  
 Y.S.Chang, J.J.Chu and L.J.Chen, Met. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. 54, 57 (1986)  
 Y.S.Chang and M.L. Chou, J. Appl. Phys. 68, 2411 (1990)  
 C.S.Peterson, J.E.E.Baglin, J.J.Dempsey, F.M.d'Heurle and S.J.La Placa, J. Appl. Phys. 53, 4866 (1982)  
 P.Pécheur and G.Toussaint, Phys. Letters A 160, 193 (1991)

#### ATRITO DE UMA CAMADA DE Xe SOBRE METAIS. ESTUDO DE DINÂMICA MOLECULAR.

SEBASTIÁN GONÇALVES

*IF-UFRGS, Porto Alegre, RS*

MIGUEL KIWI, RICARDO RAMÍREZ

*Univ. Católica de Chile*

O atrito é considerado uma força simples na literatura popular, conceito sustentado pelo fato de ser tratado nos cursos introdutórios de física da educação científica ou da engenharia, e raramente revisto. O fenômeno, porém, não é simples; a origem fundamental do atrito, fenômeno físico que faz parte do cotidiano, tem sido discutido há mais de 300 anos, no entanto, até hoje só temos leis fenomenológicas para descreve-lo, não existe ainda uma descrição microscópica satisfatória. Recentes experimentos, a nível atômico, de atrito de uma ou mais camadas de gases raros (Kr ou Xe) com superfícies metálicas (Au ou Ag, (111)), mostraram resultados surpreendentes, como a dependência do atrito com o número de camadas, ou o melhor deslizamento de monocamadas cristalinas quanto a monocamadas fluidas, não observados a escala macroscópica. No presente trabalho, mostramos resultados de simulação numérica, por dinâmica molecular, do atrito de uma camada sólida de Xe sobre uma superfície de Ag (111), restrito a uma interação tipo átomo-átomo com potencial de Lennard-Jones, sem interação eletrônica. Nestas simulações, a resposta da camada a uma força externa, paralela à interfase, é quase lineal ( $v \propto F_{ext}$ , sendo  $v$  a velocidade da camada em relação ao substrato), o que é conhecido como regime de tipo viscoso.

## ESTUDO DA EMISSÃO SECUNDÁRIA DE IONS DE H<sup>+</sup> EM ALVOS AQUECIDOS

CARLOS V. DE BARROS LEITE, JOÃO A. MESQUITA

PEREIRA

PUC-Rio

GILSON B. BAPTISTA

UENF

A taxa de emissão de ions de H<sup>+</sup> de alvos bombardeados por ions mostra um comportamento peculiar com a carga do ion incidente. Este comportamento sugere a hipótese da existência de dois mecanismos para o processo de dessorção. Baseado nesta hipótese a taxa total de emissão de H<sup>+</sup> pode ser escrita como a soma de dois termos,  $Y = Y_{\text{cinético}} + Y_{\text{potencial}}$  correspondendo a emissão devido ao mecanismo cinemático e potencial respectivamente. A taxa de emissão  $Y_{\text{potencial}}$  apresenta uma dependência com cubo da carga do ion incidente. A taxa cinética, que depende da energia, massa e poder de freiamto do ion incidente no material é resultado da energia depositada através do processo de colisão. Neste trabalho foi medida a taxa de emissão de H<sup>+</sup> devido a interação de ions de nitrogênio com estado de carga variando de +1 a +5. O alvo de LiF evaporado sobre alumínio, foi aquecido a temperaturas variando de 290K a 440K. Os resultados mostram um comportamento da taxa de emissão em função da temperatura que apresenta um máximo em torno de 360K. Este comportamento é explicado através da teoria BET considerando as isotermas de Langmuir. Estas isotermas foram usadas para fitar numericamente os dados experimentais obtendo-se as energias médias de adsorção. Verifica-se que no modelo de dois mecanismos a taxa de emissão apresenta uma dependência com o estado de carga do ion incidente que pode ser explicitamente escrita como  $Y = nY_0(1 + aq^3)$ . Observa-se que o coeficiente  $a$  é independente da temperatura do alvo.

## MEDIDAS DA TAXA DESSORÇÃO DE Li<sup>+</sup> INDUZIDA PELA COLISÃO DE IONS DE N

GILSON BRAND BAPTISTA\*

Universidade Estadual do Norte Fluminense - UENF

CARLOS VIEIRA BARROS LEITE, JOÃO A. MESQUITA

PEREIRA

Departamento de Física - PUC-Rio

A dessorção de ions de hidrogênio induzida pela colisão de ion acelerados apresenta características tais como a forte dependência da carga do ion incidente. Resultados encontrados na literatura comprovam que a taxa de H<sup>+</sup> dessorvidos pela colisão de ions varia com o cubo da carga do ion incidente. Neste trabalho o nosso objetivo é verificar se este comportamento pode ser observado para a dessorção de outros ions atômicos leves. Escolhemos o lítio por ser o elemento mais leve após o hidrogênio que apresenta as características apropriadas para a preparação do alvo. Além da variação da taxa de

dessorção de Li<sup>+</sup> com a carga do ion incidente estudamos também a sua variação em função da temperatura do alvo. Os alvos foram preparados pela evaporação de LiF sobre filmes de cobre e alumínio e irradiados com feixes de ions de nitrogênio com carga variando entre 1+ e 5+ e energia de 2,0 MeV, produzidos pelo acelerador Van de Graaff da PUC-Rio. A temperatura do alvo variou entre 20 C e 150 C. Os ions de lítio dessorvidos da amostra foram selecionados por espectroscopia de massa por tempo de vôo. Os resultados obtidos para o rendimento do Li<sup>+</sup> podem ser matematicamente descritos por uma função similar à usada na descrição do H<sup>+</sup>. A variação da espessura da camada de contaminante sobre a superfície do alvo além de outros aspectos relevantes sobre o processo de colisão ion - superfície do alvo também foram estudadas. Todos os resultados obtidos serão apresentados e discutidos a luz dos modelos atuais utilizados para descrever o mecanismo da dessorção de ions induzida pela colisão de ions acelerados.

\* Em licença da Pontifícia Universidade do Rio de Janeiro, PUC-Rio.

Trabalho financiado parcialmente pelo CNPq, Finep e FAPERJ, Brasil.

## SEGREGAÇÃO E RECRISTALIZAÇÃO DE SILÍCIO NA SUPERFÍCIE DE FILMES FINOS E ULTRAFINOS DE Cu/Si(111)

RENATA ANTOUN SIMÃO, CARLOS ALBERTO

ACHETE

Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais -

COPPE - UFRJ

Bombardeamento por elétrons durante a análise de um filme fino metálico por espectroscopia de elétrons Auger causa excitações eletrônicas de átomos e moléculas. Estas excitações podem influenciar não apenas os átomos da superfície como também átomos de camadas mais profundas do filme. A energia transferida é suficiente para aquecer a amostra e desencadear processos que ocorram a temperaturas próximas a ambiente. Neste trabalho será apresentado o primeiro estudo da segregação e recristalização de silício na superfície de filmes finos de 20ML de Cu/Si(111) assistida por feixe de elétrons. Na literatura processos de cristalização de silício em forma fractal na superfície de filmes finos foram observados apenas em estudos de cristalização induzida por tratamento térmico e mediada pela presença de metais de silício amorfo. Filmes de aproximadamente 20ML de Cu/Si(111) foram depositados a temperatura ambiente sobre Si(111)-7x7 a pressões menores de 10<sup>-9</sup> Torr. Os filmes não foram tratados termicamente e foram submetidos à irradiação por feixe de elétrons de 2keV por 3horas. A morfologia dos filmes foi observada ex-situ com microscopia ótica. A irradiação provoca reação cobre - silício e a recristalização do silício na superfície do filme em forma dendrítica.

Cristais de silício nucleiam na superfície e apresentam uma direção preferencial de crescimento. A relação entre as intensidades dos picos de cobre e silício também foi monitorada durante a irradiação e será apresentada. A segregação e recristalização de silício na superfície de filmes ultrafinos de Cu/Si(111) também foi observada por Microscopia de Tunelamento de Varredura (STM). Neste caso o processo foi induzido por tratamento térmico em filmes de até 3ML de Cu/Si(111). O cobre reage com silício e forma uma camada completa de uma estrutura incomensurável com periodicidade quasi-"5x5" e silício segrega pelos defeitos desta estrutura e se recristaliza em forma de Si(111)-5x5.

## SUPERFÍCIES E FILMES FINOS (Física de Superfícies) – 13/06/97

### INFLUÊNCIA DA ESTRUTURA ELETRÔNICA NA INTERAÇÃO DEPENDENTE DO TEMPO ENTRE UM ESTADO LOCALIZADO E UM CONTÍNUO DE ESTADOS

RAFAEL TRISTÃO PEPINO, GEORGE GERSHON KLEIMAN  
UNICAMP

Estudamos a influência da estrutura eletrônica do contínuo na transferência de carga entre átomos e superfícies sólidas. Para a dependência temporal do potencial de interação usamos a forma mais simples possível: diferente de zero e constante apenas quando  $-\tau/2 \leq t \leq +\tau/2$ . Calculamos a ocupação final do estado eletrônico do átomo,  $\langle n_a(\infty) \rangle$ , espalhado por uma superfície com densidade de estados lorentziana, como função das energias envolvidas: energia de Fermi ( $\epsilon_F$ ), energia do estado atômico ( $\epsilon_a$ ), energia do centróide da banda ( $\epsilon_c$ ), largura da banda ( $\Gamma$ ), potencial de interação ( $\langle V \rangle$ ) e  $\hbar/\tau$ , onde  $\tau$  é o tempo de duração da interação. Desse estudo concluímos a existência de dois comportamentos concorrentes para  $\langle n_a(\infty) \rangle$ : um oscilatório com  $\tau$  e outro amortecido. O primeiro tem origem na interferência quântica entre estados, enquanto o segundo vem do fato de a banda ter uma largura  $\Gamma$  (se pensarmos no contínuo como um estado virtual, podemos associar esse amortecimento ao tempo de vida finito do estado virtual).

Dois regimes distintos foram identificados, para o caso  $\epsilon_a \sim \epsilon_c$ :

- $\Gamma < \langle V \rangle \Rightarrow$  comportamento oscilatório amortecido.
  - $\Gamma > \langle V \rangle \Rightarrow$  comportamento puramente amortecido.
- Concluímos, dessa forma, que a largura da banda influi fortemente no processo de transferência de carga. Os

trabalhos anteriores encontrados na literatura reportam apenas o comportamento puramente amortecido, já que tratam o caso de uma banda com largura infinita (limite de banda larga).

Reportaremos em um futuro próximo resultados para uma dependência temporal mais realista para o potencial e para o caso onde a correlação intra-atômica é importante.

### ENERGY DISTRIBUTION OF H IONS DESORBED FROM METALS BY $^{252}\text{Cf}$ FISSION FRAGMENT IMPACT<sup>a</sup>

C. C. DE CASTRO, E. F. DA SILVEIRA

Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica,  
C. P. 38071 Rio de Janeiro 22452-970, Brasil

Experiments on secondary hydrogen ions ejected from six UHV cleaned metal films (Au, Ti, Ni, Ta, V and Nb), all submitted to an atmosphere of CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub> or D<sub>2</sub>O, were performed with Cf-fission fragments. A C film was also used for comparison. The final pressure in the analyzing chamber, after one of those gases was introduced, was 10<sup>-6</sup> torr. The method of introducing a gas in the analyzing chamber was aimed at enhancing the adsorption of a known substance on the substrate. In this way, the source of H ions from the surface can be controlled.

The total initial energy distributions and yields were measured by means of a double grid time-of-flight technique. The radial component of the velocity of outgoing ions was obtained through a position sensitive MCP detector.

The results show that both the energy distributions and yields do not vary significantly as the substrate or adsorbing gas is changed. This is an indication that the hydrogen containing molecule is not the most important parameter in the desorption mechanism for hydrogen ions in the experimental circumstances. In order to explain the experimental findings, the desorption mechanism of H ions is discussed in terms of the electronic excitation caused by the fission fragments as they penetrate the solid.

<sup>a</sup> Work sponsored by CAPES and performed at the Institut für Kernphysik by invitation of Prof. Dr. Karl Wien, whom we thank above all for the fruitful discussions.

### ENERGY DISTRIBUTION CALCULATION OF H<sup>+</sup>/ IONS DESORBED FROM SOLID SURFACES BY ELETRONIC SPUTTERING

C. C. DE CASTRO, I. S. BITENSKY, E. F. DA SILVEIRA

Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica,  
C. P. 38071 Rio de Janeiro 22452-970, Brasil

K. WIEN

Institut für Kernphysik, Technische Hochschule, 64289  
Darmstadt, Germany

Axial, radial and total energy distributions have been recently measured for  $H^+$  desorbed from metal and hydrocarbon surfaces by  $^{252}\text{Cf}$  fission fragments. A theoretical model is developed to explain the main characteristics of such distributions. The basic assumptions are as follows:

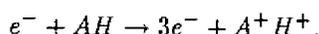
$H^+$  ions are emitted as a consequence of electronic transitions in the hydrogen containing molecules located on the solid surface. These transitions are induced by secondary electrons escaping the ion track area produced as the projectile penetrates the solid.

The following processes investigated here for electrons incident on a molecule, which will be designated by AH, that can lead to  $H^+$  emission are:

Direct ionization of the neutral molecule to a single ionized excited state with subsequent dissociation:



Double ionization of the neutral molecule:



The  $H^+$  emission is assumed to occur in a two-step process. First, from the instant of formation of a repulsive state till a mean time of relaxation,  $\tau$ , the electronic system of the solid is perturbed and the molecule is excited. During this interval, the  $H^+$  ions gain kinetic energy. Second, after relaxation, the electronic system is unperturbed and the outgoing ion is subjected to no force, yet it can be neutralized via electron transfer from the solid.

The above assumptions are represented by a set of parameters, which govern the calculated  $H^+$  energy distributions. The parameters that most affect the shape of the distributions are the neutralization time,  $\tau$ , and the equilibrium internuclear separation of the hydrogen containing molecule,  $R_{eq}$ . Varying such parameters, one can successfully describe the main features of the measured axial, radial and total energy of  $H^+$  emitted from solid surfaces. The theoretical distributions obtained are compared with the experimental results.

### DISPERSÃO DE ESTADOS ELETRÔNICOS DE SUPERFÍCIES EM METAIS DE TRANSIÇÃO

BERNARDO LAKS, ALEXANDRE ABDALLA ARAUJO  
UNICAMP

Medidas de fotoemissão com resolução angular para a superfície (100) do tungstênio e molibidênio revelaram a presença de um pico na distribuição de energia em 0.4 eV abaixo do nível de Fermi. A existência desta estrutura anômala na distribuição de energia foi confirmada por experiências feitas em emissão de campo bem como estabeleceram sua sensibilidade em relação a grandes variedades de adsorventes, tais como H, O, N, Ca, CO,

Xe e Kr. A origem desta estrutura tem suscitado do ponto de vista teórico muitas controvérsias. Plummer e Gadzuk, assim como Sturm e Feder, sugeriram que ela está associada a um estado de superfície localizado no gap de energia relativo produzido pelo acoplamento spin-órbita ao longo da direção  $\gamma H$  da zona de Brillouin, isto é, com momento paralelo à superfície igual a zero. No entanto Kasowski mostrou que mesmo na ausência de spin órbita é possível obter-se estado de superfície na vizinhança do nível de Fermi. A mesma conclusão chegaram Desjonquères e Grot-Lackman, utilizando o método de momentos. Neste trabalho nós utilizamos um hamiltoniano de ligação forte (tight-binding) com uma base de 9 funções: 6s, 6p e 5d na determinação da dispersão dos estados de superfície para a superfície (100) do molibidênio e tungstênio. A densidade espectral de estados eletrônicos é determinada por um formalismo de função de Green utilizando-se o método de matriz transferência. Resultados para pontos  $\vec{k}$  ao longo das direções de simetria são apresentados para estados ocupados e desocupados. As estruturas da densidade espectral para a superfície e volume apresentam excelente concordância com os dados experimentais de fotoemissão.

### PROPRIEDADES ELETRÔNICAS E ESTRUTURAIS DE SUPERFÍCIES DE $\alpha$ -SiC e $\beta$ -SiC

MARIA MATOS

Departamento de Física - PUC-Rio

ROALD HOFFMANN

Department of Chemistry - Cornell University

Carbeto de silício é cristalizado na forma hexagonal ( $\alpha$ -SiC), cúbica ( $\beta$ -SiC) ou em politipos. Embora com coordenação tetraédrica em todas as formas, as propriedades eletrônicas mudam, como por exemplo, a energia do gap (2,4 a 3,3 eV). Essas diferenças são importantes na fabricação de dispositivos, que podem exigir uma ou outra forma estrutural de SiC. Uma qualidade desse material é sua resistência a altas temperaturas. A interface SiC-metal deve possuir também resistência semelhante. Inúmeros trabalhos têm sido feitos para caracterizar essa interface, sua estabilidade, suas propriedades óticas e eletrônicas.

Neste trabalho são investigadas as propriedades eletrônicas de  $\alpha$ -SiC e  $\beta$ -SiC e das superfícies (1000) e (100), respectivamente, sem levar em conta reconstrução. Utiliza-se o método extended Hückel (EH). Nas últimas décadas inúmeros cálculos teóricos foram feitos nesses sistemas, utilizando métodos de complexidade variada. O método EH é talvez o mais simples dentre eles; por essa razão, é bastante conveniente para estudar por exemplo, mudanças complexas na estrutura, como reconstrução em superfícies, mecanismos de interação em interfaces, etc.

Os resultados obtidos até o presente mostram que a es-

estrutura de bandas depende fortemente de parâmetros físicos do modelo. Com parâmetros standard, a forma cúbica apresenta gap direto, enquanto que a forma hexagonal, gap indireto. Num estudo das relações entre as várias interações cristalinas e a estrutura de bandas reproduzimos algumas correlações úteis, como: o valor do gap de energia está ligado a interações do tipo  $p\sigma$ , e a dispersão da banda superior, de valência, e inferior, de condução, está ligada, principalmente a interações  $s-p$ . Verificou-se que pode ser necessário incluir níveis atômicos excitados (C-3s e Si-4s) a fim de obter o gap indireto. Pretende-se determinar as características desses orbitais e obter parâmetros físicos adequados bem como analisar o efeito dos mesmos nas interações de superfície.

### ESTUDO DA DESSORÇÃO DE ÍONS COM A VARIAÇÃO DA ENERGIA DOS PULSOS DE UM LASER DE NITROGÊNIO

FAUSTO EDUARDO ÁVALOS CASCANTE, VLADIMIR MONTERO COLLADO, ROBERTO ROSAS PINHO, ENIO FROTA DA SILVEIRA

*Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro*

A partir do final da década de 70, o laser começou a ser utilizado como fonte de ionização eficiente para estudar compostos de massa molecular de até 3000 Da. O estudo da estrutura molecular de macromoléculas requer não são o conhecimento dos valores da massa molecular das mesmas como também dos das massas de seus fragmentos. Para compostos com massa molecular acima de 3000 Da, o principal problema da utilização de laser como fonte de ionização é que ocorre a fragmentação excessiva das macromoléculas durante o processo de dessorção. A procura da solução deste problema conduziu ao desenvolvimento da técnica MALDI (Matrix Assisted Laser Desorption Ionization): as amostras são misturadas às matrizes, que absorvem a energia do laser, transmitindo às macromoléculas a energia suficiente para dessorvê-las ionizadas e intactas. Apesar do grande desenvolvimento na determinação da estrutura de macromoléculas com a técnica MALDI, os mecanismos de dessorção dos íons moleculares intactos não estão ainda totalmente esclarecidos. Visando obter uma maior compreensão do processo de dessorção induzida por laser, foi realizado um estudo com diferentes matrizes e suas misturas com diferentes amostras, variando-se a energia dos pulsos de um laser de nitrogênio, procurando relacionar o grau de emissão dos íons moleculares com a energia envolvida no processo de dessorção.

### MUDANÇAS NA ESTRUTURA ELETRÔNICA DA MOLÉCULA DE CO QUANDO ADSORVIDO SOBRE A SUPERFÍCIE K/AG(110)

MARCELO GOMES DA SILVA

UNF

CLEMENS LANG, RAINER FINK, EBERHARD UMBACH  
*Uni. Würzburg*

Neste trabalho a co-adsorção de potássio e de monóxido de carbono sobre a prata (110) foi estudada por LEED, TPD, XPS e UPS. A deposição de potássio induz a reconstrução da superfície Ag(110) e a formação de super-estruturas. Foram observadas por LEED quatro diferentes estruturas: 1x1, 1x2 ("missing row"), c(2x2) e zigue-zague. A formação dessas estruturas depende da temperatura da amostra e concentração de potássio na superfície ( $\theta_K$ ). A fim de diferenciar as variações induzidas pelo potássio sobre a estrutura eletrônica de CO, a adsorção de CO sobre a prata (110) foi previamente caracterizada. Os resultados revelam a existência na monocamada de uma espécie física e de no mínimo quatro espécies químicas de CO. A espécie física desaparece da superfície quando a temperatura da amostra é superior à 40 K, enquanto que as espécies químicas desaparecem para temperaturas superiores à 70 K. Com a presença de potássio em concentrações  $\theta_K$  superiores a 0.5 foi identificado um estado químico adicional para o CO que desaparece da superfície juntamente com o potássio para temperaturas superiores à 650 K. A concentração desse estado cresce com a quantidade de potássio presente na superfície e o processo de formação dessa espécie pode ser ativado termicamente ou por radiação ultra-violeta. Pontos adicionais de difração LEED foram observados, sugerindo assim que essa espécie química aparece ordenada sobre a superfície. Devido a drástica mudança na estrutura eletrônica do CO, relativa a aquela observada na fase gasosa, foi sugerido a formação de complexos do tipo  $K^{+-}O-C \equiv C-O^{-+}K$ .

### EFEITOS DA INTERAÇÃO DE LONGO ALCANCE NAS PROPRIEDADES DE SUPERFÍCIES DE UM CRISTAL ANARMÔNICO

ANDRÉ LUIZ C. DA SILVA, JOSÉ NICODEMOS T. RABELO, VIATCHESLAV I. ZUBOV  
*UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS*

Em trabalho anterior a este, apresentado no XIX congresso de física da da matéria condensada, analisamos o efeito da interação de longo alcance nas propriedades de superfície de um cristal anarmônico na aproximação linear em temperatura ( $\Theta = k_b T$ ) e dos coeficientes de força  $e_n/f r_0, f_n/f$  e  $g_n/f r_0^2$  ( $e_n = \Phi'(nr_0)$ ,  $f_n = \Phi''(nr_0)$ ,  $g_n = \Phi'''(nr_0)$ ,  $f = \Phi'(r_0)$  e  $r_0$  é a posição de equilíbrio do átomo), onde foi utilizada a teoria não simetrizada do campo autoconsistente, cuja idéia central é a inclusão de termos anarmônicos de quarta ordem na energia potencial sem o emprego da teoria termodinâmica de perturbações. Cada átomo que constitui o cristal é descrito por uma função de distribuição localizada ao redor do sítio da rede, na presença de um po-

tencial médio criados por todos os outros. No presente trabalho, analisamos todas as propriedades de superfície numa aproximação de segunda ordem em potências de  $\Theta = k_b T$  e dos coeficientes força  $e_n e_k / f^2 r_0^2$ ,  $e_n f_k / f^2 r_0$ ,  $\Theta e_k / f^2 r_0^3$ ,  $\Theta f_k / f^2 r_0^2$ ,  $\Theta g_k / f^2 r_0$ ,  $\Theta h_k / f^2$ . Para uma estimativa numérica dos resultados utilizamos os potenciais interatômicos de Lennard-Jones, Born-Mayer e Schiff, que são característicos dos cristais moleculares, iônicos e metálicos respectivamente. Nos cálculos numéricos consideramos que cada átomo interage como primeiros, segundos, terceiros e quartos vizinhos e analisamos as implicações dos efeitos estáticos nas propriedades de superfície.

### Emissão de Elétrons e Íons a Partir de Nanodispositivos: Um Tratamento Teórico das Curvas de Emissão

CAIO MÁRIO CASTRO DE CASTILHO  
I. F. - UFBA

Várias são as técnicas que tem permitido a produção de feixes de partículas carregadas, elétrons ou íons, com dimensão de fonte inferior a 100 nm e capazes de operar em condições de nanolitografia. Assim, seguindo-se a fontes de metal líquido (Liquid Metal Ion Sources - LMIS) que, a partir da década de 70, possibilitaram correntes de 100 pA em áreas de cerca de 100 nm de diâmetro, foram desenvolvidas fontes de íons produzidos por campos elétricos, denominadas genericamente de Gas Field Ion Sources (GFIS). Para uma ponta emissora padrão, tipo GFIS, a abertura do feixe é da ordem de 30 graus. Mais recentemente foi possível fazer crescer sobre uma ponta emissora tipo GFIS, que tipicamente possui um raio de curvatura da ordem de algumas poucas centenas de nm, uma protusão - denominada de supertip, a partir da qual feixes com abertura de até 1 grau podem ser produzidos. A possibilidade de feixes extremamente brilhantes e com elevado grau de confinamento angular abre assim novas perspectivas na produção de dispositivos deste tipo, indicando a possibilidade de obtenção de fatores de qualidade típicos (brilhância espectral) duas ordens de magnitude acima dos de emissores GFIS convencionais. Neste trabalho apresentamos uma sistemática discussão teórica dos vários parâmetros característicos de uma supertip GFIS nas condições de operação tanto de emissão de elétrons como de íons. Os aspectos relevantes são as probabilidades de tunelamento, a variação da intensidade local do campo elétrico nas zonas com diferente atividade, i. e., onde a intensidade do feixe é variada,

a difusão atômica ao longo da superfície e as curvas de corrente versus tensão aplicada.

### AXIAL ENERGY MEASUREMENTS OF DESORBED H IONS INDUCED BY MeV NITROGEN BEAM

C. C. DE CASTRO, J. A. M. PEREIRA, E. F. DA SILVEIRA

Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica,  
C. P. 38071 Rio de Janeiro 22452-970, Brasil

K. WIEN

Institut für Kernphysik, Technische Hochschule, 64289  
Darmstadt, Germany

The energy with which an ion is desorbed from a solid surface, is directly related to the mechanism responsible for its emission. In order to understand the desorption process of H ions, the axial initial energy distribution was measured for amorphous solids with different electrical properties.

A double-grid time-of-flight technique was used to obtain the axial initial energy distribution of  $H^-$  and  $H^+$  emitted from carbon, phenylalanine, CsI, Au, Cu and Al targets bombarded by 0.2 to 6 MeV nitrogen beam. Projectile charge state  $q$  was varied from +1 to +5.

The energy distributions for  $H^+$  ions have been fitted by an effusion-type function. The main experimental findings for the mean energy  $\bar{E}$  are as follows:

1. For all targets,  $\bar{E}(H^-)$  decreases slowly with increasing projectile velocity;
2.  $\bar{E}(H^+)$  remains approximately constant for all targets except for carbon, for which it decreases;
3. For both ions,  $\bar{E}(H^+)$  and  $\bar{E}(H^-)$  increase slowly when  $q$  increases;
4.  $\bar{E}$  relative to the carbon target are the smallest measured:  $\bar{E}(H^+) \cong 2.3$  eV and  $\bar{E}(H^-) \cong 0.8$  eV.

The H ion desorption mechanism is described in terms of molecular excitation produced by the secondary electrons generated as the projectile goes through the solid. The above experimental findings are consistent with the proposed model.

## SUPERFÍCIES E FILMES FINOS (Filmes Finos: Diamante e Materiais Super-Duros)

**SUPERFÍCIES E FILMES FINOS (Filmes Finos: Diamante e Materiais Super-Duros) – 12/06/97**

### CONSTANTES ELÁSTICAS DE FILMES DE CARBONO AMORFO HIDROGENADO

RODRIGO GRIBEL LACERDA, FRANCISCO DAS CHAGAS MARQUES

*Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP Instituto de Física Gleb Wataghin Departamento de Física Aplicada*

Neste trabalho realizamos um estudo das propriedades termomecânicas de filmes de carbono amorfo hidrogenado. Este material têm sido bastante investigado e suas propriedades mecânicas são um dos grandes atrativos para aplicações tecnológicas, principalmente às dos filmes de carbono amorfo do tipo diamante (diamondlike), que têm sido utilizados como revestimento de ferramentas e peças óticas, devido à sua alta dureza, baixa fricção, e por serem quimicamente inertes. O objetivo deste estudo é o de obter informações estruturais dos filmes de carbono amorfos (que podem se apresentar com diferentes hibridizações) através da investigação de suas propriedades termomecânicas. Os filmes foram preparados em um sistema de sputtering rf convencional, em atmosfera de metano. Contrariamente ao que se faz nesta técnica, os filmes foram depositados no catodo (sem o uso de alvos) e não no anodo. Os filmes foram preparados em função da pressão e em função da polarização bias). As propriedades termomecânicas foram obtidas através da medida do raio de curvatura do sistema filme/substrato, determinado com um sistema óptico baseado no desvio de um feixe de laser de He-Ne refletido pela amostra. Observamos que o stress de todos os filmes é do tipo compressivo, e diminui com o aumento da pressão de CH<sub>4</sub>. Observamos também que o módulo de Young diminui em função da pressão do gás, indicando que está ocorrendo uma mudança estrutural do material. Por outro lado, o coeficiente de dilatação térmica é praticamente constante na faixa de pressão estudada.

(Apoio: FAPESP, CNPq e PADCT)

### CVD DIAMOND GROWTH RATE AND ITS DEPENDENCE WITH COLUMNAR AND RE-NUCLEATION STRUCTURE

VLADIMIR JESUS TRAVA-AIROLDI, EVALDO JOSÉ

CORAT

LAS/INPE, FE/USF\*

NÉLIA FERREIRA LEITE

LAS/INPE

JOSÉ ROBERTO MORO

FE-USF

Wide application, easy to be obtained and an interesting research area made of polycrystalline CVD-diamond as a new material one of the most important area of investigation in the world. Interesting models as well as elucidated experiments gave us a convinced approach about the most probable mechanism involved in the metastable CVD diamond growth. Otherwise, in order to expand the application area, some polycrystalline structure properties concerning columnar growth and re-nucleation steps have been considered as fundamental phenomena related to macro-parameters of diamond growth. However these relationships among them is not very well understood. In this work an extensive study relating the columnar growth and the re-nucleation phenomena to the CVD diamond growth parameters is presented. Using an enhanced Hot Filament Assisted Technique and a convenient prepared silicon wafer as substrate it was observed that the precursor carbon content in the inlet gas, filament temperature and the flow rate are the main representative parameters to change the diamond film morphology and the columnar structure. This result gave us support to believe that there is a competition between re-nucleation and columnar growth process, and so a limit for a diamond growth rate. Although the diamond quality doesn't change for constant carbon concentration the morphology and bulk structure change very much with these main parameters. Also, it was measured the dependence of the intrinsic stress with the morphology and bulk CVD diamond film. The intrinsic stress comes from the structure defects and impurities. Low intrinsic stress was observed for columnar structure obtained in high flow rate, high atomic hydrogen production and so in the highest growth rate condition. The carbon content concentration needs to be very well controlled. Raman Scattering and SEM analysis have been used.

Partially supported by FAPESP and CNPq

\* Convênio de cooperação tecno-científica nº 01.01.121.0/96.

**PRIMEIRAS ETAPAS DE CRESCIMENTO  
DE FILMES DE DIAMANTES  
METASTAVEIS OBTIDOS EM PLASMAS  
EXCITADOS POR MICROONDAS E  
CARACTERISADOS POR XPS E AFM.**

M. J. CINELLI

UFSC/Labmat - Laboratório de Materiais, Brasil  
J. AUBRETON, A. CATHERINOT, I. JAUBERTEAU  
Université de Limoges, France - Equipe "Plasma, Laser,  
Matériaux"

Filmes de depósitos diamantes usando plasma reativos a baixa pressão são atualmente empregados nas mais diversas áreas tecnológicas devido as suas propriedades físico-química excepcionais (alta condutividade térmica, baixo coeficiente de atrito, larga banda de transparência óptica,...). Entretanto, um grande número de aplicações industriais requer um melhor controle da estrutura da interface na qual esta fortemente relacionada com a nucleação, crescimento epitaxial, formação de defeitos e da adesão sobre o substrato. Medidas XPS (X-ray Photoelectron Spectroscopy) associadas à análises AFM (Atomic Force Microscopy) mostram que podem juntas fornecer resultados interessantes no estudo da composição e morfologia das primeiras camadas de crescimento de filmes de diamantes efetuados sobre substrato de silício utilizando-se plasmas microondas (2.45 GHz) em misturas diversas Ar - CH<sub>4</sub> - H<sub>2</sub>. Os parâmetros de deposição com 2% CH<sub>4</sub> na mistura Ar - H<sub>2</sub> e a uma razão de pressões parciais P(H<sub>2</sub>)/P(Ar) da ordem de 2 são otimizados de maneira a produzir uma taxa de formação de radicais CH<sub>x</sub> (x < 3) elevada assim como uma densidade máxima de átomos de hidrogênio que são fundamentais na estabilização das ligações sp<sup>3</sup>. O objetivo final é estudar as primeiras etapas de crescimento de filmes de diamante depositadas sobre uma superfície de silício no qual não houve qualquer tipo de pré-tratamento. Os resultados obtidos mostram que as primeiras camadas construídas sobre a superfície do substrato são compostas essencialmente de SiC, sendo que, em seguida, observa-se um acréscimo do sinal XPS C(1S) 285 eV em função do tempo, o que corresponde a formação do carbono diamante. Por outro lado, a topografia da superfície determinada por AFM mostra que a nucleação, depois de 1 hora, é do tipo hemisférica, apresentando uma taxa da ordem de 1 - 5.10<sup>9</sup> cm<sup>-2</sup>, o que indica superfícies de filmes com baixa rugosidade.

**THE LIMITING STEP IN ACTIVATION  
ENERGY OF CVD-DIAMOND GROWTH**

IVALDO JOSÉ CORAT, VLADIMIR JESUS

TRAVA-AIROLDI

LAS/INPE, FE/USF\*

NEIDENÊI GOMES FERREIRA, NÉLIA FERREIRA

LEITE

LAS/INPE

Recently we presented a broad comparison of most of the literature data on the determination of activation energy for CVD diamond growth. In this comparison we observed that the temperature dependence of CVD diamond growth is very similar for many different reactors and gas systems. It doesn't matter if diamond grows in an arc jet, a microwave plasma or a hot filament reactor, with different gas mixtures containing hydrogen, hydrocarbons, oxygen or halogens, the comparison shows very similar results, indicating a common limiting step. In this paper we will focus only in the 600-900 °C range in which there is a close to Arrhenius behavior, with an apparent activation energy of around 10 kcal/mol. Many authors have attributed this activation energy to the effect of more efficient surface reactions with the addition of halogens or oxygen to the gas phase. However, our comparison shows that this value is also obtained for gas mixtures of only CH<sub>4</sub> and H<sub>2</sub>. Our main conclusion is that the presence of excess atomic hydrogen is sufficient to bring the system to this limiting step. Here we consider a mechanism for diamond growth on a step of a reconstructed (100) surface (due to Warnatz et al.[1]) to show that the most probable limiting step in the activation energy for CVD diamond growth is the CH<sub>3</sub> incorporation reaction, that have an activation energy of 11 kcal/mol. We propose that for high atomic hydrogen concentrations the system becomes independent of radical concentrations and the CH<sub>3</sub> incorporation reaction becomes the ultimate limiting step.

[1] F. Behrendt, O. Deutschmann, B. Ruf and J. Warnatz, J. Vacuum Sci. Technol. A14 (1996) 1604

Partially supported by FAPESP and CNPq \* Convênio de Cooperação Tecno-científica nº 01.01.121.0/96

**SUPERFÍCIES E FILMES FINOS  
(Filmes Finos: Diamante  
e Materiais Super-Duros) -  
12/06/97**

**INVESTIGAÇÃO DAS PROPRIEDADES  
QUÍMICAS E ESTRUTURAIS DE FILMES  
DE CARBONO-GERMÂNIO DEPOSITADOS  
POR SPUTTERING DC MAGNETRON**

LUIZ GUSTAVO JACOBSON, FERNANDO LÁZARO

FREIRE JR

Departamento de Física - PUC-Rio

GINO MARIOTTO

Dipartimento de Fisica - Università di Trento

Filmes de carbono e carbono-germânio (a-GeC) foram depositados em substratos de silício  $\langle 100 \rangle$  por sputtering dc magnetron nas seguintes condições: polarização do alvo = -510 V, polarização do substrato = 0 V e pressão de argônio = 0,36 Pa. De forma a incorporar germânio nos filmes, lâminas de germânio ultra puro foram colocadas sobre o alvo de grafite (pureza de 99,99%). A composição de carbono  $x$  dos filmes foi determinada por técnicas nucleares - RBS e ERDA - a ser entre 0,3 e 0,9. Identificou-se também a presença de contaminação de oxigênio e hidrogênio. A taxa de deposição variou de 0,4 a 2,6 nm/min e a densidade atômica diminuiu de 1,1 a  $0,7 \times 10^{23}$  átomos/cm<sup>3</sup> com a diminuição de  $x$  de 0,9 a 0,3. Difração razante de raios-x, absorção no infra-vermelho e espectroscopia Raman foram usadas para investigar a estrutura do filme. Enquanto nenhuma cristalinidade foi observada pela difração de raios-x, a análise dos espectros Raman sugere um material amorfo composto, uma vez que os modos Ge-Ge transversal acústico ( $\sim 80\text{cm}^{-1}$ ) e transversal óptico ( $\sim 280\text{cm}^{-1}$ ) foram observados junto com duas bandas largas em  $\sim 1350\text{cm}^{-1}$  (banda D) e  $\sim 1560\text{cm}^{-1}$  (banda G) características de filmes de carbono amorfo. Contudo, nenhum pico pode ser atribuído à ligação Ge-C. Os espectros de infra-vermelho indicam a presença de estiramentos C-H<sub>n</sub>, mas nenhum pico pode ser atribuído aos estiramentos Ge-C ou O-H.

#### MÉTODO SISTEMÁTICO DE ARMAZENAMENTO DE DADOS REFERENTES A DEPOSIÇÕES DE DIAMANTE POR CVD

R. B. PIMENTEL, V. P. MAMMANA, M. C. SALVADORI

*Instituto de Física - Universidade de São Paulo*

É comum, no estudo da síntese de materiais, a necessidade de grande número de parâmetros para caracterização satisfatória do processo. Em particular, a síntese de diamantes policristalinos por processo CVD depende essencialmente de seis parâmetros. A abordagem natural seria uma grade de pontos em um espaço n-dimensional (em que n representa o número de parâmetros), de forma que cada ponto indique um experimento cujos valores dos parâmetros seriam suas coordenadas. Este método, entretanto, sugere uma quantidade impraticável de experimentos. Uma solução para o número de experimentos é a aplicação de um método de otimização de parâmetros que permita extrair o máximo de informação de uma quantidade factível de experimentos. Para que tal método possa ser aplicado, fez-se necessária a implementação de uma ferramenta automática de armazenamento dos dados das amostras. Anteriormente utilizavam-se folhas de controle, método pouco eficiente pela falta de padronização em sua utilização, pela dificuldade de acesso às numerosas folhas referentes a experimentos prévios e especialmente pela

dificuldade de validação dos dados. O objetivo deste trabalho foi, portanto, definir um método sistemático de armazenamento dos dados obtidos nos experimentos com síntese de diamante, de modo a tornar viável o emprego de estratégias de otimização dos parâmetros necessários. Para tanto, foram utilizadas ferramentas computacionais para gerenciamento de base de dados. A totalidade do projeto compreende a definição e a construção da base de dados, assim como a geração de aplicativos para a manipulação da mesma. Este trabalho constituiu o primeiro passo, ou seja, a definição de um modelo estático do sistema, o que exige conhecimento detalhado do processo. O prosseguimento do trabalho será o desenvolvimento da base de dados correspondente e do aplicativo responsável pela manipulação da mesma.

#### Caracterização da vida útil de filmes de diamante sobre ferramentas de corte

S. SILVA, M. C. SALVADORI

*Instituto de Física da Universidade de São Paulo - São Paulo*

V. BERNARDO

*Depto. Engenharia Mecânica, Escola Politécnica da  
Universidade de São Paulo*

I. G. BROWN

*Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, CA,  
USA*

O recobrimento de pastilhas de metal duro (WC-Co) com filmes de diamante usando a técnica de deposição química a vapor (CVD-Chemical Vapor Deposition) apresenta problemas na adesão do filme à superfície do metal. Tratamentos da superfície da pastilha para posterior depósito do filme têm sido feitos com a finalidade de melhorar a adesão na interface do composto metálico, aumentando a vida útil do filme depositado. Polimento da superfície da pastilha com pó de diamante e recobrimento com tinta de hidreto de titânio foram alguns dos tratamentos de superfície usados neste trabalho. Torneamento de ligas de alumínio-silício, usando torno com comando numérico computadorizado (CNC), foi o teste de usinagem utilizado para caracterizar a vida útil do filme de diamante sobre pastilhas de metal duro. Foram usadas técnicas de caracterização das ferramentas, tais como: Microanálise para caracterizar os metais presentes na superfície da pastilha, Microscopia de Força Atômica para estudar a rugosidade da superfície da pastilha, Microscopia Eletrônica de Varredura para analisar a morfologia dos filmes de diamante e o padrão de rugosidade da superfície dos cavacos originados dos processos de usinagem. A metodologia desenvolvida para evidenciar a vida útil do filme de diamante sobre as pastilhas de metal duro corresponde ao acompanhamento das alterações nas características do filme de diamante na aresta principal de corte da pastilha durante o trabalho de usinagem, por meio de Microscopia

Óptica e no final do trabalho, por meio de Microscopia Eletrônica de Varredura. O principal aspecto desta metodologia é a medida dos parâmetros de usinagem, uma vez que eles fornecem a base para o cálculo da grandeza que corresponde a vida útil do filme. (Este trabalho foi desenvolvido com apoio da FAPESP).

### Caracterização morfológica dos poros de uma membrana de diamante

V. P. MAMMANA, M. C. SALVADORI

*Instituto de Física da Universidade de São Paulo*

Em um trabalho anterior [1] foi apresentado um método para a obtenção de membranas porosas de diamante partindo de silício como molde. Utilizando litografia do silício com o intuito de formar nele estruturas verticais, em seguida depositando uma camada de diamante CVD sobre o silício gravado, e finalmente isolando o filme do substrato por meios químicos, foi possível obter membranas porosas de diamante isentas de substrato. Os poros destas membranas apresentaram uma não-uniformidade que não pode ser desprezada, mesmo considerando-se a substancial melhora destes resultados de uniformidade com relação a uma tentativa preliminar [2]. A forma dos poros obtidos deveria ser quadrada, seguindo o molde, no entanto observaram-se poros irregulares. Em um segundo trabalho [3] estudou-se uma grande quantidade de poros, com o intuito de determinar a existência de uma relação entre a uniformidade no tamanho dos poros e a forma dos mesmos. Esta relação permitiu identificar os processos responsáveis por esta não uniformidade. O estudo deste grande número de poros só foi possível pelo desenvolvimento de um método automático de caracterização morfológica dos poros. O objetivo do presente trabalho é descrever detalhadamente este método de caracterização. A idéia envolvida é aproveitar as propriedades do centróide de uma figura bidimensional, e então definir um coeficiente que caracterize operações de simetria presentes nesta figura. Neste trabalho desenvolvemos um programa computacional para o cálculo deste coeficiente, o que permitiu determinar de forma automática em que grau os poros presentes na membrana apresentavam a forma de um quadrado. [Este trabalho foi apoiado pela FAPESP] [1] V.P. Mammana, R. Mansano, P. Verdonck, A. Pavani Filho and M.C. Salvadori, submetido ao periódico *Diamond and Relat. Mat.* [2] M.C. Salvadori, Y. Miyao, G. Moscati, *Diamond and Relat. Mat.*, 4 (1995) 1069-1072 [3] V.P. Mammana, M.C. Salvadori, I.G. Brown, ICMCTF 97, San Diego, EUA.

### OXYGEN EFFECTS ON HALOGENATED MIXTURES FOR MWPACVD DIAMOND GROWTH

NEIDENÊI GOMES FERREIRA, EVALDO JOSÉ CORAT, VLADIMIR JESUS TRAVA-AIROLDI, NÉLIA FERREIRA

LEITE

*LAS/INPE*

The effects of  $O_2$  addition on  $H_2/CH_4/Ar$ ,  $H_2/CF_4/Ar$  and  $H_2/CCl_2F_2/Ar$  mixtures have been studied for diamond growth in the Microwave Plasma Assisted Chemical Vapor Deposition (MPACVD) reactor. *In situ* mass spectrometry and plasma emission actinometry technique have been used. Various mixtures with different concentrations of  $CH_4$ ,  $CF_4$  and  $CCl_2F_2$  for addition of 0 to 3%  $O_2$  have been used. The input gases were chosen in order to discern the effects of oxygen in the gas phase reactions. Optical emission spectroscopy was used to observe the additional increase of atomic hydrogen generation when  $O_2$  is added in the feed gas. It was observed the  $H_\alpha$  Balmer line intensity (656 nm) using argon as actinometer. The  $O_2$  addition on  $H_2/CH_4/Ar$  mixtures has shown an increase of atomic hydrogen only when the concentration of methane is higher than the  $O_2$  concentration. For mixtures of  $H_2/CF_4/Ar$  and  $H_2/CCl_2F_2/Ar$  the addition of 3%  $O_2$  promotes an additional increase of around 50% in the atomic hydrogen generation for both cases. Mass spectrometry was used to analyze the stable species in the exhaust gas. The analysis has shown that  $CF_4$  and  $CCl_2F_2$  are completely dissociated in the plasma reactor with a fast conversion into hydrocarbons. The results showed the acetylene as a final product indicating that the same chemical mechanism for halocarbon and hydrocarbon is taking account. The effects of  $O_2$  addition are similar for the three carbon sources used gases with all reaction products showing the same behavior, like  $CO$  and  $H_2O$  concentration increasing and  $CH_4$  and  $C_2H_2$  concentration decreasing. Oxygen decreases the hydrocarbon concentration for high concentrations of halogenated precursor, which permits to produce good quality CVD diamond films due to the high generation of atomic hydrogen.

### CRESCIMENTO DE FILMES DE DIAMANTE-CVD SOBRE LIGA DE TITÂNIO COM A ADIÇÃO DE $CF_4$ NA MISTURA PRECURSORA

TÉOFILO MIGUEL DE SOUZA

*CDT- São José dos Campos, DEMAR-Faenquil,*

*LAS/INPE*

VLADIMIR JESUS TRAVA-AIROLDI, EVALDO JOSÉ CORAT, NÉLIA FERREIRA LEITE

*LAS/INPE*

O uso do titânio e suas ligas está baseado em algumas características principais, entre elas, a alta relação entre a resistência e o peso específico e a excelente resistência

à corrosão. A ótima relação entre a resistência e o peso (aproximadamente oito vezes a do aço) faz com que o titânio e suas ligas sejam uns dos materiais mais utilizados em estrutura de aeronaves, componentes bélicos e aplicações aeroespaciais. A liga *Ti6Al4V*, em particular, é muito utilizada em diversos tipos de próteses devido sua boa biocompatibilidade. Por outro lado, essa liga de titânio apresenta baixa resistência ao desgaste. Assim, a colocação de um filme fino de diamante-CVD sobre a superfície desta liga, pode aumentar sua vida útil para determinadas aplicações. Neste trabalho, os filmes de diamante-CVD foram depositados usando a técnica assistida por filamento quente, utilizando a mistura convencional de metano e hidrogênio, mas adicionando uma pequena quantidade de  $CF_4$ , a fim de observar a aderência entre o filme e o substrato. Os resultados foram comparados com outros anteriormente obtidos utilizando-se apenas a mistura de  $CH_4$  e  $H_2$ . A qualidade e a morfologia dos filmes foram obtidas através da técnica de espectroscopia por espalhamento Raman e da técnica de microscopia eletrônica de varredura. Os testes de aderência foram feitos utilizando a técnica da indentação. O stress total que aparece no filme de diamante foi calculado a partir do deslocamento do pico de espalhamento Raman, tomando-se como referência o pico do diamante natural. Outro parâmetro importante para estudos de aderência e stress é a modificação de superfície do substrato devido às condições de crescimento. Este efeito foi analisado via técnica de EDX. Foi observado que a aderência diminui na presença do  $CF_4$  e seus produtos, devido ao ataque químico seletivo do alumínio e do vanádio da liga. Este efeito é mais pronunciado para temperaturas de crescimento maiores.

#### DIAMOND COATED $Si_3N_4$ TOOL INSERTS

VITOR ALEXANDRE SILVA, COSME ROBERTO M. SILVA

*ITA, Divisão de Materiais, IAE/AMR*

EVALDO JOSÉ CORAT, VLADIMIR JESUS TRAVA-AIROLDI, NÉLIA FERREIRA LEITE  
*LAS/INPE*

Diamond Chemical Vapor Deposition has been extensively studied in past 15 years. For all deposition techniques (hot filament, microwave plasma, DC arc jets, combustion flames, etc.) good results have been obtained in polycrystalline films with different degrees of uniformity and final quality. Diamond film growth with hot filament method have potentially attractive application in cutting tool inserts.

In this work, diamond coated  $Si_3N_4$  with 5%wt  $Y_2O_3$  and 2%wt  $Al_2O_3$  were produced in a hot filament reactor. The substrate temperature was kept in 800 °C for a filament temperature of 2200 °C. The feeding gas in the reactor was a 100 sccm of  $H_2$  with 1.5%vol.  $CH_4$ . The growth time was 3 hours. The surface pretreat-

ment technique consisted in etching silicon nitride ceramics in different gases in the hot filament reactor, we used some mixtures of  $H_2$  and  $CF_4$  to verify the interaction with secondary phases present in the ceramics grain boundaries.

The main objective is to verify the particular interaction among diamond, the  $Si_3N_4$  grains and the glassy secondary phases. The surface glassy phases are heavily attacked by the diamond growth environment, probably creating diamond nucleation sites in the process. Further surface studies are in progress to identify the interaction with the  $Si_3N_4$  grains. The good adherence between diamond and this ceramics imply in a well formed interface, in which a  $SiC$  layer may play a significant role.

The films have been analyzed by scanning electron microscopy, x-ray diffraction and Raman spectroscopy to verify its quality, morphology and thickness.

#### Estudo da superfície de filmes de diamante por meio de AFM.

M. A. G. SILVEIRA, M. C. SALVADORI, N. F. FERRARA, M. CATTANI  
*Instituto de Física da USP-SP*

O AFM ( Microscópio de Força Atômica ) é um novo instrumento utilizado para o estudo da topografia da superfície de materiais, sendo possível obter medidas para rugosidade rms ( root-mean-square ) e fractalidade da superfície. A geometria fractal é caracterizada por complexidades apresentando uma dimensão fractal (  $D_f$  ) que excede a dimensão topológica variando com a rugosidade da superfície do material. Utilizou-se diamante depositado em substrato de silício (111) por meio de CVD em plasma de metano e hidrogênio. Foram realizadas medidas de rugosidade para uma mesma amostra variando a ampliação da imagem feita pelo AFM, e também de amostras depositadas sob diferentes concentrações de metano. Pretende-se obter a  $D_f$  utilizando o método de lagos ( ilhas ), a qual baseia-se no fato de que a intersecção de um plano com uma superfície auto-afim gera lagos auto-similares, valendo a relação  $L(\nu) = CA^{D'/2}$  e  $D_f = D' + 1$ , onde L: perímetro do lago;  $\nu$ : escala de medida; A: área do lago;  $D'/2$ : inclinação obtida pelo gráfico de Log L por Log A para diferentes valores de  $\nu$ . Um outro procedimento seria o de um método iterativo de triangulações por meio de um gráfico logarítmico da área da superfície pela área dos triângulos. Dessa forma, procura-se uma caracterização da complexidade ( rugosidade ) da superfície mantendo sempre os mesmos parâmetros de análise dos gráficos, para uma cabível comparação entre as diferentes amostras. Também será feita Espectroscopia Raman obtendo uma correlação entre a rugosidade do filme de diamante e sua pureza. ( Este trabalho foi desenvolvido com o apoio da FAPESP )

**INCONSTANCY OF RATE OF DIAMOND  
CRYSTALLITES GROWTH AND  
RETARDED NUCLEATION IN THE  
PROCESS OF HOT FILAMENT CVD**

ALFREDO CARLOS PETERLEVITZ, GREGORY  
SURDUTOVICH, VITOR BARANAUSKAS

*DSIF, Faculty of Electrical Engineering and Computation  
- UNICAMP*

MARCO PALLINI, NELSON NUNES

*Robert Bosch Limitada*

The microstructure of polycrystalline chemical vapor deposited (CVD) diamond films consists of grains of different sizes and orientations. We investigate the growth rate of the diamond polycrystals at the initial stage of the process when the average distance between microcrystals is larger than their sizes, so they grow independently. We prepared 12 identical slightly and homogeneously scratched  $Si < 100 >$  substrates which were utilized for the CVD process at the identical conditions (the filament temperature was about  $2200^{\circ}C$ , chamber pressure of 20 Torr, the gas mixture, hydrogen and

ethanol, flow rate was 100 sccm), the time of growth changed from 40 to 200 min. The following main features were observed: (i) the rate of the crystallites sizes growth is not constant and varies from  $1.5\mu m/hour$  at the initial stage to  $4\mu m/hour$  for the final stage, (ii) the striking effect of a retarded nucleation when, after about 1 hour, emerges a "second wave" (group) of nuclei: This manifests itself in form of "two peaks" distribution function of the crystalline sizes, (iii) at larger times,  $> 2.5$  hours, the retarded group of nuclei comes up the first one and the distribution function becomes "one-peaked" again, (iv) during the growth the variance of the distribution function changes more than fivefold - from 0.1, for small times, to 0.5 and then again to  $< 0.1$  at the final stage. For larger times the effect of the crystallites overlapping becomes predominant and the model of the independent growth of crystals cannot be applied anymore. These results are important for understanding the mechanisms of the CVD diamond growth.

## SUPERFÍCIES E FILMES FINOS (Superfícies: Espectroscopia)

### SUPERFÍCIES E FILMES FINOS (Superfícies: Espectroscopia) – 12/06/97

#### CARACTERIZAÇÃO DA SUPERFÍCIE DE UMA LIGA QUATERNÁRIA DE ALUMÍNIO PELA ESPECTROSCOPIA DE FOTOELÉTRONS EXCITADOS POR RAIOS-X

PEDRO A. P. NASCENTE, SÉRGIO L. DOS SANTOS, MARILIA G. P. KURI, CLEVER R. CHINAGLIA, ODNEY C. BRONDINO, ANDRÉ ITMAN FILHO, CLAUDIO S. KIMINAMI, CLAUDEMIRO BOLFARINI  
*Universidade Federal de São Carlos, Departamento de Engenharia de Materiais, Centro de Caracterização e Desenvolvimento de Materiais*

A superfície de uma liga de alumínio contendo adições de lítio, cobre e magnésio foi caracterizada pela espectroscopia de fotoelétrons excitados por raios-X (XPS). Esta liga, que tem aplicações na indústria aeronáutica, foi fabricada pelo processo de fundição de precisão em um forno de indução sob atmosfera de argônio. Empregamos XPS para identificar o estado de oxidação e a razão atômica dos elementos presentes na superfície da liga Al-Cu-Li-Mg (1,5% Li, 1,5% Cu e 0,9% Mg, % em peso). Em XPS um feixe de raios-X moles é usado para excitar os elétrons da amostra. Estes fotoelétrons, que têm energias cinéticas menores que 1,5 keV, possuem livres caminhos médios de 5 a 30 Å. Os fotoelétrons possuem uma distribuição de energia cinética que consiste de picos discretos, associados às camadas eletrônicas do átomo fotoionizado. A identificação dos elementos presentes na superfície é feita diretamente pela determinação das energias de ligação dos fotoelétrons de caroço. A intensidade (área integrada do pico fotoelétrico) é proporcional ao número de átomos no volume detectado, permitindo, portanto, obter-se informações sobre a composição da superfície. A posição exata de um pico fotoelétrico indica o estado químico do átomo emissor. As energias de ligação dos níveis de caroço são suficientemente afetadas pelo seu ambiente químico que sofrem um deslocamento de 0,1 a 10 eV para diferentes estados de oxidação. Medimos, usando como fonte excitadora a radiação K $\alpha$  de Al ( $h\nu = 1486,6$  eV, potência dada por 15 kV e 10 mA), as linhas fotoelétricas Al 2p, Mg 1s, Li 1s e O 1s. Além de alumínio metálico, identificamos a presença de Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Li<sub>2</sub>O, Li<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, Cu<sub>2</sub>O, MgO e Mg(OH)<sub>2</sub>. A análise quantitativa indica que há enriquecimento superficial de lítio.

#### CÁLCULO DOS ESPECTROS DE ABSORÇÃO DE RAIOS-X MOLES Mn 2p E O 1s DE CaMnO<sub>2.50</sub> E CaMnO<sub>3.00</sub>

M. ABBATE  
*Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, CNPq*  
G. ZAMPIERI  
*Centro Atômico Bariloche, CNEA*

Nos calculamos os espectros de absorção de raios-x moles (XAS) Mn 2p e O 1s de CaMnO<sub>2.50</sub> e CaMnO<sub>3.00</sub>. O composto CaMnO<sub>2.50</sub> tem íons Mn<sup>3+</sup> (3d<sup>4</sup>) enquanto o composto CaMnO<sub>3.00</sub> tem íons Mn<sup>4+</sup> (3d<sup>3</sup>). Os espectros Mn 2p XAS foram calculados projetando o multipletto atômico no campo cristalino correspondente. A forma do multipletto nos espectros está relacionada diretamente com a simetria do estado fundamental. O espectro do composto CaMnO<sub>2.50</sub> foi calculado usando uma configuração eletrônica  $t_{2g}^3 e_g$  (<sup>5</sup>E). O espectro do composto CaMnO<sub>3.00</sub> foi calculado usando uma configuração eletrônica  $t_{2g}^3$  (<sup>4</sup>A<sub>2</sub>). Os parâmetros do campo cristalino 10Dq usados no cálculo foram 1.8 e 2.1 eV, respectivamente. Os espectros O 1s XAS foram calculados usando um modelo de cluster que inclui processos de transferência de carga. Os parâmetros usados no modelo são: (a) a energia de repulsão entre os elétrons U, (b) a energia de transferência de carga  $\Delta$ , e (c) a mistura covalente entre configurações. Os espectros refletem, através da mistura covalente, os estados eletrônicos desocupados na banda de condução. Os espectros correspondem basicamente a transições a estados que tem simetria  $t_{2g}$  e  $e_g$ . Estas transições estão desdobradas pela interação de intercâmbio (J) e pelo campo cristalino (10Dq). O valor de J usado nos cálculos foi 0.8 eV tanto para CaMnO<sub>2.66</sub> quanto para CaMnO<sub>3.00</sub>, enquanto os valores de 10Dq usados foram 1.8 e 2.1 eV, respectivamente. Os cálculos teóricos estão em bom acordo com os espectros experimentais dos compostos CaMnO<sub>2.66</sub> e CaMnO<sub>3.00</sub>. Os dados obtidos mostram que os buracos eletrônicos induzidos em CaMnO<sub>3.00</sub> são uma mistura covalente de estados Mn 3d e O 2p. Estes resultados são similares aos obtidos na série de compostos La<sub>1-x</sub>Sr<sub>x</sub>MnO<sub>3</sub>, onde os buracos eletrônicos são induzidos pela substituição de La por Sr.

#### ESTADOS DE SUPERFÍCIE EM METAIS NOBRES: UMA SONDA PARA SE INVESTIGAR A SUPERFÍCIE

R. PANIAGO  
*Departamento de Física - UFMG*  
R. MATZDORF, A. GOLDMANN  
*Fachbereich Physik, Universität Kassel, Germany*

Na superfície dos sólidos a quebra da periodicidade cristalina leva muitas vezes à criação de *estados de superfície* e *ressonâncias de superfície*, que não estão presentes no "Bulk". Estados de Superfície (tipo "Shockley" e "Tamm") em  $Cu(111)$ ,  $Ag(111)$ ,  $Au(111)$ ,  $Cu(100)$ ,  $Cu_3Au(100)$  e Ressonâncias de Superfície em  $Au(111)$  são investigados através de Espectroscopia de Fotoelétrons com Resolução Angular Excitados por Luz Ultravioleta (ARUPS). Os experimentos foram realizados utilizando um sistema ESCA 100 (Vacuum Science Workshop Ltd.) modificado e com uma lâmpada de UPS de fabricação caseira. Trabalhamos sempre que possível com resolução angular  $\Delta\theta=0.9^\circ$  e energética  $\Delta E=18\text{meV}$ . Atenção especial é dada para a influência da resolução energética e angular na análise dos espectros, assim como da temperatura da amostra. A interação elétron-phonon determina a variação das larguras de linha com a temperatura. Discutiremos até que ponto, tempos de vida do buraco (criado no processo de fotoemissão) podem ser determinados através das larguras de linha em espectros obtidos a baixas temperaturas. Demonstraremos como o formato de linha e a energia de ligação destes estados de superfície podem ser influenciados por "mudanças" na superfície, como adsorbatos na superfície (fisicamente adsorvidos p. ex.), relaxação de superfície (induzida termicamente p. ex.), etc. Mostraremos em suma que, já que estes estados são localizados na interface cristal-vácuo, eles são extremamente sensíveis a mudanças na superfície e servem portanto como uma *sonda* para o estudo de interações nesta interface. Em alguns casos estes estados podem ser utilizados para se monitorar o crescimento de filmes ultrafinos em condições de crescimento epitaxial como será demonstrado.

#### Estudo da face (0001) do $Bi_2Se_3$ por XPS, Auger e ELS.

V. B. NASCIMENTO, V. E. DE CARVALHO, L. O. LADEIRA, R. M. PANIAGO, H. -D. PFANNES  
UFMG

Os cristais dos compostos  $V_2VI_3$  apresentam uma ampla importância tecnológica, sendo muito utilizados na fabricação de dispositivos termoelétricos e de detectores de radiação infravermelha. Os fenômenos de transporte nos cristais  $V_2VI_3$  e suas soluções sólidas têm sido intensamente estudados nos últimos anos, visando aplicações na área do resfriamento termoelétrico. Trabalhos recentes estudam a inserção de metais entre os blocos constituintes destes cristais, visando sua utilização como catodo de intercalação em pilhas elétricas do estado sólido. O cristal de Seleneto de Bismuto pertence ao grupo de simetria  $D_5^3 - R\bar{3}m$ , apresentando uma estrutura romboédrica do tipo *hcp*. Este cristal é composto por camadas alternadas de Bi e Se na sequência [Se-Bi-Se-Bi-Se], sendo que cada grupo de cinco camadas nesta sequência forma um bloco, o

qual se liga a outros blocos semelhantes por uma fraca interação do tipo van der Waals. Apesar da existência de um razoável número de trabalhos sobre as propriedades volumétricas do  $Bi_2Se_3$ , não existe nenhum estudo relacionado às suas faces cristalinas, dentre as quais se destaca a face (0001), perpendicular ao eixo trigonal  $c$  e correspondente ao topo de um dos blocos periódicos constituintes do cristal. Neste trabalho, um estudo da face (0001) do  $Bi_2Se_3$  através das espectroscopias de elétrons Auger, de Fotoemissão e de Perda de Energia é apresentado. Os desvios químicos nas transições características Auger e de Fotoemissão dos elementos Bismuto e Selênio, ocasionados pelas ligações  $Bi-Se$  são determinados, assim como as frequências características de plasmons de volume e de superfície.

#### ESTUDO DA INTERFACE $CaF_2/Si(111)$ POR ESPECTROSCOPIA DE FOTOELÉTRONS

MAXIMILIANO D. MARTINS

Laboratório de Física Aplicada - CDTN/CNEN

PEDRO L. GASTELOIS, WALDEMAR A. A. MACEDO

Laboratório de Física Aplicada - CDTN/CNEN

NEY MATTOSO, DANTE H. MOSCA, WIDO H.

SCHREINER, IRINEU MAZZARO

UFPR

SERGIO R. TEIXEIRA

UFRGS

O crescimento epitaxial de filmes de  $CaF_2$  sobre  $Si$  tem atraído considerável atenção nos últimos anos devido a seu grande potencial na fabricação de dispositivos eletrônicos e opto-eletrônicos. O  $CaF_2$  é utilizado como camada epitaxial isolante em heteroestruturas semicondutoras principalmente devido ao pequeno desvio entre os parâmetros de rede e a similaridade nas estruturas deste composto comparado ao  $Si$ . Um grande esforço tem sido desempenhado para a compreensão da *inter-relação entre estrutura e parâmetros de obtenção do filme*. Sabe-se que existe uma profunda relação entre a temperatura do substrato durante o crescimento e a estrutura resultante. Filmes de  $CaF_2$  crescem epitaxialmente sobre  $Si(111)$  em duas estruturas distintas. Na epitaxia tipo A o filme cresce com a mesma orientação do substrato, enquanto que na epitaxia do tipo B há uma rotação de  $180^\circ$  do filme em torno da direção normal à superfície, eixo  $\langle 111 \rangle$ . Investigamos aqui, por espectroscopia de fotoelétrons (XPS), a influência de um tratamento térmico rápido (RTA) a  $1000^\circ\text{C}$ , durante 1 min., utilizando lâmpada halogênea, na composição da interface  $CaF_2/Si$ , uma vez que tal RTA provoca uma mudança estrutural do filme de  $CaF_2$ , de policristalino orientado para monocristalino com epitaxia tipo B. Foram analisados dois filmes de  $CaF_2$  depositados sobre  $Si(111)$  a  $300^\circ\text{C}$ , com espessuras de 400 Å. Um dos filmes foi submetido ao RTA imediatamente após a deposição. As medidas foram realizadas em um sistema de UHV com pressão de base de  $2.10^{-10}$  mbar,

equipado com um analisador CLAM2, utilizando radiação de 1253.6 eV (Mg  $K\alpha$ ) e energia de passagem de 20 eV. Os perfis em profundidade foram obtidos usando íons de Ar de 1750 eV, e medidos até o total desaparecimento do sinal de Ca. Nossos resultados de XPS mostram que ambos os filmes apresentam praticamente a mesma interface CaF<sub>2</sub>-Si, com uma pequena fração de ligações Ca-Si, sugerindo que a mudança estrutural observada para o CaF<sub>2</sub> com a aplicação do RTA não se deve à presença de uma camada reagida Ca-Si, mas sim a algum processo termicamente ativado, a ser investigado.

### EVIDENCE OF SHAKE-UP SATELLITES IN HIGH ENERGY AUGER SPECTRA OF THE 4d METALS

RICHARD LANDERS, ABNER DE SIERVO, GEORGE G. KLEIMAN

*IFGW, Universidade Estadual de Campinas, 13081-970  
Campinas, SP, Brazil.*

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 Coster-Kronig (CK) transitions, requiring considerable experimental investigation before clarifying the relative roles of shake-up and CK processes. The  $L_{2,3}M_{4,5}M_{4,5}$  spectra of Ag, Pd and Rh excited by bremsstrahlung also have satellite features and manifest experimental systematics consistent with no contribution from CK processes [1]. In this case, the CK processes would have to involve the  $L_1$  level. Such a result, however, is not completely consistent with theoretical predictions, which emphasize the role of CK transitions. A direct determination of the role of CK processes is necessary, therefore, to resolve this issue. One possibility would be to measure the  $L_1M_{4,5}M_{4,5}$  spectrum directly: were CK processes to be dominant, the spectrum would manifest no satellite. Direct measurement is difficult with conventional sources, however, because of the transition's low intensity. We report measurements of this spectrum using a Ti anode and demonstrate the presence of a satellite, supporting the interpretation of these satellites as almost purely shake-up in nature. We demonstrate that the relative positions of these satellites are described by the complete screening model. References:

[1] High Energy Auger Satellites of the 4D Transition Metals, R. Landers, G.G. Kleiman and S.G.C. de Castro, *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, 72(1995)211

### First Measurement of "Spectator Vacancy" Satellites in the 4d Metals

GEORGE G. KLEIMAN, ABNER DE SIERVO, RICHARD LANDERS

*IFGW, Universidade Estadual de Campinas, 13083-970  
Campinas, SP, Brazil*

X-Ray Photoelectron Spectroscopy (XPS) is often used to determine the electronic structure of the ground state of substances. One of the promises of this technique which has not been as extensively explored, in general, is that of investigating the electronic structure of excited states, usually by measurement of satellites of the principal XPS line. One system which is fairly well understood is that of the 3d metals, where, using conventional X-ray sources, it is possible to measure satellites of a large number of core level spectra, from the 2p to the 3d, and to interpret all of them in terms of spectator vacancies in the 3d valence band formed upon initial photo excitation. In the 4d metal series, the deeper core levels are inaccessible to conventional sources, preventing such a systematic verification of the model as in the case of the 3d metals. We report the results of a study of these metals (Nb, Mo, Ru, Rh, Pd, Ag, In, Sn and Sb) using a Ti anode and demonstrate, for the first time, the satellite spectra for the 2p core transitions. Consistency with the spectator vacancy model is discussed within the context of the complete screening model, which has successfully explained a large variety of spectroscopic phenomena [1]. [1] High-Resolution Auger Spectroscopy Applied to Metals and Alloys, G.G. Kleiman, *Physica Status Solidi (b)*, 192 (1995) 503.

### MÉTODO DE TEMPO-DE-VÔO COM DUPLA REGIÃO DE ACELERAÇÃO NO ESTUDO DO MECANISMO DE EMISSÃO DE ÍONS SECUNDÁRIOS

J. A. M. PEREIRA, C. S. C. CASTRO, E. F. DA SILVEIRA  
PUC-Rio

A determinação da forma da distribuição de energia cinética inicial de íons emitidos, em consequência da excitação de um sólido por um projétil energético, é decisiva para o entendimento do mecanismo pelo qual essa emissão ocorre. Um espectrômetro capaz de fornecer esta informação foi acoplado ao acelerador Van de Graaff da PUC-Rio possibilitando o estudo dessa distribuição em função da energia, estado de carga e estrutura do projétil. A técnica é baseada na espectrometria por medida de tempo-de-vôo. Íons produzidos pelo impacto de um dado projétil são acelerados em duas etapas por dois campos elétricos uniformes. Na primeira o campo é fraco permitindo que íons de mesma massa lançados com energia cinética diferentes se distanciem em tempo. Na etapa seguinte, o segundo campo possibilita o íon atingir uma energia cinética apropriada (~keV) para sua detecção. O resultado final da medida é uma distribuição de tempo-de-vôo. A distribuição de energia cinética inicial é calculada a partir dessa medida de tempo e do conhecimento das dimensões do espectrômetro e das tensões aplicadas. Esse

tempo-de-vôo relaciona-se apenas com a componente da velocidade paralela ao campo elétrico portanto a distribuição de energia refere-se à distribuição de energia axial. Exemplos da aplicação dessa técnica ao estudo dos mecanismos de emissão de íons secundários são a quantificação dos processos de sputtering nuclear e eletrônico no caso de uma amostra de LiF e a modelagem da emissão de  $H^+$ ,  $H^-$ .

Os autores manifestam seu agradecimento ao Prof. Karl Wien.

## SUPERFÍCIES E FILMES FINOS (Superfícies: Espectroscopia) - 12/06/97

### Determinação direta das larguras de linha dos níveis 2p para os metais da série Nb-Sb usando XPS.

A. DE SIERVO, R. LANDERS, G. G. KLEIMAN, S. G. C. DE CASTRO

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

O estudo da largura natural de linha é fundamental para a compreensão de muitos fenômenos envolvidos nos processos de fotoemissão de elétrons de um sólido ou na forma de linha de um pico Auger. Neste trabalho apresentamos a largura e forma das linhas 2s e 2p para os metais do 5º período entre Nióbio e Antimônio, obtidos por Espectroscopia de Fotoelétrons Excitados por Raio-X (XPS), utilizando radiação  $K_{\alpha 1,2}$  do Ti (4510.9 eV e 4504.9 eV). Em uma experiência XPS as linhas naturais se apresentam convoluídas com a forma de linha da radiação utilizada e a função resposta do analisador de elétrons. No caso da radiação  $K_{\alpha}$  do Ti foi necessário criar um algoritmo para separar as contribuições das linhas  $K_{\alpha 1}$  e  $K_{\alpha 2}$  que também apresentamos aqui. Para extrair as larguras naturais das linhas 2s e 2p, ajustamos os espectros obtidos depois da separação das duas contribuições, com uma função Voigt; esta corresponde à convolução de uma gaussiana com uma lorentziana. A parte gaussiana corresponde a função máquina do espectrômetro e a lorentziana à largura da linha natural adicionada à largura da linha de Raio-X. Os valores obtidos para as larguras  $2p_{1/2}$  e  $2p_{3/2}$  indicam um crescimento contínuo entre Nb e Ag (1,5 eV até 2,25 eV para a linha  $2p_{3/2}$ ) e uma quase constância entre In e Sb (em torno de 2,5 eV). Comparamos estes resultados com cálculos da teoria atômica e com determinações experimentais obtidas por métodos indiretos, verificando que eles concordam satisfatoriamente. Os espectros obtidos também permitirão um estudo mais detalhado de estruturas secundárias, como satélites de shake up, pi-

cos de perdas, etc.

### TUNNELLING SPECTROSCOPY OF TRANSITION METAL OXIDES

GASTÓN E. TUDURY, ERNESTO J. CALVO  
*Universidad de Buenos Aires (U.B.A.), Argentina*

In this work we have analyzed the topography and the electronic characteristics of transition metal oxides ( $Fe_3O_4$ ,  $LaNiO_3$ ,  $La_2NiO_4$ ) that shows electronic states within a wide band gap (8eV) formed by the  $Fe_{4s}$  and  $O_{2p}$  levels for magnetite and the  $Ni_{4s}$  and  $O_{2p}$  levels for lanthane oxides. We have used a Park Instrument Autoprobe CP SPM (Scanning Probe Microscope), to study the sample's topography and the influence of the atmosphere (air) on the surface.

The spectroscopic results allowed us to classify the samples studied and to compare them with other materials, like polycrystalline CdS (Cadmium Sulfide) - a n-type semiconductor - Au (Gold) evaporated over a quartz crystal and the semimetal HOPG (Highly Oriented Pyrolytic Graphite). We used them to classify the characteristics of the total conductivity  $\sigma_t$ , or the normalized differential conductivity  $\sigma_d$ , with other methods reported in the literature. Our measurements showed results which the today's accepted theory (V. Ukraintsev, *Phy. Rev. B*, vol. 53, No. 16, 11176-11185 (1995) predicted to be not observable.

The different behavior of the conductivities of synthetic and geological samples made it possible to classify the different samples of magnetite. Furthermore, the comparison (for  $LaNiO_3$ ) between the Tunneling Spectroscopy (TS) and X-rays Photoemission Spectroscopy (XPS) and Bremsstrahlung Isochromat (BI), i.e., Inverse Photoemission, measurements shows that TS is as rich as XPS and BI, but with the additional advantages that the analysis could be local (100nm<sup>2</sup>), with better definition in energies and with one unique scale (photoemission and inverse photoemission are realized with different equipment's, therefore, the results have not the same scale).

### Compósito Polímero - Óxido de Tungstênio Analisado por XPS

UBIRAJARA RODRIGUES-FILHO

*Universidade Federal de Santa Catarina, Departamento de Química.*

RICHARD LANDERS, GEORGE G. KLEIMAN, SANDRA C. DE CASTRO

*Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin".*

Materiais compostos do tipo óxido-polímero têm grande interesse tecnológico por unirem as propriedades mecânicas do polímero às propriedades catalíticas dos óxidos.

A técnica XPS (X-Ray Photoelectron Spectroscopy) foi usada na caracterização de compostos de acetato de celulose e óxido de tungstênio com propriedades eletrocromicas.

Estudos anteriores [1] sobre materiais semelhantes, sugeriram a possibilidade de haver uma distribuição não uniforme, em profundidade, do óxido sobre o polímero. Com o objetivo de investigar a dispersão de  $WO_3$  sobre o acetato, nas análises XPS variou-se o ângulo entre a superfície da amostra e o eixo do analisador de modo a alterar a profundidade de escape dos fotoelétrons e, assim, observar diferentes regiões do material.

Foram observadas várias espécies quimicamente distintas de carbono, isto é, as ligações  $C-H$ ,  $C-O-H$ ,  $C-O-C$ ,  $O-C=O$  e  $O-C-O$  têm energias de ligação ligeiramente diferentes. A linha de O1s é assimétrica, sendo composta por dois picos: um correspondendo ao oxigênio da celulose [2] e outro, de menor energia de ligação, associado ao metal. A mudança na relação entre as áreas desses dois picos, como função da profundidade, é uma medida da distribuição do óxido sobre o acetato.

A possibilidade de uma redução parcial de W(VI) a W(IV) é discutida.

Referências:

[1] U. Rodrigues-Filho, Y. Gushikem, M.C. Gonçalves.

Chem. Mater. 8, 1375-1379 (1996).

[2] A. Dilks

Characterization of Polymers by ESCA, *Developments in Polymer Characterization*

J.V. Dawkins, ed.

Applied Science Publisher Ltd., London, vol.21, 145-182 (1980).

### COMISSONAMENTO DA LINHA DE LUZ DE ESPECTROSCOPIA DE RAIOS-X MOLES DO LNLS.

FLÁVIO CÉSAR VICENTIN, MILTON ROCHA, VALÈRIE CAIHOL, CARLOS GILES, HÉLIO CÉSAR NOGUEIRA TOLENTINO, MIGUEL ABATTE

Laboratório Nacional de Luz Síncrotron

Apresentamos a linha de luz construída e montada no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS) para a faixa de energia de raios-X moles (780 - 4000 eV). O feixe síncrotron é proveniente de um ímã dipolar e ilumina o primeiro elemento ótico da linha, um espelho toroidal com cobertura de ouro e raios de curvatura fixos. Este espelho tem a finalidade de focalizar horizontal e verticalmente o feixe na posição da amostra. O comprimento de onda desejado é selecionado por um monocromador de duplo cristal que mantém fixa a posição do feixe de saída. Para cobrir a faixa de energia proposta pela linha são usados três pares de cristais: berilo 1010 (780 - 1700 eV), InSb 111 (1700 - 4000 eV) que é importante para varrer as bordas do silício e Si

111 (2000 - 4000 eV). Também faz parte da linha fendas, monitores de posição e intensidade do feixe e uma câmara de análise e preparação de amostras, onde temos as seguintes facilidades: manipulador de amostras, analisador de elétrons hemisférico, LEED, sistema de evaporação de filmes finos e de bombardeamento com feixe de íons para limpeza de amostras, detectores (channeltron e fotodiodo) e criostato. A linha foi montada e alinhada e está sob uma pressão de  $10^{-9}$  mbar, sendo que a câmara de amostras trabalhará a uma pressão de base de  $10^{-10}$  mbar. A seguir, colocamos o espelho na posição e ângulo de incidência corretos, a fim de obter-se o foco sobre a amostra. Posteriormente, alinhamos os cristais do monocromador e procedemos à caracterização quanto ao tamanho do feixe, calibração e resolução em energia do monocromador e fluxo de fótons disponível.

### ESPECTRO DE FOTOELÉTRONS DE $V_2O_5$ DOPADO COM LÍTIU.

ALEXANDRA MOCELLIN

UNICAMP

MIGUEL ABATTE

LNLS-CNPq

Nós estudamos os espectros de fotoelétrons do nível V 2p do composto  $V_2O_5$  dopado com Li. Nós medimos os espectros de amostras de  $Li_xV_2O_5$  dopadas com diferentes concentrações de lítio na faixa  $0 \leq x \leq 1$ . O objetivo principal deste trabalho foi estudar os diversos processos de transferência de carga em compostos de metais de transição. Os espectros destes compostos apresentam um pico principal e picos satélites a maiores energias de ligação. O desdobramento destes picos é causado pelo processo de blindagem do potencial criado pelo buraco interno. O pico principal corresponde ao buraco interno bem blindado, enquanto os picos satélites correspondem ao buraco interno mal blindado. A blindagem do potencial criado pelo buraco interno pode ser devido a diversos tipos de transferência de carga. No composto de referência,  $V_2O_5$ , o processo de transferência de carga dominante é do tipo intra-cluster. Neste caso, a blindagem do potencial é devido a um processo de transferência de carga direto oxigênio-vanádio. Já no composto dopado,  $Li_xV_2O_5$ , existe ainda o processo de transferência de carga do tipo inter-cluster. Neste caso, a blindagem do potencial pode também ser devido a um processo de transferência de carga indireto metal-metal. Nos mostramos que a importância relativa dos processos inter-cluster no composto  $Li_xV_2O_5$  aumenta com a dopagem. Os espectros experimentais foram analisados usando um modelo multi-cluster que inclui processos de transferência de carga. Os principais parâmetros do modelo são: (a)

a energia de repulsão entre os elétrons  $3d$  do vanádio  $U$ , (b) a energia de transferência de carga do oxigênio ao vanádio  $\Delta$ , e (c) a mistura covalente entre as distintas configurações eletrônicas  $T$ . Os cálculos teóricos repro-

duzem razoavelmente bem as mudanças observadas nos espectros experimentais.

---

## SUPERFÍCIES E FILMES FINOS (Filmes Finos: Produção e Caracterização)

### SUPERFÍCIES E FILMES FINOS (Filmes Finos: Produção e Caracterização) – 11/06/97

#### A SIMPLE POLARIZATION REFLECTOMETRY METHOD FOR CONTROL OF FILM'S HOMOGENEITY "IN SITU"

RITTA VITLINA, GREGORY SURDUTOVICH, VITOR BARANAUSKAS  
UNICAMP

Besides the standard problem of the determination of the refractive index and thickness of a thin isotropic film on the known isotropic substrate there sometimes arises a more limited problem of monitoring the homogeneity (constancy of the refractive index) of a film during the growth process "in situ". For this case we derive quadratic equation on the dielectric permittivity of the film, which depends on the sole experimentally measured parameter - ratio of the Brewster angle shift and change of the normal reflectance of a sample due to the presence of the film. In dependence of the monitoring parameter's value this equation has one or two solutions. The problem of choosing between them usually can be solved on a physical basis. It is important that the measured parameter does not depend on film's thickness. Practically it means that we may use this approach starting from a thickness of several monolayers when film's dielectric permittivity already formed. The constancy of the monitoring parameter in course of the growth guarantees the optical homogeneity of the film. Under special relation between the dielectric permittivities of a film and substrate a sensitivity of the method becomes poor, since large variations of the refractive index weakly influence the experimentally measured parameter. This unfavourable region of the parameters occurred to be very narrow, so the method may be applied in a great majority of the cases. Some numerical examples are given. Due to its simplicity this method may be useful for the practical applications. It may be used also for the growth of inhomogeneous films with a given profile of the refractive index.

#### ELETRODEPOSIÇÃO DE LIGAS HETEROGÊNEAS Co-Fe-Cu

RENÊ CHAGAS DA SILVA, EDSON MASSAYUKI KAKUNO, NEY MATTOSO, WIDO HERWIG SCHREINER, DANTE HOMERO MOSCA  
Laboratório de Materiais - Departamento de Física -

UFPR

SÉRGIO RIBEIRO TEIXEIRA

Laboratório de Filmes Finos - Instituto de Física - UFRGS

Ligas de composição heterogênea Co-Fe-Cu foram produzidas pelo método eletroquímico potencioestático a partir de solução única contendo todos os íons de interesse sobre filmes finos de Cu evaporados sobre wafers comerciais de Si(111). As soluções usadas foram preparadas a partir de reagentes químicos P.A. (sulfato de cobre, sulfato de Co e sulfato amoniacal de Fe) imediatamente antes de cada experimento pela dissolução das quantidades requeridas dos sulfatos metálicos em água destilada. Utilizou-se soluções com concentração total de íons 1M/litro:  $(Co_{0,9}Fe_{0,1})_{1-x}Cu_x$ , onde  $x = 0,1; 0,2; 0,3; 0,4$  M. Acrescentou-se ainda 0.5 M de ácido bórico. Todos os depósitos foram realizados em potencial catódico de -1,2 V em relação a um eletrodo de referência de Ag/AgCl saturado. A análise por SEM e EDS revelou uma morfologia granular com composição química heterogênea nos depósitos. Análise por EDS mostra que a incorporação de Cu nos depósitos cresce exponencialmente com a concentração parcial de Cu na solução. No entanto, verifica-se que a proporção atômica Co : Fe mantém-se praticamente inalterada na razão 87 : 13 em todas as ligas eletrodepositadas. Análise por TEM com difração de elétrons em área selecionada revela uma estrutura cristalina de caráter policristalino fracamente texturizada com coexistência das fases cúbica de face centrada e hexagonal compacta. A análise dos ciclos de histerese das multicamadas mostra que a magnetização encontra-se preferencialmente no plano das camadas. Além disso, o aumento da concentração parcial de Cu na solução ( $x = 0$  à 0,4 M) conduz a uma sistemática alteração do comportamento ferromagnético para o paramagnético nos ciclos de histerese. Medidas de magnetoresistência realizadas à temperatura ambiente mostram efeitos magnetoresistivos superiores a um por cento em amostras submetidas à campos magnéticos de no máximo 7 kOe.

#### Estabilidade Térmica de Filmes Amorfos de Carbono-Nitrogênio Depositados por "rf Magnetron Sputtering"

MÔNICA DE MESQUITA LACERDA, FERNANDO LÁZARO FREIRE JR

Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

Filmes Amorfos de Carbono-Nitrogênio foram depositados em substratos de Si (100) utilizando-se a técnica de "rf Magnetron Sputtering". Após a deposição, as

amostras foram tratadas termicamente em vácuo ( $P = 10^{-4} Pa$ ) a temperaturas de  $300^{\circ}C - 800^{\circ}C$  durante 30 minutos. As análises dos filmes foram realizadas por meio de técnicas nucleares (RBS, ERDA e Reação Nuclear (RN)), e através de espectroscopias de IR e Raman. Para filmes tratados termicamente os resultados obtidos com RBS e RN mostram a saída de nitrogênio a temperaturas superiores a  $600^{\circ}C$ . A densidade destas amostras é constante até esta mesma temperatura, e cresce a temperaturas mais elevadas. Medidas da tensão interna apresentam o mesmo comportamento da densidade, constante até  $600^{\circ}C$ , aumentando para temperaturas mais altas. Os resultados de ERDA mostram a saída de hidrogênio a partir de  $400^{\circ}C$ . Os espectros de IR confirmam estes resultados mostrando uma redução significativa na intensidade da banda  $O-H$  em função do aumento da temperatura de "annealing". A espectroscopia Raman mostra que a razão entre as intensidades das bandas D e G ( $I_D/I_G$ ) aumenta aumentando-se a temperatura do tratamento térmico. Os espectros também apresentam outras 2 bandas centradas em aproximadamente  $700cm^{-1}$  e  $2220cm^{-1}$ . Suas intensidades, quando normalizadas pela banda G, apresentam diferentes dependências com a temperatura. Enquanto a intensidade da banda a  $700 cm^{-1}$  decresce por um fator 3, a intensidade da banda a  $2220cm^{-1}C$  aumenta pelo mesmo fator. Observa-se, também, uma dramática redução da luminescência de fundo com o aumento da temperatura. Este resultado indica um rearranjo importante da estrutura do filme com uma redução substancial das ligações não satisfeitas, e um aumento das ligações triplas carbono-nitrogênio, sendo este último resultado confirmado pela espectroscopia de infravermelho.

#### Filmes finos de $Pb(Zr,Ti)O_3$ preparados por precursores óxidos em meio ácido.

EUDES BORGES DE ARAÚJO, JOSÉ ANTONIO EIRAS  
Universidade Federal de São Carlos - Departamento de Física

Recentemente, com os avanços da tecnologia dos filmes finos, vários métodos para deposição de materiais ferroelétricos têm sido relatados. Métodos de deposição como o sputtering e sol-gel têm sido largamente utilizados na produção de filmes finos de boa qualidade. As aplicações são diversificadas e envolvem fenômenos dielétricos, piroelétricos, piezoelétricos e eletro-óticos. Uma classe importante de materiais ferroelétricos, explorados na produção de filmes finos, são as perovskitas, cujos representantes típicos são o  $BaTiO_3$ ,  $PbTiO_3$ ,  $PbZrO_3$ ,  $Pb(Zr,Ti)O_3$  (PZT) e  $Pb(Mg,Nb)O_3$  (PMN). Outra importante classe, do tipo tungstênio-bronze, também explorada na produção de filmes finos, possui representantes típicos como o  $(Sr,Ba)Nb_2O_6$  (SBN) e o  $LiNbO_3$ . Embora haja uma tendência mundial em investigar novos materiais, sem a presença de chumbo em

sua estrutura, as perovskitas à base de chumbo ainda detêm as melhores propriedades. Esse fato leva os pesquisadores a continuarem as investigações desses materiais. Uma linha de pesquisa atual é a busca de métodos alternativos que produzam filmes com a qualidade dos métodos já estabelecidos e que sejam viáveis economicamente. O presente trabalho propõe uma rota alternativa para a obtenção de filmes finos de PZT centrado em uma solução de íons preparada por precursores óxidos em solução de  $HNO_3$ . Para tanto, filmes de PZT foram depositados em substrato de quartzo e estudados pelas técnicas de DTA/TG, difração de raios-x, Rutherford Backscattering (RBS) e micrografias. Os resultados indicam que nesse sistema o PZT cristaliza-se acima de  $416^{\circ}C$  e apresenta uma co-existência das fases tetragonal e romboédrica. Para a fase tetragonal obteve  $c/a = 1.03$  e para a fase romboédrica obteve-se  $a = 4.127 \text{ \AA}$  e uma distorção de 0.03%. Medidas e simulações de RBS indicam a presença dos componentes do PZT no filme e apontam uma espessura média de 600 nm.

#### FORMATION OF PARTICLES IN FILM-DEPOSITING PLASMAS OF SILICON-AND TITANIUM-CONTAINING ORGANIC COMPOUNDS.

NILSON C. DA CRUZ, ELIDIANE C. RANGEL, MÁRIO A. BICA DE MORAES  
Laboratório de Processos de Plasma, DFA/IFGW, UNICAMP.

The formation of particles in plasma processes (deposition of films, surface treatment and plasma etching) is of interest in many areas. In microelectronics, the contamination of silicon wafers with plasma particles may lead to a complete degradation of device performance. In astrophysics, the generation and coalescence of charged particles in a plasma is of prime importance on the understanding of planet and star formation. Furthermore, the incorporation of particles into the film during plasma deposition may lead to a new class of materials. In this work, the formation of particles in plasmas used to deposit titanium- and silicon-containing films is investigated. For this purpose, radiofrequency (rf) plasmas (40 MHz, 10W) of titanium and silicon tetraoxides mixed with  $O_2$ , He and Ar were generated in a stainless steel vacuum chamber fitted with parallel plate electrodes and glass windows. Using laser light scattering (LLS) from a He-Ne laser, the onset of particle formation was determined as a function of the rf power and partial pressures of gases in the mixture. The influence of the particles on the plasma temperature was studied by measuring simultaneously the intensities of scattered or transmitted (through the plasma volume) laser light and He emission, with helium being used as an actinometer. The morphology and composition of the particles collected onto glass substrates were studied respectively by scanning electron microscopy and

electron microprobe analysis (EPMA). Particle sizes as large as  $100\mu\text{m}$ , in variety of shapes, such as individual spheres and agglomerates, were observed. Except hydrogen, to which EPMA is not sensitive, all the chemical elements present in the plasma were found in the

particles. The dependence of the concentration of each element found in the particles as a function on the applied rf power and the partial pressures of the gases of the mixtures is discussed.

### Cálculo de corrente controlada por processos de reação-difusão em sistemas eletroquímicos

PAULO CESAR T. D'AJELLO, GALILEU OLEGÁRIO NETTO JUDCAL

*Universidade Federal de Santa Catarina*

Processos eletroquímicos que envolvem a deposição de materiais sobre a superfície de eletrodos que se encontram submersos em uma solução eletrolítica são estudados. Estes processos estabelecem com frequência a formação de uma camada de reações junto a superfície dos eletrodos, de tal maneira que, sob a influência de uma diferença de potencial elétrico se desenvolve o crescimento de depósitos de materiais específicos aderidos aos eletrodos/substratos. Esses depósitos possuem variadas condições morfológicas e/ou metalúrgicas que se justificam pela extrema e complexa sensibilidade dos sistemas às condições químicas e físicas impostas em realizações experimentais. Raramente tem-se encontrado na literatura descrições teóricas que relacionem os processos de difusão e reação que se desenvolvem na solução eletrolítica ao transporte de cargas que se estabelece na interface substrato/depósito. Consideramos em particular a deposição de cobre sobre silício tipo n sob variadas situações de composição química dos eletrodos. A solução eletrolítica encontra-se, em todos os casos, sob a ação de uma diferença de potencial elétrico que desfavorece a migração dos íons de cobre em direção ao substrato de silício - regime anódico. Pela proposição de um modelo adequado para o tratamento de processos distanciados do equilíbrio, obtém-se expressões matemáticas que determinam a evolução temporal das concentrações das espécies reagentes em função da distância a um dos eletrodos. Estas equações diferenciais parciais acopladas modelam os processos de reação, difusão e absorção de partículas na superfície do eletrodo. A intensidade dos parâmetros característicos das reações e difusão regulam a transferência de cargas aos eletrodos e determinam o grau de porosidade dos depósitos metálicos sobre o silício. Para a definição da densidade de corrente medida nos sistemas consideramos os eletrodos correlacionados a concentração de cargas originárias do cálculo das concentrações mencionadas acima e obedecendo a uma certa lei de transporte. Esta é uma abordagem singular uma vez que os eletrodos não são tratados unicamente como fonte ou sumidouro de elétrons provenientes de condutores com baixa resistividade. O modelo oferece a possibilidade de analisar curvas voltamétricas e discutir o aparecimento das correntes anódicas observadas em realizações experimentais.

### The Structural Evolution in $\text{Co}_x\text{Fe}_{1-x}/\text{Ag}$ Films.

WLADIMIR HERNANDEZ FLORES, SÉRGIO RIBEIRO  
TEIXEIRA, JOÃO BATISTA MARIMON DA CUNHA,

JULIAN PENKOV GESHEV  
*Instituto de Física - UFRGS*

MARIA DO CARMO MARTINS ALVES

*LNLS - Laboratório Nacional de Luz Síncrotron*

AGNES TRAVERSE

*LURE - Université Paris-Sud*

PAUL J. SCHILLING

*Center for Advanced Microstructures and Devices*

Granular films can present giant magnetoresistance (GMR) effect even larger than in multilayers, and they are often obtained by co-sputtering of two immiscible metallic elements or sputtering of meta stable alloys. The size of the magnetic particles and the degree of intermixing between magnetic and nonmagnetic materials is of great interest. Its control is dictated by substrate temperature during the deposition, or after deposition by subsequent annealing, until the optimum annealing temperature ( $T_A$ ), the one that maximize

the GMR, is achieved. The structural evolution from a multilayer structure with thin layers and forthwith breakup the layers through successive annealing, in the range 200-600 °C by 10 minutes, were performed on  $[(\text{Co}_x\text{Fe}_{1-x}) (15\text{Å})/\text{Ag} (50\text{Å})]_{10}$  ( $x=0, 0.3, 0.7$  and  $1$ ) films. Thus, a regular granular magnetic network embedded in a nonmagnetic matrix is obtained, resulting in progressive demixing between the two metallic components and increase in the size of the magnetic particles. In order to understand the processes occurring after the annealing, the structural characterization of the samples was made using XRD (X-ray diffraction) and XAS (X-ray absorption spectroscopy) techniques. The XRD was performed in  $\theta - 2\theta$  geometry and the XAS measurements were performed using XANES (X-ray Absorption Near Edge Structure) and EXAFS (Extended X-ray Absorption Fine Structure) modes, collected at the Co-K (7709 eV) and Fe-K (7112 eV) edges. Annealing at  $T_A < 400$  °C does not change the structure and XRD patterns are the same as for as deposited samples. We have observed that the coordination number for  $x=0$  and  $1$ , increases with temperature, and this in-

crease indicates larger grain sizes. The relatively small Debye Waller factors shows that these grains are well ordered.

## SUPERFÍCIES E FILMES FINOS (Filmes Finos: Produção e Caracterização) - 11/06/97

### Microscopia de Força Atômica de Filmes de Carbono Amorfo Nitrogenado Depositados por "rf Magnetron Sputtering"

MÔNICA DE MESQUITA LACERDA, FERNANDO LÁZARO FREIRE JR

Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

RODRIGO PRIOLI, SUSANA ZANETTE, ANIBAL OMAR CARIDE

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, CBPF

O interesse em se estudar filmes finos de carbono amorfo nitrogenado ( $a - CN_x$ ) se deve as suas interessantes propriedades mecânicas e também as suas diversas aplicações tecnológicas, como por exemplo, recobrimento protetor de discos rígidos magnéticos. A Microscopia de Força Atômica (AFM), por sua vez, é uma ferramenta poderosa na obtenção de informações - em escala atômica - de propriedades estruturais, mecânicas e tribológicas de materiais em geral. Os filmes estudados por AFM foram depositados sobre n-Si(100) utilizando-se a técnica de "rf magnetron sputtering", tendo 100% de  $N_2$  no plasma à pressão de deposição de 1Pa, potência de rf igual a 150W e alvo de grafite com 99.99% de pureza. As amostras foram submetidas a tratamento térmico, em vácuo, a temperaturas entre 300°C e 800°C, durante um intervalo de 30 minutos, sem qualquer recozimento sequencial. Os resultados obtidos mostram que a rugosidade da superfície diminui em função do aumento da temperatura do tratamento. O coeficiente de atrito entre a ponta de prova ( $Si_3N_4$ ) e a superfície dos filmes também foi medido, mostrando uma redução significativa quando aumenta-se a temperatura de "annealing". Estes resultados mostram um aumento da uniformidade da superfície em função do aumento da temperatura de tratamento térmico.

### MORFOLOGIA SUPERFICIAL DE FILMES FINOS DE Cu ELETRODEPOSITADOS SOBRE Si

LUIZA SELIGMAN, ALOÍSIO N. KLEIN

Pós graduação em Engenharia Mecânica, UFSC

LUIZ FELIPE DE O. MARTINS, LIA S. DE OLIVEIRA, CLAUD M. HASENACK, ANDRÉ A. PASA

Departamento de Física - CFM, UFSC

WALTER SCHWARZACHER

H.H. Wills Physics Laboratory - Bristol, UK

A eletrodeposição de filmes finos é um método alternativo para produção de filmes e tem despertado a atenção de pesquisadores com interesse no desenvolvimento de novos materiais. Esse método permite a obtenção de filmes finos e multicamadas metálicas na superfície de semicondutores, possibilitando a formação de contatos retificadores ou não e a integração entre dispositivos microeletrônicos (transistores, diodos) e dispositivos magnetoeletrônicos (sensores magnetorresistivos). Proporciona, também, a manufatura das camadas finas a custo reduzido e qualidade comparável aos métodos convencionais.

Neste trabalho foi estudada a morfologia superficial de filmes finos de Cu eletrodepositados sobre substratos de Si tipo-n, em solução com diferentes concentrações de sulfato de cobre ( $CuSO_4$ ) e com ou sem aditivos ( $HF$  e  $H_3BO_3$ ). A dependência do tamanho de grão e da rugosidade dos filmes com o potencial aplicado foi investigada através das técnicas de microscopia de força atômica (AFM) e microscopia eletrônica de varredura (SEM). Os potenciais foram escolhidos com o auxílio da técnica de voltametria.

Para altas concentrações de Cu (260mM  $CuSO_4$ ), o tamanho de grão e a rugosidade aumentaram em função do potencial aplicado. Apresentando uma fraca dependência em relação aos diferentes aditivos testados. Para baixas concentrações de Cu (13mM  $CuSO_4$ ) observou-se uma dependência com o potencial e com os aditivos utilizados.

†in memoriam

### DISSOLUÇÃO ELETROQUÍMICA NA SUPERFÍCIE DE Si TIPO-n INFLUENCIADA PELA PRESENÇA DE Cu

LUIZ FELIPE DE O. MARTINS, LUIZA SELIGMAN, PAULO C. T. D'AJELLO, CLAUD M. HASENACK, ANDRÉ A. PASA

UFSC

SEBASTIÃO G. DOS SANTOS

USP

A interação da superfície de silício com íons fluoreto é um importante mecanismo para a modificação de sua superfície. Um exemplo bastante conhecido é a dissolução anódica de ambos o silício tipo-n e o tipo-p em meio aquoso contendo fluoreto. Sob condições apropriadas, esta dissolução conduz ao eletropolimento da superfície do semicondutor ou à formação de uma camada de silício poroso.

Neste trabalho serão discutidos alguns destes mecanismos eletroquímicos que ocorrem na superfície de Si tipo-n em soluções diluídas de  $HF$  contendo  $CuSO_4$ , normalmente utilizadas para a deposição de Cu sobre o substrato semicondutor. Soluções contendo diferentes concentrações de ácido fluorídrico e do sal metálico

foram estudadas com o auxílio da técnica de voltametria cíclica, sendo evidenciada a influência do metal sobre os mecanismos acima citados.

Em eletrólitos contendo  $HF$  e sulfato de cobre é observada a presença de uma corrente anódica, relacionada a processos de dissolução na superfície da lâmina de Si, e a deposição do metal. Foi detectada uma dependência da corrente anódica tanto com a concentração de ácido fluorídrico, como era esperado, bem como com a concentração de sulfato de cobre. A dependência com a quantidade de Cu na solução foi relacionada com uma maior dissolução na superfície do Si, associada a reações químicas envolvendo as espécies  $OH$  ou  $H_2O$ . Este processo seria então influenciado pelo metal, conforme modelo proposto, e ocorreria concomitantemente com redução de íons de Cu, formando um depósito metálico. Espectros RBS obtidos a partir de filmes depositados neste regime revelaram a existência de oxigênio na interface Si/Cu, o que estaria de acordo com o mecanismo apresentado.

† in memoriam

#### ESTRUTURA E MORFOLOGIA DE FILMES FINOS DE DIAMANTE SEMICONDUTOR.

MARGARETH K. K. D. FRANCO

*Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS,  
Campinas, SP, Brasil*

DENISE RIBEIRO DOS SANTOS, IRIS L. TORRIANI

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

Foram crescidos filmes finos de diamante semicondutor sobre substrato de Si (100) por deposição química a partir da fase vapor assistida por filamento quente (HF-CVD). A dopagem dos filmes foi efetuada de forma concomitante ao crescimento, através da inclusão de  $B_2O_3$  no fluxo gasoso. Diversos parâmetros de crescimento foram variados, tais como a temperatura do substrato, o tempo de deposição e o fluxo de alimentação (composto por 1 % de álcool etílico e 99 % de hidrogênio). Neste trabalho estudamos o efeito da concentração de dopante na estrutura cristalina e na morfologia dos filmes, utilizando para isso as técnicas de difração de raios-x (DRX) e microscopia eletrônica de varredura (SEM). A caracterização por SEM mostrou que a superfície morfológica é influenciada pela dopagem, apresentando variação no tamanho médio dos grãos entre  $5,5 \mu m$  no caso não dopado e  $2,0 \mu m$  nas amostras com maior dopagem. Estes resultados são relevantes pois contribuem para o estudo do comportamento elétrico em semicondutores extrínsecos. No caso destes filmes foi possível correlacionar sua morfologia com variações na resistividade elétrica, conforme apresentado em trabalhos anteriores. Os espectros de DRX confirmaram a presença de uma única fase cristalina (diamante) e a análise da largura de linha de difração mostrou que o tamanho médio dos cristalitos é menor que a dimensão dos grãos observados

por SEM. O tamanho médio dos cristalitos na direção perpendicular aos planos (111) não apresentou grande variação em função da quantidade de boro incorporada. A cristalinidade dos filmes pode ser considerada bastante boa, e a análise das intensidades relativas dos picos originados pelos planos cristalográficos (111), (220), (311), (400) e (331) indicou a ausência de orientação preferencial.

#### CARACTERIZAÇÃO ESTRUTURAL DE BICAMADAS E SANDUÍCHES DE Cu-Fe DEPOSITADOS SOBRE FILMES EPITAXIAIS DE $CaF_2(111)$ .

NEY MATTOSO, DANTE H. MOSCA, IRINEU MAZZARO, RENÊ C. DA SILVA, WIDO H. SCHREINER  
*UFPR*

SÉRGIO R. TEIXEIRA  
*UFRGS*

As bicamadas Cu/Fe e Fe/Cu e os sanduíches Fe/Cu/Fe e Cu/Fe/Cu foram todos depositados na evaporadora BALZERS 500P sobre filmes epitaxiais de  $CaF_2(111)$  crescidos, na mesma evaporadora, sobre wafers de Si(111). A taxa de deposição foi mantida constante em  $0,1 \text{ nm/s}$ . As espessuras de cada filme metálico é de 30 nm, para os filmes de  $CaF_2$  as espessuras são de 40 nm. Os filmes de Fe crescidos diretamente sobre os filmes de  $CaF_2$  foram depositados a  $300^\circ C$ , enquanto que os demais filmes metálicos foram depositados a temperatura ambiente. A pressão de base de todas as deposições foi de  $2 \times 10^{-8} \text{ mbar}$ . As bicamadas foram analisadas pelas seguintes técnicas: difração de raios X ( $\theta$ - $2\theta$ ), varredura  $\omega$ , microscopia eletrônica de transmissão e curvas de magnetização a temperatura ambiente. Os resultados estruturais indicam que os filmes possuem grãos, em forma de placas, altamente texturizados no plano (111) para o Cu e (110) para o Fe. Os filmes de Cu apresentam, em geral, uma quantidade de defeitos maior que os filmes de Fe. O nível de deformação ao longo da direção de crescimento é completamente dependente da superfície no qual os filmes de Cu foram depositados. No caso dos filmes de Fe este aspecto não afeta muito, sendo estruturalmente idênticos. Do ponto de vista magnético, os filmes de Fe são completamente dependentes da temperatura de deposição. Filmes de Fe depositados a  $300^\circ C$  apresentam campos de saturação 8 vezes maiores e campos coercivos 5 vezes mais elevados que os filmes depositados a temperatura ambiente.

#### ENSAIOS DE NANOSCRATCH EM LIGAS $Co_xFe_{1-x}$ ELETRODEPOSITADAS

RAPHAEL WOLFGANG WEINGARTNER RIEDTMAN,  
EDSON MASSAYUKI KAKUNO, DANTE HOMERO  
MOSCA

*Laboratório de Materiais - Departamento de Física -*

## UFPR

GILBERTO YOSIMASA ODO, CARLOS MAURÍCIO  
LEPIENSKI

Laboratório de Propriedades Nanomecânicas - Depto. de  
Física - UFPR

MAURÍCIO PEREIRA CANTÃO

Divisão de Materiais e Desenvolvimento - LAC - COPEL

Ligas ferromagnéticas  $\text{Co}_x\text{Fe}_{1-x}$ , com  $0 < x < 1$ , foram produzidas a partir de solução aquosa sulfatada única contendo os íons metálicos  $\text{Co}^{++}$  e  $\text{Fe}^{++}$  pelo método potencioestático usando uma célula eletroquímica convencional de três eletrodos à temperatura ambiente. A composição das ligas foi controlada através da proporção das concentrações parciais de sulfato de Co e sulfato-amoniaco de Fe dissolvidos em água destilada. Todos os depósitos foram feitos a partir de soluções com concentração total de íons fixa em 1 molar. Os potenciais catódicos usados para a deposição das ligas Co-Fe foram: -1,0V, -1,1V, -1,2V e -1,4V (V versus Ag-AgCl). Análise por EDS revela que a proporção do conteúdo de Co e de Fe nos depósitos seguem uma relação linear com a proporção das concentrações parciais dos íons Co e Fe nas soluções. Os ensaios de nanoscratch foram realizados com um Nanoindenter II utilizando uma ponta de diamante tipo Berkovich com diferentes forças de carregamento (2 mN à 320 mN) aplicadas com velocidade constante de 10  $\mu\text{m/s}$ . Os coeficientes de atrito dinâmico dessas ligas mantêm-se entre 0,36 e 0,40 mostrando-se praticamente independentes da composição e do potencial de depósito. Para a força de carregamento de 20 mN as profundidades de penetração são da ordem de 380 nm para todos os depósitos. Já para a força de carregamento de 320 mN, tanto as deformações plásticas, como as restaurações elásticas dependem fortemente da composição das ligas. As ligas com composição intermediária ( $0,3 < x < 0,7$ ) mostram-se frágeis, com maior coeficiente de restauração elástica e com maior dureza.

**MAGNETORESISTÊNCIA GIGANTE EM  
MULTICAMADAS CoFe/Cu  
ELETRODEPOSITADAS**

EDSON MASSAYUKI KAKUNO, RENÊ CHAGAS DA  
SILVA, NEY MATTOSO, WIDO HERWIG. SCHREINER,  
DANTE HOMERO. MOSCA

Laboratório de Materiais - Departamento de Física -  
UFPR

SÉRGIO RIBEIRO TEIXEIRA

Laboratório de Filmes Finos - Instituto de Física - UFRGS

Multicamadas CoFe/Cu foram produzidas a partir de solução aquosa sulfatada única contendo todos os íons metálicos de interesse pelo método eletroquímico potencioestático pulsado usando uma célula eletroquímica convencional de três eletrodos à temperatura ambiente. O conteúdo de Cu foi mantido em concentração diluída

( $10^{-3}$  M) enquanto o conteúdo de Co e de Fe foram mantidos na proporção fixa de 9:1 perfazendo uma concentração total de 1 molar. Acrescentou-se ainda nas soluções 0,5 M de ácido bórico. Os depósitos foram realizados sobre filmes finos de cobre com espessura de 30 nm, previamente evaporados sobre wafers comerciais de silício monocristalinos. Os potenciais catódicos usados para as deposições do Cu e da liga Co-Fe foram -0,55V e -1,20V (V versus Ag-AgCl saturado), respectivamente. Análise por EDS revela que as camadas ferromagnéticas são constituídas por ligas  $\text{Co}_{0,87}\text{Fe}_{0,13}$  com incorporação de Cu inferior à 3 % atômico, enquanto as camadas espaçadoras são constituídas unicamente por Cu. Análise por TEM com difração de elétrons em área selecionada revela uma estrutura cristalina de caráter policristalino fracamente texturizada. Nas camadas ferromagnéticas há uma coexistência das estruturas cristalinas cúbica de face centrada e hexagonal compacta. A análise dos ciclos de histerese das multicamadas mostra que a magnetização encontra-se preferencialmente no plano das camadas sendo os campos de saturação são inferiores a 250 Oe. Medidas de magnetoresistência realizadas à temperatura ambiente revelam efeito magnetoresistivo superior a 10 % em campos magnéticos inferiores a 200 Oe. Investigando o efeito da repetição do período de modulação química das multicamadas sobre o valor da magnetoresistência concluímos que praticamente não há alteração quando aumentamos o número de bicamadas de 20 para 200.

**TiO<sub>x</sub>-like Films Produced by Plasma Enhanced  
-CVD**

NILSON C. DA CRUZ, ELIDIANE C. RANGEL, MÁRIO  
A. BICA DE MORAES

Laboratório de Processos de Plasma, DFA/IFGW,  
UNICAMP.

Titanium dioxide ( $\text{TiO}_2$ ) films are hard, chemical inert, transparent at visible and near-infrared regions, and have a high refractive index. These films find application, for example, as interference filters, anti-reflection coatings, electrochromic devices, dielectric materials, and corrosion resistant barriers. In this work, the production of  $\text{TiO}_x$ -like films by plasma enhanced chemical vapor deposition of titanium tetraisopropoxide (the monomer) / oxygen / helium / argon mixtures is described. The films were deposited in a RF-powered (40 MHz, 100W) stainless steel vacuum chamber fitted with two horizontal parallel-plate electrodes and glass windows. A 1-meter monochromator spectrometer was used in optical emission measurements. The partial pressure of oxygen in the total gas feed,  $RO_2$ , was taken as the principal plasma parameter. By using actinometric optical emission spectroscopy with argon as the actinometer, the relative concentrations of species of interest present in the plasma, such as CH, CO and O, were determined as a function of  $RO_2$ . By measuring the actinometer

emission intensity, the trend of plasma activity, defined as the product of mean electron energy times mean electron density, could be determined as a function of the proportion of  $O_2$ . As two processes, namely chemical reactions and fragmentation of monomer molecules, can take place simultaneously in the plasma, the knowledge of the behavior of plasma activity and relative concentrations can give some insight into the role played by each one of this processes on the film properties. Films deposited at various  $RO_2$  were characterized by infrared and transmission ultraviolet-visible spectrometries; the former registered the presence of structural groups, such as  $TiO$ , and the latter allowed the determination of optical parameters, such as refractive index and optical gap, as a function of  $RO_2$ . Relationship between the plasma parameters and the film properties are discussed.

### PROPRIEDADES DE FILMES FINOS DE Zr-N PREPARADOS COM "ION-BEAM ASSISTED DEPOSITION"

MASAO MATSUOKA, SADA O ISOTANI, JOSÉ FERNANDO DINIZ CHUBACI, SHIGUEO WATANABE  
USP

NAOTO KURATANI, KIYOSHI OGATA  
*Nissin Electric Company, Ltd.*

Filmes finos de Zr-N foram formados sobre um substrato de Si(100) à temperatura ambiente com a deposição de vapor de Zr e o bombardeamento simultâneo por íons N (método de "ion-beam assisted deposition"). Durante a deposição de Zr, a superfície do substrato foi exposta perpendicularmente ao feixe de íons de 2 keV de energia. A composição e a estrutura cristalina dos filmes foram observadas, respectivamente, com a técnica de "X-ray photoelectron spectroscopy (XPS)" e a de difração por raios-X (XRD). A dureza e a aderência dos filmes foram medidas, respectivamente, com um analisador de dureza "Knoop" e um "Micro scratch-tester". Essas propriedades foram estudadas em função da razão de transporte Zr/N,  $RT(Zr/N)$ , definida como a razão do fluxo de átomos de Zr transportados ao substrato relativa ao fluxo de íons incidentes; o valor de  $RT(Zr/N)$  foi escolhido de 0,5, 1,1, 2,6 e 5,3. Todos os filmes formados apresentam um pico de XRD associado com um plano (111) de ZrN cúbico observado a  $2\theta = 33,5^\circ$ . Análises dos espectros de XPS de Zr 3d e de N 1s indicam que os filmes preparados a  $RT(Zr/N)$  de 0,5 a 1,1 mostram aqueles de ZrN, enquanto que os filmes formados a  $RT(Zr/N)$  de 2,6 a 5,3 apresentam aqueles ricos de Zr metálico. O estudo de análises da razão de composição dos filmes,  $CR(Zr/N)$ , exibe a rejeição preferencial de N a  $RT(Zr/N)$  baixa e a "sputtering" preferencial de Zr por íons a  $RT(Zr/N)$  alta. Comparações entre os resultados de dureza e de peso crítico obtido com o "Micro scratch-tester" indicam que a estequiométrica  $RT(Zr/N)$  igual a 1 é uma condição ótima

para a preparação dos filmes. A decomposição dos espectros de XPS está em desenvolvimento.

### CAMADA DUPLA ANTIREFLETORA DE ZnS/MgF<sub>2</sub> PARA APLICAÇÕES EM CÉLULAS SOLARES

HELOISA ANDRADE DE PAULA, FRANCISCO DAS CHAGAS MARQUES

*Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP Instituto de Física Gleb Wataghin Departamento de Física Aplicada*

O uso de camadas antirefletoras em células solares tem por objetivo a diminuição da reflexão em sua superfície e conseqüentemente o aumento de seu rendimento. Os processos mais utilizados para a redução da reflexão na superfície do silício são: a) texturização da superfície através de ataque químico, ou b) deposição de uma camada simples antirefletora. Em células solares de alta eficiência são utilizadas camadas duplas antirefletoras. Este trabalho consiste no desenvolvimento de um sistema de camada dupla antirefletora para aplicações em células solares. Para isto desenvolvemos filmes de ZnS e  $MgF_2$  por evaporação térmica, e preparamos camadas duplas sobre silício com orientação (111), com superfície polida ou texturizada quimicamente. A reflexão foi medida utilizando-se uma esfera integradora de um espectrofotômetro, na faixa de 400-1200 nm. Os resultados foram comparados com os valores teóricos calculados a partir de equações já reportadas na literatura. A reflexão total das IE2 minas com camada dupla antirefletora sobre silício texturizado foi reduzida para valores inferiores a 5% em uma larga faixa do espectro solar (400-1000nm), mostrando que são apropriadas para aplicações em dispositivos fotovoltaicos. (Apoio: CNPq, FAPESP e PADCT)

### ATIVAÇÃO DE FILMES FINOS DE SULFETO DE CHUMBO POR OXIDAÇÃO

ANTONIO CARLOS CALLADO DE SOUZA, CARLOS LUIZ FERREIRA  
IME

Investigados desde o início do século, os detectores de infravermelho de sulfeto de chumbo tiveram sua utilização ampliada após 1940 com aplicações tanto no campo acadêmico quanto no comercial tais como: sensores espectrométricos, instrumentação para pesquisa médica, contadores e classificadores para a indústria, sistemas de vigilância e visão noturna, guiamento e controle de aeronaves e mísseis, fotoresistores, sensores de medidas termoelétricas. Mesmo tendo sido extensamente pesquisadas, as medidas de propriedades físicas destes filmes de PbS apresentam resultados frequentemente contraditórios que tem impedido uma conciliação entre as diversas teorias sobre os processos físicos que as governam. Neste trabalho foram investigados os efeitos da oxidação nas propriedades elétricas de filmes finos

policristalinos de sulfeto de chumbo. As amostras foram depositadas pela técnica de paredes quentes com pressões em torno faixa de  $2 \times 10^{-6}$  mbar, com a temperatura da fonte variando entre  $600^\circ\text{C}$  e  $700^\circ\text{C}$ , a da parede em  $400^\circ\text{C}$  e a do substrato em  $200^\circ\text{C}$ . Elas foram posteriormente tratadas termicamente na faixa de  $120^\circ\text{C}$  a  $200^\circ\text{C}$  em atmosfera controlada de oxigênio. Os tempos de recozimento variaram de 15 min a 5 horas, em intervalos de 15 minutos. Foram analisadas as variações nas medidas dos parâmetros Hall das amostras: concentração de portadores, mobilidade de portadores

e resistividade. A partir dos resultados preliminares das análises observou-se uma dependência não linear destes parâmetros com o desenvolvimento da oxidação e a existência de uma descontinuidade na derivada do gráfico concentração de portadores por tempo. Estas observações sugerem a formação de uma junção p-n nos contornos de grão que incrementaria a vida média dos portadores via separação espacial nos mesmos.

---

## ÓPTICA (Óptica Não-Linear e Laser)

### ÓPTICA (Óptica Não-Linear e Laser) – 12/06/97

CEFET-PR

ANDERSON S. L. GOMES, CID B. DE ARAÚJO,  
CELSON P. DE MELO  
UFPE

#### NÃO-LINEARIDADES ÓPTICAS EM POLÍMEROS CONJUGADOS UTILIZANDO LUZ INCOERENTE.

GLAUCO SANTOS MACIEL, RICARDO REGO  
BORDALO CORREIA, CID BARTOLOMEU DE ARAÚJO  
*Departamento de Física - UFPE*  
WALTER MENDES DE AZEVEDO  
*Departamento de Química Fundamental - UFPE*

O estudo de fenômenos ultra-rápidos com tempos característicos de picosegundos e femtosegundos requerem medidas espectroscópicas de alta resolução nesta escala temporal. Tais medidas podem ser efetuadas com lasers de pulsos ultra-curtos. Devido a algumas restrições de tais lasers como limitado intervalo espectral de operação e dispersão óptica, um outro método utilizando luz parcialmente coerente pode ser empregado. Neste procedimento o sinal obtido através de não-linearidades ópticas no material é analisado através da correlação entre o feixe de excitação e o feixe de prova. O experimento envolve mistura degenerada de quatro ondas, onde através do fenômeno conhecido como auto-difração é possível medir o tempo de relaxação da coerência ( $T_2$ ) da polarização não-linear induzida na amostra e também determinar a susceptibilidade não-linear de terceira ordem,  $\chi^{(3)}$ . A resolução temporal neste caso é determinada pelo tempo de correlação e não pela duração do pulso da fonte de excitação. A fonte de excitação é um laser de corante de banda larga ( $\Delta\lambda = 10\text{nm}$ ) com um estágio amplificador, emitindo em 590 nm, o qual é bombeado pelo segundo harmônico de um laser pulsado de Nd:YAG (5 Hz, 10 ns). Serão analisados os resultados das medidas do  $T_2$  eletrônico e do  $\chi^{(3)}$  em polímeros conjugados de polianilina-PVA[1] na forma de base esmeraldina dissolvidos em DMSO. O corante é escolhido de modo que seu comprimento de onda de emissão coincida com a banda de absorção da polianilina correspondente à formação de excitons moleculares[2]. [1]Petrov et al., Opt. Lett. v. 20, p. 554 (1995). [2]Roe et al., Phys. Rev. Lett. v.60, p.2789 (1988).

#### MEDIDAS DE Z-SCAN EM DERIVADOS DE RETINAL

ARANDI G. BEZERRA-JR

Materiais orgânicos apresentam grande potencial para serem usados como dispositivos fotônicos. A versatilidade de síntese química permite otimizar sua estrutura molecular para maximizar sua resposta não-linear. As estruturas poliméricas conjugadas, devido a seus elétrons  $\pi$  deslocalizados, podem apresentar não-linearidades ópticas não-ressonantes significativas bem como efeitos térmicos desprezíveis. Outra característica importante dos materiais orgânicos são os tempos de resposta não-linear curtos. Utilizamos o segundo harmônico de um laser Nd:YAG Q-switched e mode locked, operando a uma taxa de repetição de 5Hz, e a técnica de Z-scan para medir o índice de refração não-linear,  $n_2$ , em derivados do retinal. O retinal, aldeído da vitamina A, é o cromóforo dos pigmentos visuais (rodopsina) e dos pigmentos de membranas púrpuras (bacterorodopsina) que desempenham papel fundamental na transdução da energia luminosa em seres vivos. Preparamos amostras de 13 cis ácido retinóico, 13 cis retinal aldeído e all trans ácido retinóico com concentrações da ordem de  $10^{-2}\text{mol/l}$ , dissolvidas em clorofórmio. Observamos que o índice de refração não-linear do retinal é negativo (o material é defocalizador) e medimos o valor de  $n_2$  que é da ordem de  $10^{-11}$  esu. Calculamos as hiperpolarizabilidades ( $\gamma$ ) associadas e obtivemos  $\gamma = 10^{-31}$  esu. Observamos também que, após alguns dias, a amostra de 13 cis retinal aldeído teve sua não-linearidade aumentada em uma ordem de grandeza, efeito que atribuímos a uma possível isomerização cis $\rightarrow$ trans. Comparamos estes resultados com os obtidos por outras técnicas, como geração de terceiro harmônico e mistura degenerada de quatro ondas.

#### PROPRIEDADES ÓPTICAS LINEARES E NÃO-LINEARES DO VIDRO FLUOROINDATO DOPADO COM $Cr^{+3}$

C. R. MENDONÇA, B. J. COSTA, Y. MESSADDEQ, S. C. ZILIO

*Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo*

Materiais vítreos vêm sendo amplamente investigados devido ao interesse de se desenvolver dispositivos ópticos, meios ativos para lasers, amplificadores ópticos com fibras, etc. Verificou-se recentemente que sistemas vítreos pseudo-ternários à base de  $InF_3$ - $GdF_3$ - $GaF_3$  são mais estáveis à devitrificação e tem melhores propriedades ópticas em relação a vidros de outros sistemas.

Neste trabalho investigamos as propriedades ópticas lineares e não-lineares em uma amostra de vidro fluoroindato dopado com  $Cr^{+3}$ . Através do espectro de absorção observamos três bandas na região do visível em torno de 280nm, 440nm e 660nm, que correspondem, respectivamente, às transições  ${}^4A_2 \rightarrow {}^4T_{1g}$ ,  ${}^4A_2 \rightarrow {}^4T_{1a}$  e  ${}^4A_2 \rightarrow {}^4T_2$ . Superposta à banda  ${}^4T_2$ , observamos duas depressões correspondentes às anti-ressonâncias de Fano, devido à interferência entre a banda larga  ${}^4T_2$  e os níveis  ${}^2E$  e  ${}^2T_1$ . A partir deste espectro de absorção determinamos o valor do parâmetro de campo cristalino  $Dq/B=2.11$ , característico de matrizes de campo fraco. Observamos também uma banda de emissão larga situada no infra-vermelho próximo, que se estende de 650 até 850nm, correspondendo à transição  ${}^4T_2 \rightarrow {}^4A_2$ . O decaimento da fluorescência apresentou um comportamento não estritamente exponencial com tempo característico de 250 $\mu$ s. Utilizando a técnica de varredura-z encontramos o valor do índice de refração não-linear ( $n_2$ ) para vários comprimentos de onda. Os valores de  $|n_2(\lambda)|$  mostram que diferentemente do que ocorre em cristais dopados com  $Cr^{+3}$ , neste caso a origem da não-linearidade deve-se a transições eletrônicas na região do visível. Para confirmar esta hipótese, propomos um modelo onde  $n_2$  pode ser relacionado com os coeficientes de absorção dos estados fundamental e excitados, posição e largura das transições eletrônicas acessíveis à radiação empregada. Tal modelo ajustou-se bastante bem aos dados experimentais e nos permitiu encontrar parâmetros espectroscópicos deste material.

#### MEASUREMENT OF THE SCATTERING DEPTH OF A DISORDERED MEDIUM USING INCOHERENT LIGHT

RENATO EVANGELISTA DE ARAUJO, ANDERSON STEVENS LEÔNIDAS GOMES  
*Departamento de Física - UFPE*

Artificial disordered media, composed of sub-wavelength dielectric particles embedded in a liquid of smaller refractive index, are very suitable test media for random structures found in nature, as arrangements of cells in biological tissues or suspension of particles in blood. A laser pulse propagating through such a medium undertake multiple scattering which can lead to ballistic and diffuse components of the outgoing pulse. We describe experimental results of the measurements of the scattering depth (or attenuation coefficient)  $\alpha = \rho\sigma$  of a disordered medium consisting of an aqueous solution of polystyrene particles (diameter 0.115 $\mu$ m), where  $\rho$  is the volumetric particle density and  $\sigma$  is the particle cross section, which can be calculated using Mie theory [1]. A Michelson interferometer setup was used with a 2mm cell containing the scatters in one arm. Incoherent pulses ( $t_{pulse} = 100ps$ ,  $t_{coh} = 90fs$ ,  $\lambda = 583nm$ ,  $\Delta\lambda = 11nm$ ) generated from a Raman source (the second Stokes was spectrally selected) pro-

pagated through the medium. By measuring the time delay introduced by the increase in the path due to the multiple scattering, the particle density (initially unknown) is determined, from which the scattering depth is then inferred. A value of  $\alpha = 10.1 cm^{-1}$  was obtained in our measurement, in good agreement with theoretical predictions. This technique can also be exploited for recomposing the image of a hidden object in a turbid medium [2].

[1] C. F. Bohren and D. R. Huffman, Absorption and Scattering of Light by Small Particles, John Wiley and Sons, Inc, 1983.

[2] H. Chiang, W. Chang and J. Wang, Opt. Lett. 18, 546 (1993).

#### Medida do índice de Refração Não Linear em Cristais Líquidos Liotrópicos

F. L. S. CUPPO, S. L. GÓMEZ, A. M. FIGUEIREDO NETO, M. MURAMATSU, R. J. HOROWICZ  
*Instituto de Física da Universidade de São Paulo*

Os cristais líquidos são estados intermediários entre o sólido cristalino e o líquido isotrópico, nos quais a matéria pode se apresentar. Existem duas grandes famílias de cristais líquidos: os termotrópicos e os liotrópicos. Os cristais líquidos apresentam uma das maiores não linearidades óticas conhecidas, o que os faz de grande interesse em aplicações tecnológicas (dispositivos eletro-óticos, tais como moduladores de fase e frequência, chaves e memórias óticas, etc), e em Física básica. A não-linearidade ótica de uma amostra de cristal líquido pode ser quantificada pelo índice de refração não linear,  $n_2$ , o qual está diretamente relacionado com parâmetros dos cristais líquidos (parâmetro de ordem, constantes elásticas, etc). Ou seja, o índice de refração não linear traz informações fundamentais no tocante às propriedades termodinâmicas e estatísticas desses materiais. Desta forma o conhecimento de  $n_2$  permite não só caracterizar as diversas fases dos cristais líquidos quanto estudar as transições de fase e as interfaces líquido-sólido. Encontram-se na literatura trabalhos nos quais o valor de  $n_2$  é determinado em cristais líquidos termotrópicos. O presente trabalho apresenta as primeiras medidas deste índice feitas numa amostra de cristal líquido liotrópico. A amostra usada é uma mistura de laurato de potássio/decanol/água. As fases estudadas em particular foram a isotrópica e a nemática calamítica. A técnica utilizada para obter  $n_2$  foi a de Z-Scan. As medidas foram realizadas usando um laser de Argônio ( $\lambda = 514,5nm$ ) CW obturado ("chopped") em pulsos da ordem de milissegundos. Para pulsos desta duração, o efeito não linear tem origem térmica. Os resultados obtidos apresentam-se duas ordens de grandeza inferiores aos presentes na literatura para amostras termotrópicas. Uma investigação teórica sobre os fenômenos envolvidos nesta diferença encontrada é desenvolvida.

**Transferência de Energia e Conversão Ascendente de Frequências em Vidros Fluoroindatos Dopados com Pr<sup>3+</sup>**

ELIO MENESES-PACHECO, CÍD BARTOLOMEU DE ARAÚJO

*Departamento de Física-UFPE*

YOUNES MESSADDEQ

*Instituto de Química-UNESP*

Vidros fluoroindatos têm ultimamente despertado um grande interesse porque algumas de suas propriedades físicas indicam que eles têm um grande potencial para uso em dispositivos fotônicos tais como amplificadores ópticos, sensores, e conversores de frequências [1]. Em particular, quando dopados com Pr<sup>3+</sup>, estes vidros mostram uma grande eficiência para conversão ascendente em processos envolvendo interações entre pares de Pr<sup>3+</sup> [2]. Neste trabalho damos continuidade ao trabalho anterior [2] estudando o fenômeno de conversão ascendente bem como processos de transferência de energia entre ions Pr<sup>3+</sup> excitados para um estado metaestável. Foi utilizado um laser de corante (590 nm, 5 Hz, pulsos de 10 ns) em ressonância com a transição <sup>3</sup>H<sub>4</sub> → <sup>1</sup>D<sub>2</sub> e analisado o comportamento dinâmico da fluorescência <sup>1</sup>D<sub>2</sub> → <sup>3</sup>H<sub>5</sub> (685 nm) e da conversão ascendente gerada pela interação <sup>1</sup>D<sub>2</sub> + <sup>1</sup>D<sub>2</sub> → <sup>3</sup>P<sub>0</sub> + <sup>3</sup>H<sub>4</sub> + fônons, através da emissão <sup>3</sup>P<sub>0</sub> → <sup>3</sup>H<sub>4</sub> na região azul (480nm). O decaimento temporal da fluorescência <sup>1</sup>D<sub>2</sub> → <sup>3</sup>H<sub>5</sub> apresenta desvios do decaimento exponencial observado para ions livres indicando a presença de interação do ion emissor com vizinhos em diferentes sítios da matriz vítrea. Já a emissão <sup>3</sup>P<sub>0</sub> → <sup>3</sup>H<sub>4</sub> apresenta um comportamento típico observado anteriormente nas experiências de conversão ascendente [2], compatível com a hipótese de um processo de relaxação cruzada entre pares de Pr<sup>3+</sup>. Os processos estudados foram modelados quantitativamente e os resultados permitiram a determinação das taxas de transferência de energia entre ions (10<sup>2</sup> - 10<sup>5</sup> s<sup>-1</sup>), em função da concentração de Pr<sup>3+</sup> e da potência do laser de excitação.

[1] de Araújo et al., em Trends in Chemical Physics, ed. por J.C. Alexander (Research Trends, Índia, 1996) Vol. 4, p.59-74.

[2] de Araújo et al., Phys. Rev. B vol.50, p.16219 (1994).

**FENÔMENO DE AVALANCHE EM VIDROS FLUOROINDATOS DOPADOS COM ÉRIBIO**

NIKIFOR RAKOV GOMEZ, CÍD BARTOLOMEU DE ARAÚJO

*Departamento de Física-UFPE*

YOUNES MESSADDEQ

*Instituto de Química-UNESP*

Recentemente muita atenção tem sido dada a um novo grupo de vidros, os fluoroindatos. Estes vidros além de apresentarem boas propriedades mecânicas, alta

resistência a umidade e grande eficiência em processos de conversão ascendente de frequência, apresentam uma janela de transmissão que vai de 0.25 a 8 μm [1]. Neste trabalho apresentamos resultados da observação do processo de avalanche de fótons em vidros fluoroindatos dopados com Érbio. As amostras utilizadas tem a seguinte composição: (mol%) 39-x InF<sub>3</sub>-20ZnF<sub>2</sub>-16BaF<sub>2</sub>-20SrF<sub>2</sub>-2GdF<sub>3</sub>-2NaF-1GaF<sub>3</sub>-xErF<sub>3</sub> (x=1,2,3). Foram feitas experiências de absorção óptica, medidas espectrais e de evolução temporal da fluorescência gerada no processo de conversão ascendente de frequências mediado pelo avalanche de fótons. A fonte de excitação foi um laser de corante escolhido cuidadosamente para nos fornecer um comprimento de onda que além de ser ressonante entre estados excitados, esteja fora de ressonância entre o estado fundamental e o nível metaestável comprometido (633.5 nm). Potências de até 40 mW foram necessárias para excitar a amostra acima da potência crítica para avalanche. As características acima descritas são fundamentais para a observação deste fenômeno não linear. A primeira etapa no processo de excitação da fluorescência observada em ~ 550 nm (<sup>4</sup>S<sub>3/2</sub> → <sup>4</sup>I<sub>15/2</sub>) é devido á absorção assistida por fônons do estado fundamental <sup>4</sup>I<sub>15/2</sub> para o estado <sup>4</sup>F<sub>9/2</sub>. A partir deste estado ocorre relaxação rápida para os estados <sup>4</sup>I<sub>13/2</sub> e <sup>4</sup>I<sub>11/2</sub>. Subseqüentemente ocorre absorção ressonante para estado <sup>4</sup>F<sub>5/2</sub> seguida de relaxação rápida para o estado <sup>4</sup>S<sub>3/2</sub>. Os comportamentos estacionário e transiente da fluorescência foram estudados detalhadamente e sua descrição teórica quantitativa foi feita através de equações acopladas envolvendo a população dos níveis participantes do processo. Além dos efeitos de relaxação espontânea foi também necessário considerar processos de relaxação cruzada envolvendo pares de átomos de Er<sup>3+</sup>. [1] de Araújo et al., em Trends in Chemical Physics (Research Trends, India, 1996) vol.4, p.59-74.

**Efeitos de "Espelho Térmico" em GaAs.**

MARCELO MARTINELLI, JOSÉ BRITO DE SOUZA, JOSÉ ROBERTO LEITE, RICARDO JOSUÉ HOROWICZ  
*Inst. de Física da Univ. de São Paulo*

O estudo do espelho térmico permite obter informações sobre propriedades térmicas e óticas do material, tais como o comprimento de difusão térmica e o coeficiente de absorção. Este efeito térmico pode mascarar efeitos óticos não-lineares correspondentes à variação do índice de refração e absorção (autofocalização, efeito Kerr, absorção de dois fótons, etc.). Estes efeitos não-lineares estão ligados à susceptibilidade não-linear de terceira ordem χ<sup>(3)</sup>. Para o estudo de espelhos térmicos empregamos a técnica de RZ-scan, desenvolvida para o estudo de não-linearidades óticas. Na técnica de RZ-scan a distorção de fase de um feixe gaussiano, induzida pelo efeito térmico ou por efeitos óticos não-lineares, é medida pela variação de intensidade no centro do feixe

refletido. A medida é feita em vários pontos ao longo de um feixe com incidência normal, varrendo uma região da ordem de alguns comprimentos de Rayleigh próximo ao foco do feixe. A curva resultante permite uma rápida análise do resultado, de modo que com uma técnica simples de um único feixe podemos realizar medidas de não-linearidades óticas e observação de efeitos térmicos. Com esta técnica, analisamos cristais de GaAs com um laser CW de Argônio (514,5 nm). As medidas permitem observar distorções de fase de  $\pi/35$  a  $\pi/6$  rad, correspondendo a uma expansão superficial variando entre 3,5 e 21,7 nm. Discutimos a possibilidade de observação do comportamento temporal do feixe refletido para aumentar a sensibilidade dos resultados obtidos. Este comportamento temporal pode ser empregado para distinguir efeitos térmicos de efeitos óticos não lineares, uma vez que o resultado obtido para estes é semelhante a um efeito térmico, diferindo no entanto em tempo de formação.

## ÓPTICA (Óptica Não-Linear) -- 12/06/97

### TRANSFERÊNCIA DE ENERGIA ENTRE IONS DE $Er^{3+}$ E $Tm^{3+}$ EM VIDROS FLUOROINDATOS CODOPADOS

WHUALKUER LOZANO BARTRA, CID BARTOLOMEU  
DE ARAÚJO

*Departamento de Física-UFPE*

YOUNES MESSADDEQ

*Instituto de Química-UNESP*

O estudo de terras raras dopados em vidros fluoroindatos tem atraído interesse nos últimos anos devido a sua aplicação em amplificadores óticos, lasers de conversão ascendente de frequência, e sensores. Uma das razões é que os fônons de maior energia nestes vidros ( $<500\text{ cm}^{-1}$ ) têm energia menor que em vidros silicatos ( $1000\text{ cm}^{-1}$ ). Isto reduz as taxas de decaimento não radiativo se a energia de separação entre os estados eletrônicos inicial e final envolvidos no processo de decaimento não-radiativo for maior que a energia de um fonon. O vidro usado tem a composição (mol %)  $(39-x-y)InF_3-20ZnF_2-16BaF_2-20SrF_2-2GdF_3-2NaF-1GaF_3-xErF_3-yTmF_3$ , ( $x=2; y=0.5, 1, 1.5, 2$ ). Anteriormente, estudamos as propriedades óticas destes vidros dopados com  $Pr^{3+}$  e  $Er^{3+}$  e mostramos o seu grande potencial para dispositivos de conversão de frequências [1,2] devido à grande eficiência dos processos de transferência de energia. Para conseguirmos eficiência máxima, podem também ser utilizados sistemas codopados. Neste trabalho utilizamos um laser de diodo cw, ( $\sim 5\text{mWatt}$ ), como fonte de excitação.

A frequência do laser correspondente a 790 nm está próxima de ressonância com as transições  $^4I_{15/2} \rightarrow ^4I_{9/2}$  do  $Er^{3+}$  e  $^3H_6 \rightarrow ^3F_4$  do  $Tm^{3+}$  e com transições entre estados excitados  $^4I_{13/2} \rightarrow ^2H_{11/2}$ ;  $^4I_{11/2} \rightarrow ^4F_{5/2}$ ,  $^4F_{3/2}$  e  $^3H_5 \rightarrow ^1G_4$  nos íons de  $Er^{3+}$  e  $Tm^{3+}$  respectivamente. As concentrações das amostras estudadas são 2% de  $Er^{3+}$  e 0.5;1;1.5;2% de  $Tm^{3+}$ . A introdução de 0.5% de  $Tm^{3+}$  dentro da amostra de 2% de  $Er^{3+}$  diminui a intensidade da fluorescência do nível  $^4S_{3/2} \rightarrow ^4I_{15/2}$ , mais aumenta em 8 vezes a intensidade da fluorescência do  $Er^{3+}$  devido à transição  $^4F_{9/2} \rightarrow ^4I_{15/2}$ . Todas as medidas foram realizadas a temperatura ambiente. A fluorescência emitida pela amostra foi analisada com um espectrômetro de 0.5m equipado com fotomultiplicadora, lock-in e computador para aquisição de dados. [1] de Araujo et al., Phys. Rev. B.50, 16219(1994) [2] de Araujo et al., Appl. Phys. Lett.68, 602(1996)

### LIFETIME MEASUREMENTS AND FREQUENCY UPCONVERSION IN $Tm^{3+}$ DOPED FLUOROINDATE GLASSES

ARANDI G. BEZERRA JR

*Departamento de Física, Centro Federal de Educação  
Tecnológica do Paraná*

J. F. MARTINS-FILHO, A. S. L. GOMES, CID. B. DE  
ARAÚJO

*Departamento de Física, Universidade Federal de  
Pernambuco*

Y. MESSADDEQ

*Instituto de Química, Universidade do Estado de São  
Paulo*

Amongst the recently discovered materials for photonics applications, fluoroindate glasses have been developed and studied as an important alternative to fluorozirconate glasses. The main attractive characteristics of the  $InF_3$ -based compounds are their stability against atmospheric moisture and low optical attenuation from 0.25mm to 8mm combined with the capability to incorporate large concentrations of rare-earth (RE) ions [1]. The composition of the studied samples was: (mol%)  $(39-x)InF_3-20ZnF_2-20SrF_2-16BaF_2-2GdF_3-2NaF-1GaF_3-xTmF_3$ . Two different experimental setups were employed. For the temporal measurements, a frequency tripled Q-switched Nd:YAG laser (355nm, 5Hz, pulse duration: 12ns) was the pump source. For the upconversion studies, wavelengths in the region 1064nm to 1180nm were generated from a single-pass fibre Raman source pumped by a cw/mode-locked Nd:YAG laser delivering 100ps pulses at 100MHz. Upconverted emission was observed at 360nm, 450nm, 475nm, 650nm, 700nm and 800nm (the visible light could be seen by the naked eye). The most intense emission was at 800nm, and it should be noted that this transition can be used for amplification at the first telecom window. A double exponential was required to account for fitting most of the temporal

data, the fast component corresponds to fluorescence mainly from interacting ions, whereas the slow decay corresponds to fluorescence from isolated ions or is due to ions which were excited via energy migration. The different upconversion mechanisms responsible for each emission line, under different pumping conditions, are analyzed. Since planar waveguides and optical fibers have been realized using fluorindate glasses, there is a potential application for blue/UV lasers using this upconversion scheme.

[1] Cid B. de Araújo, A. S. L. Gomes, L. H. Acioli, G. S. Maciel, L. de S. Menezes, L. E. E. de Araújo, Y. Messaddeq and M. A. Aegerter in Trends in Chemical Physics, ed. by J. C. Alexander (Research Trends, India, 1996) vol.4, pp59-73.

### DISCRIMINAÇÃO DE EFEITOS NÃO-LINEARES COM DIFERENTES TEMPOS DE RESPOSTA POR VARREDURA-Z RESOLVIDA EM FREQUÊNCIA

C. R. MENDONÇA, L. MISOGUTI, S. C. ZILIO  
*Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo*

A técnica de varredura-z permite medidas do índice de refração não-linear de diversos materiais, porém sua sensibilidade é limitada por efeitos lineares espúrios. Para eliminar tais efeitos pode-se usar um método baseado na análise espectral da evolução temporal da transmitância, denominado varredura-z resolvida em frequência, que permite medidas de modulação de fase correspondentes a distorção da frente de onda de  $\lambda/10^5$ . Em alguns materiais, as impurezas responsáveis pelas não-linearidades podem ocupar sítios cristalográficos diferentes e portanto exibirem diferentes propriedades ópticas. Neste caso tanto a magnitude quanto o tempo de resposta da não-linearidade dependem do sítio que se está observando. Além de não-linearidades de origem eletrônica, os materiais podem apresentar não-linearidades de origem térmica, induzida pelo aquecimento não-homogêneo da material. Este efeito manifesta-se através de dois processos distintos. Primeiramente temos um processo rápido que deve-se a absorção do calor e formação de uma lente térmica. Em seguida temos um processo lento de relaxação da lente térmica formada. De maneira geral, quando investigamos as propriedades ópticas não-lineares de um determinado material todos esses efeitos podem aparecer simultaneamente. Neste trabalho apresentamos um método que, fazendo uso da técnica de varredura-z resolvida em frequência, permite discriminar a contribuição de cada processo individualmente. Para demonstrarmos essa técnica realizamos medidas em um cristal de Alexandrita, onde o ion de  $Cr^{3+}$  ocupa dois tipos diferentes de sítios que exibem diferentes propriedades ópticas, além de um efeito térmico devido as al-

tas potências utilizadas. Propomos um modelo para os efeitos observados que ajustou-se aos dados experimentais, de forma que pudemos encontrar tanto o valor de  $n_2$  quanto o tempo de resposta da não-linearidade para cada efeito individualmente.

### Analysing the Measurement of Electro-Optical and Piezoelectric Coefficients in Biaxial Crystals

FREDERICO D. NUNES

*Departamento de Eletrônica e Sistemas - CT - UFPE*  
DANIEL V. MAGALHÃES, J. JOATAN RODRIGUES JR.,  
SÉRGIO C. ZILIO  
*Instituto de Física de São Carlos - USP*

This work is dedicated to analyse the experiments carried out to measure the elements of the electro-optical and piezoelectric tensors of biaxial crystals. In fact for the sake of having a more wide theoretical study of the biaxial crystals all the spacial groups related to biaxial crystals are presented and many spatial arrangements of electrical field applied to the crystal are considered. These effects were measured in some organic crystals (LAP, L-Threonine and L-Alanine) using both Mach-Zehnder and Michelson interferometers. The correctly interpretation of this measurements require to separate the influence of the electro-optical and piezoelectric effects, since both, material refractive index and crystal length, are simultaneously presented in some experimental cases. In these cases the measurements lead to an effective coefficient and in general no discussion is made about this sum of effects. To separate the two effects are necessary to measure the piezoelectric effect apart. This was done in our work and the experimental results are carefully discussed. In some cases, as in the orthorhombic crystals, the geometrical arrangement as reported by Sigelle[1] should not lead to measure the electro-optical coefficient. In this condition the coefficient was measured, however a more careful analysis indicate that only piezoelectric effect is taking place. Facts as this are discussed in the present work.

[1]-M.Sigelle and R.Hierle, J.Appl.Phys., Vol.52, No.6, June 1981,p.4199

Support: FAPESP, PRONEX/MCT/MEC

### Medida de "Enhanced RZ-scan" com Incidência Inclinada.

MARCELO MARTINELLI, BIAN SHAOPIING, RICARDO  
JOSUÉ HOROWICZ  
*Inst. de Física da Univ. de São Paulo*

A técnica de RZ-scan consiste em transladar uma amostra ao longo de um feixe gaussiano com incidência normal, medindo a variação de intensidade no centro do feixe refletido para diferentes posições da amostra ao longo do feixe. A variação de intensidade fornece informações sobre as distorções de fase e amplitude

no feixe gaussiano, provocadas por efeitos óticos não-lineares ou por efeitos térmicos. Podemos, com uma montagem simples de feixe único, medir estes efeitos. Este método permite a obtenção de resultados que pelo método convencional de Z-scan de transmissão não seriam alcançados, por se tratar de materiais de alto coeficiente de absorção. Com uma resolução de intensidade de 1 %, é possível medir mudanças no índice de refração ( $n$ ) e no coeficiente de absorção ( $\alpha$ ) da ordem de  $10^{-2}$ . Temos desse modo uma limitação da medida dos termos não-lineares de terceira ordem da susceptibilidade ( $\chi^{(3)}$ ) pela potência do feixe incidente. Propomos neste trabalho uma alteração no método, empregando um feixe com incidência oblíqua (Tilted RZ-scan) para obter um aumento na sensibilidade. Fazemos um estudo teórico da medida de Tilted RZ-scan, verificando como as curvas características se comportam para diferentes valores do ângulo de incidência. Estudamos ainda as mudanças provocadas por feixes de polarização paralela e perpendicular ao plano de incidência nestas mesmas curvas. Análises teóricas para semicondutores (GaAs) e vidros dopados com semicondutor (SDG) são realizadas, comparando a resposta deste método com a resposta obtida pelo método de RZ-scan com incidência normal. Mostramos um aumento de 10 a 100 vezes para ângulos de incidência próximos ao ângulo de Brewster. Consideramos ainda a possibilidade de realização prática de tais medidas e as limitações que o método proposto envolve.

#### Teia de luz

PATRICIA DUARTE PERES, PATRICIA MACEDO DA C. JORGE, RENATO DORIA

*Universidade Católica de Petrópolis - (UCP)*

Estamos nos primórdios de uma civilização baseada na luz. Assim um desafio torna-se de ao invés de compreender a luz como derivado, obtê-la como um foco original. Contudo para isso torna-se necessário inverter as equações de Maxwell. Desta maneira propõe-se em estudo de uma teoria de gauge sistêmica com caráter abeliano. Então a luz fica intuída como um campo de gauge genuíno conduzindo outros campos vetoriais através da expressão

$$A_{\mu I} \rightarrow A'_{\mu I} = A_{\mu I} + \partial_{\mu} \alpha$$

onde  $I$  significa um índice de sabor ( $I=1, \dots, N$ ). Resulta que as equações de Maxwell são estendidas e novas possibilidades surgem. A luz não é mais simplesmente uma onda eletromagnética derivada de oscilações de carga elétrica. A luz se torna uma fonte para diversos tipos de campos. Sendo o único absoluto medido experimentalmente a luz requeria uma reinterpretação mais profunda de atuar como causador original dos fenômenos. Novas leis invariantes de gauge são obtidas. A interpretação da luz como o centro dos fatos físicos nos conduz a uma extensão das leis de Gauss, Ampère, Faraday

e ausência de monopolos. A primeira consistência esta numa origem não heurística para os vetores de polarização e magnetização. Novos efeitos puros de luz são apontados. O fato de surgirem regras de Feynman com três e quatro vértices de fótons, permite uma nova descrição. Fótons autointeragentes a nível de árvore, bolas de fótons, mudanças de frequência, propagação com velocidades acima da luz (mantendo a Hamiltoniana positiva) são efeitos possíveis.

#### PHOTOREFRACTIVE SATURABLE KERR-TYPE NONLINEARITY IN PHOTOVOLTAIC CRYSTALS

SHAOPING BIAN, JAIME FREJLICH

*Universidade Estadual de Campinas*

KLAUS H. RINGHOFER

*University of Osnabrück*

Photorefractive spatial soliton formations has been the interesting topic recently because the strong photorefractive self-focusing/defocusing can be achieved at low power (microwatts per square centimeter or even much smaller) CW laser irradiance. Spatial solitons have been observed in  $Sr_xBa_{1-x}Nb_2O_6$  (SBN),  $Bi_{12}TiO_{20}$  (BTO),  $LiNbO_3$  and recently in InP semiconductor. In these materials the nonlinear properties with drift or photovoltaic nature play an important role in determining the self-focusing strength and soliton state. In this paper, we derive the equation describing the refractive index perturbation in photovoltaic photorefractive crystals induced by a focused laser beam and an incoherent uniform illumination. We show that the form of the nonlinear equation will depend on the external circuit conditions. Under short-circuit condition the equation shows a saturable Kerr-type nonlinearity. The saturable intensity can be controlled by the incoherent uniform illumination and the self-focusing/defocusing and the photorefractive spatial soliton formation can be optimized. Fast photorefractive spatial soliton formation without oversaturation can be realized by keeping the background and soliton irradiances at a similar higher value. The approximate solution of the transient equation has a single exponential response time. For an open-circuited crystal, the saturable intensity can not be controlled by the incoherent uniform illumination. Z-scan experiments in an iron doped lithium niobate crystal are carried out using a 532 nm wavelength laser line to evaluate its photorefractive self-lensing properties and to measure its photovoltaic field. The experimental results are in good agreement with that obtained from an independent holographic method. The experimental observation of the dynamic evolution of the self-lensing process also supports our theoretical prediction.

## ESTIMATION FOR PHOTOVOLTAIC FIELD IN $\text{LiNbO}_3$ CRYSTAL BY Z-SCAN

SHAOPING BIAN

*Universidade Estadual de Campinas*

In photorefractive materials the drift or photovoltaic nonlinearities play an important role in determining the self-focusing strength and soliton state. In order to theoretically and experimentally study the photorefractive spatial solitons the experimental characterization of the nonlinearities is necessary. The most suitable experimental tool for this purpose is the Z-scan technique, the efficiency of which was demonstrated for thermal and conventional Kerr nonlinearities. In this paper, based on the saturable Kerr-type nonlinearity for photovoltaic photorefractive crystals under short-circuit condition, the general (on- and off-axis) Z-scan formula for one-dimensional Gaussian laser beam is derived. The far-field wave amplitude distribution is calculated by analysing the propagation of Gaussian beam wavefront with spatial phase perturbation arising from the photovoltaic nonlinearity. Z-scan experiments in an iron doped lithium niobate crystal are carried out using a

532 nm wavelength laser line to evaluate its photorefractive self-lensing properties and to measure its bulk photovoltaic field. The experimental results are in good agreement with that obtained from an independent holographic method. Our theoretical analysis and experimental results show that Z-scan is an interesting technique for studying self-guiding effect in PR media with bulk photovoltaic effects. The Z-scan technique could be used to detect and measure the bulk photovoltaic effect in pyroelectric crystals with photorefraction. Since the diffusion effect in this self-lensing formation configuration can be neglected. This is in contrast to the holographic technique where the diffusion and photovoltaic field, if exists, are coupled.

**Palestra Convidada – 13/06/97**

---

## BOSE-EINSTEIN CONDENSATION OF LITHIUM - IT'S NOT JUST ANOTHER CONDENSATE!

R. G. HULET, C. A. SACKETT, C. C. BRADLEY, M. WELLING

*Rice University, Houston, TX 77005, USA*

Einstein proposed in 1925 that a gas of non-interacting atoms could undergo a phase-transition into a new state of matter, if the gas was sufficiently cold and dense. In 1995, three groups succeeded in creating dilute atomic gases that were only a few-billionths of a degree above absolute zero, and Einstein's predicted "Bose-Einstein condensation" (BEC) did occur [1-3].

In our lithium experiment [2], atoms are confined by a permanent magnet trap, which is loaded using laser cooling. Atoms are further cooled by evaporation, resulting in temperatures in the range of 100 nK. A phase-contrast technique is used to image the atom clouds. BEC is revealed by the presence of a spatially localized peak in the density distribution.

Although these gases are dilute, so that the interactions between atoms is "weak", the effect of the interactions can be profound. In the case of  $^7\text{Li}$ , attractive interactions tend to cause the gas to collapse and to prevent BEC. However, the attractive forces can be balanced by the quantum pressure of confinement for a trapped gas. This balance is effective up to a limited number of condensate atoms. Our measurement of a limit of approximately 1000 atoms [4] is consistent with mean-field theory predictions.

The  $^7\text{Li}$  condensate is unique in its effectively attractive interactions. A condensate with an atom number near the stability limit is believed to collapse via macroscopic tunneling of the entire condensate. I will discuss our progress in observing this collapse. I will also discuss prospects for studying a degenerate Fermi gas of  $^6\text{Li}$ , including a possible BCS-like phase transition.

1. M. H. Anderson et al., *Science* 269, 198 (1995).
  2. C. C. Bradley et al., *Phys. Rev. Lett.* 75, 1687 (1995).
  3. K. B. Davis et al., *Phys. Rev. Lett.* 75, 3969 (1995).
  4. C. C. Bradley, C. A. Sackett, and R. G. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* 78, 985 (1997).
-

## ÓPTICA (Óptica Quântica)

### ÓPTICA (Óptica Quântica) —

11/06/97

#### ESPECTROSCOPIA COM FEIXES GÊMEOS DE UM OPO

PAULO HENRIQUE SOUTO RIBEIRO, CATHERINE SCHWOB, AGNES MAITRE, CLAUDE FABRE

*Laboratoire Kastler Brossel*

O processo de conversão paramétrica descendente, pode ser amplificado se o cristal não-linear for colocado em uma cavidade óptica. Neste caso, teremos um oscilador paramétrico óptico (OPO). Através de OPOs, podemos produzir feixes gêmeos de luz de intensidade consideravelmente maior do que no processo de emissão espontânea. Estes feixes intensos são também correlacionados a nível quântico e quando os detectamos através de fotodiodos e fazemos a diferença entre suas fotocorrentes, obtemos um sinal cujo ruído é inferior ao limite clássico conhecido como *shot noise*. No presente trabalho, utilizamos os feixes gêmeos de uma OPO para fazer um experimento de espectroscopia a dois fótons no potássio. Um dos feixes é detectado diretamente por um fotodiodo. O seu conjugado passa dentro de uma célula contendo potássio. Na ausência de absorção, faremos a diferença entre as fotocorrentes de cada um dos detectores dos feixes *signal* e *idler* e teremos um sinal que será nosso *zero*. Se utilizássemos um feixe de laser e o dividíssemos em duas partes iguais e fizéssemos a diferença entre suas fotocorrentes de modo análogo, teríamos também um sinal *nulo*. A diferença entre estes dois *zeros*, é que aquele obtido com os feixes gêmeos tem um nível de ruído inferior, devido às correlações quânticas entre os feixes gêmeos. Devido à absorção de fótons de um dos feixes pelo meio, desequilibramos a diferença e podemos ter assim, um sinal proporcional a esta absorção. Sendo assim, é importante que o nosso *zero* seja de boa qualidade e baixo ruído. Resultados preliminares mostram o sinal de absorção a dois fótons com feixes clássicos e com feixes gêmeos com redução de ruído quântico em níveis que podem ser ainda melhorados. Esta redução de ruído quântico pode chegar idealmente até 100%, sendo que já se observou até 87% com detecção direta dos feixes. Isto mostra que podemos utilizar as OPOs como eficientes fontes de luz sintonizável para fazer espectroscopia a dois fótons.

#### Medida da Área de Coerência da Luz no Estado de Dois Fótons

EDUARDO JORGE DA SILVA FONSECA, CARLOS HENRIQUE MONKEN, SEBASTIÃO DE PÁDUA

*Universidade Federal de Minas Gerais*

GERALDO ALEXANDRE BARBOSA

*Universidade Federal de Alagoas*

Interferência de luz no estado de um fóton, quando este atravessa uma fenda dupla de Young, já foi estudado tanto experimentalmente como teoricamente. Diferentemente, a interferência de luz no estado de dois fótons quando incididos em uma fenda dupla de Young, só tem sido investigado teoricamente. Nesse trabalho apresentamos um estudo experimental da interferência de Young com luz no estado de dois fótons. Um feixe de laser de criptônio, com potência de 200 mW e emitindo em  $\lambda = 4131 \text{ \AA}$ , é incidido em um cristal não linear de  $\text{LiIO}_3$ , para gerar a luminescência paramétrica de conversão descendente. A conversão descendente é do tipo I, onde um fóton na região do violeta do espectro visível, de polarização vertical, é convertido em dois outros com polarização horizontal. Da luz gerada, selecionamos feixes gêmeos degenerados com comprimentos de onda  $\lambda = 8262 \text{ \AA}$  que emerge do cristal não linear a um ângulo de  $34^\circ$  com direção do feixe de bombeio. Luz

no estado de dois fótons é produzida quando fótons de mesma frequência gerados através da luminescência paramétrica percorrem caminhos de comprimentos iguais e são incididos em um divisor de feixes 50/50. Neste caso, observa-se uma diminuição brusca no número de fótons coincidentes detectados na saída do divisor de feixes. Quedas de 80% foram

observadas. Uma vez gerados os estados de dois fótons, incide-se um dos feixes, da saída do divisor em uma fenda dupla de Young. Estudamos as propriedades de coerência transversal da luz neste estado.

#### TRANSFERÊNCIA DE ESPECTRO ANGULAR E FORMAÇÃO DE IMAGENS QUÂNTICAS NA CONVERSÃO PARAMÉTRICA DESCENDENTE

CARLOS MONKEN, SEBASTIÃO DE PÁDUA

*UFMG*

Os estados de pares de fótons gerados pela conversão paramétrica descendente têm sido amplamente utilizados nos últimos dez anos em diversos experimentos de óptica quântica. Alguns estudos já foram feitos sobre as propriedades de coerência transversal dos estados de dois fótons e alguns efeitos interessantes, sem análogo

clássico, já foram descobertos. Em geral, o feixe bombeador do cristal não-linear é gaussiano, proveniente de um laser. Neste trabalho, são exploradas as possibilidades oferecidas por outros perfis para o feixe de bombeamento, obtidos com o auxílio de máscaras e lentes. Será mostrado que o espectro angular do feixe bombeador é transferido para o estado entrelaçado de dois fótons, também conhecido como bifóton. A transferência de espectro angular permite que se crie imagens quânticas, isto é, imagens que só aparecem nas correlações de quarta ordem do campo eletromagnético, diferentes daquelas já conhecidas na literatura. As condições para a observação de tais imagens levam a relações entre as distâncias dos detectores ao cristal não-linear, que são análogas às da formação de imagens em óptica geométrica. Como aplicações, podem ser citadas a transmissão criptográfica de imagens e a possibilidade de se fazer opticamente a convolução de funções de duas variáveis. Serão mostrados resultados experimentais obtidos no laboratório de óptica quântica da UFMG.

#### Quantum Communication: *Tetrat* coding

G. A. BARBOSA

*Departamento de Física—Universidade Federal de Alagoas,  
Maceió 57072-970 AL Brazil*

In this work it is shown that an orthogonal *tetrat* basis—at photon level—can be generated with two optical parametric down converters and identified with a multi-port detection system for coincidences. This scheme provides a gain of 2 over the usual coding in bits. The information is assigned to each photon pair using a *single* conjugate beam of the parametric down conversion. This shows an alternate scheme to the one proposed by C. H. Bennett and S. J. Wiesner [Phys. Rev. Lett. **69**, 2881 (1992)] to generate *tetrat* bases. This new scheme is also able to generate singly polarized pair states, and in this way, the same detection system utilized by Mattle et al. [Phys. Rev. Lett. **76**, 4656 (1996)] to detect a *trit* basis can also detect all *tetrat* elements.

Although a *tetrat* basis could be constructed with classical light beams, as one decreases the number of photons in each beam down to a few photons, no classical source could produce the necessary time correlation between photons to achieve the potentiality presented by down conversion light sources that emit photon pairs. Photons from a classical source have Mandel's parameter  $Q \geq 0$  while a twin photon source has  $Q < 0$ . This is a crucial point that excludes classical sources as generators of a *tetrat* basis, at photon level.

With this scheme, a coding with density

$$D = \frac{4 \text{ units of information (=tetrat)}}{(1 \text{ manipulated particle} + 1 \text{ untouched particle})} = 2$$

is obtained, providing the maximum density possible of

assigning two bits of information per photon, a density that cannot be achieved with classical fields.

#### Physical interpretation of Monte Carlo Wave-function and Stochastic Schrödinger equation methods for cavity quantum electrodynamics

TARSO B. L. KIST

*Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Caixa Postal 15051, 91501-970 Porto Alegre RS, Brasil.*

M. ORSZAG

*Facultad de Física, Pontificia Universidad Católica de Chile, Casilla 306, Santiago, Chile.*

L. DAVIDOVICH

*Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Caixa Postal 68528, 21945-970 Rio de Janeiro RJ, Brasil.*

The evolution of dissipative systems in Quantum Optics is frequently treated by master equation techniques. Alternatively, one can use Monte Carlo Wave-function or Stochastic Schrödinger equation methods. Even though these methods can be shown to be formally equivalent to the solution of the master equation, they are often regarded as mathematical tricks, with no relation to a concrete physical evolution of the system. The advantage of using them is that one has to deal with state vectors, instead of density matrices, thus reducing the total amount of matrix elements to be calculated. In this work, we consider the possibility of giving a physical interpretation to these methods, in terms of continuous measurements made on the evolving system. We show that physical realizations of the two methods are indeed possible, for a mode of the electromagnetic field in a cavity interacting with a continuum of modes corresponding to the field outside the cavity. Two schemes are proposed, consisting of a mode of the electromagnetic field interacting with a beam of Rydberg two-level atoms. In these schemes, the field mode plays the role of a small system and the atomic beam plays the role of a reservoir (infinitely larger number of degrees of freedom) at finite temperature, the interaction between them being given by the Jaynes-Cummings model. With this model, the drift terms and also the noise terms in the equations are shown to have very simple interpretations. The noise terms result from the exchanges of energy quanta between the small system and the reservoir while the drift terms result from the Hamiltonian evolution plus the effect of the measurement over the reservoir variables. A compact Stochastic Schrödinger equation for the Monte Carlo Wave-Function procedure is also proposed.

### Quantum Theory of a Thresholdless Laser

IGOR PROTSENKO, LUIZ DAVIDOVICH  
Universidade Federal do Rio de Janeiro

Recent experiments with microcavity laser led to the re-definition of a laser threshold. The cavity of such laser is so small that the spontaneous and stimulated emission occurs a small number of modes. In this case the semiclassical generation threshold is very small, which is important for practical applications. The behavior of such "thresholdless" lasers requires a full-quantum description. Former studies of thresholdless lasers use phenomenological approaches based on rate equations with extra terms simulating spontaneous emission into the generation mode. In this work, we present a quantum theory of a thresholdless laser.

Our method is based on the assumption that quantum fluctuations in the population inversion are negligibly small below and near the threshold. We solve operator equations for the field  $a(t)$  and polarisation  $P(t)$ , where the mean value steady-state population inversion  $\Delta_s$  appears as an unknown parameter. Once  $a(t)$  and  $P(t)$  are known,  $\Delta_s$  can be obtained from the mean value steady-state equation.

We investigate steady-state solutions, the field spectrum and the coherence time of a thresholdless laser. All quantities change smoothly with the increase of the pump parameter. The coherence time increases rapidly even without population inversion in the laser medium. Results are applicable to microcavity and microsphere lasers.

### Cavando Buracos no Espaço de Fock

BASILIO BASEIA

Instituto de Física/USP - S. Carlos

MILED H. Y. MOUSSA

Departamento de Física/UFS-Car

VANDERLEI SALVADOR BAGNATO

Instituto de Física/USP - S. Carlos

Segundo um resultado de Mandel e Wolf[1], dado um estado genérico  $\hat{\rho}$  de um campo luminoso quantizado, então  $p_n = \langle n | \hat{\rho} | n \rangle = 0$  corresponderá a um estado não-clássico, sendo puramente quântico. Recentemente, C. T. Lee [2] demonstrou que retirando a componente de vácuo,  $|n=0\rangle$ , dum estado genérico, este ficará o mais não-clássico possível. Seguindo essa linha de estudo, mostramos neste trabalho que podemos cavar buracos no espaço de Fock, através de zeros na distribuição  $p_n$ , obtendo, como consequência, estados puramente quânticos. Propriedades não-clássicas exibidas nessa situação poderão ser investigadas. A aplicação desse procedimento como registro computacional - à maneira da aplicação de buracos produzidos em linhas espectrais [3] é discutida. Alguns estados, extensivamente investigados na literatura, são obtidos como casos particulares do presente procedimento, como nos casos dos estados coerentes par e ímpar. A geração deste

estado enquadra-se no objeto da "engenharia quântica" de estados[4] e a leitura de buracos na distribuição  $p_n$  poderia ser implementada no prisma quântico[5], onde a deflexão atômica depende da componente  $|n\rangle$ .

[1] L. Mandel, E. Wolf, "Optical Coherence and Quantum Optics", (Cambridge, Univ. Press (1995)), p. 543.

[2] C. T. Lee, Phys. Rev. A52, 3374 (1975); A. F. Lima e B. Baseia, Phys. Rev. A54, 4589 (1996).

[3] W. E. Moerner, W. Lenth e G. C. Bjorklund, "Persistent Spectral Hole-Burning: Science and Applications", Ed. W. E. Moerner (Springer-Verlag, Berlin (1988)), p. 251.

[4] K. Vogel, V. M. Akulin e W. P. Schleich, Phys. Rev. Lett.71, 1816(1993).

[5] P. Domokos, P. Adam, J. Janszky e A. Zeilinger, Phys. Rev. Lett.77, 1663(1996).

## ÓPTICA (Óptica Quântica) - 13/06/97

### MEDIAS MACROSCÓPICAS EM ELETRODINÂMICA QUÂNTICA EM MEIOS MATERIAIS

SERGIO M. DUTRA, KYOKO FURUYA  
UNICAMP

Tratamos do problema de se é possível descrever o efeito dos átomos de um meio material na radiação eletromagnética apenas em termos de uma constante dielétrica, no regime em que o campo eletromagnético tem que ser descrito quanticamente. Usando um modelo simples para um meio linear sem absorção, partimos de primeiros princípios e determinamos os limites de validade das aproximações necessárias para a obtenção de tal teoria; o análogo quântico da eletrodinâmica clássica macroscópica. Esta teoria é derivada aqui a partir de uma descrição fundamental e microscópica do meio usando a eletrodinâmica quântica, em termos dos seus átomos constituintes no vácuo, tomando-se medias macroscópicas das variáveis dinâmicas. A condição de validade da aproximação macroscópica é obtida como a condição para que a contribuição dos átomos do meio para o ruído quântico do campo seja desprezível. Mostramos que a media macroscópica é compatível com a teoria quântica e não implica em uma suavização das flutuações quânticas intrínsecas do campo. Embora nossa teoria seja baseada em um modelo unidimensional simples de uma cavidade monomodo, ela é capaz de descrever a dependência da constante dielétrica com a frequência.

### Medida direta da função de Wigner

LUIZ GUILHERME LUTTERBACH, LUIZ DAVIDOVICH  
Universidade Federal do Rio de Janeiro

O avanço nas técnicas de manipulação de estados quânticos tem motivado o desenvolvimento de métodos de reconstrução da matriz densidade. A proposta original de tomografia quântica [1] não se adequa a sistemas como armadilhas de íons e cavidades supercondutoras, fundamentais nesse tipo de experiência. Apresentamos neste trabalho um método bastante simples para a medida direta da função de Wigner correspondente a um modo do campo eletromagnético em uma cavidade ou ao estado vibracional de um íon em uma armadilha. A função de Wigner é uma das representações da matriz densidade mais utilizadas não só por ser útil no cálculo de médias de produtos de operadores em ordem simétrica[2], mas também por colocar em evidência o caráter quântico do campo. No caso de cavidades, a medida envolve o deslocamento do campo na cavidade, através da injeção de um campo coerente na mesma, e a detecção do estado final de um átomo de Rydberg enviado através da cavidade, e inicialmente colocado em uma superposição coerente de dois estados que interagem dispersivamente com o campo deslocado na cavidade. Em armadilhas de íons, mede-se o estado interno do íon (que pertence a um sub-espço de dimensão dois correspondente à estrutura hiperfina do estado fundamental), após a aplicação de uma seqüência adequada de feixes de laser. Pode-se mostrar que a diferença das probabilidades de encontrar o átomo (ou íon) em cada um dos dois estados fornece diretamente o valor da função de Wigner no ponto desejado. Diferente de propostas anteriores, esse método não envolve operações matemáticas complexas nem a detecção de muitos átomos, além de ser insensível a limitações na eficiência de detecção.

[1] K. Vogel e Risken, Phys. Rev. A **40** 2841 (1989).

[2] K. E. Cahill e R. J. Glauber, Phys. Rev. **177** 1882 (1969).

### ZENO EFFECT IN PARAMETRIC DOWN-CONVERSION REVISITED

J. MIGUEL HICKMANN, SOLANGE B. CAVALCANTI,  
GERALDO A. BARBOSA  
UFAL

We propose a multimode theory to demonstrate the so-called Zeno effect when a light laser beam undergo parametric down conversion. This effect has been studied in various physical systems such as atomic transitions, double-well potentials and neutron spin dynamics. It consists of the inhibition of the temporal evolution of dynamical systems when the observation of such evolution is attempted. In optical systems, the effect has been investigated within a monomode theory, where a  $\xi^{(2)}$  cristal of size  $L$  is divided in  $N$  slices and exposed to a classical field to produce pairs of signal and idler

photons via spontaneous parametric down-conversion. Based on the fact that a finite size cristal necessarily produces a multimode field we argue that one is not able to arrive at a definitive conclusion on the existence of the effect in such systems via a monomode theory. In this way we have developed a multimode theory to this problem where we find the average number of photons that are emitted by the cristal and show it to be proportional to  $\frac{1}{N}$ . Such dependence implies that in the limit  $N \Rightarrow \infty$  there is a complete inhibition of emission as which is a signature of the Zeno effect.

### Um estudo da variação da distribuição de fótons em processos de absorção e emissão de M-fótons causada pela a perturbação de um fóton

ELISABETH DE CASTRO CAPARELLI, VIKTOR  
DODONOV, SALOMON SYLVAIN MIZRAHI  
UFSCAR

Neste trabalho nós obtivemos as soluções assintóticas, numéricas e analíticas, dependentes do tempo para a função de distribuição de fótons que é dada pelo elemento de matriz diagonal do operador densidade da equação principal, para o campo quantizado de um modo interagindo com os átomos do reservatório<sup>[1,2]</sup>. Este estudo foi feito considerando o caso onde um forte processo de m-fótons é perturbado por um processo de um fóton. A solução analítica foi calculada para tempos maiores que o tempo de relaxação de m-fótons, e as probabilidades obtidas mostraram uma lenta variação com função do tempo tendendo a distribuição estacionária. Esta variação é determinada pela razão entre os coeficientes de absorção e emissão de todos os processos envolvidos, e não pelas condições iniciais. Verificamos também, que houve uma grande concordância das soluções assintóticas aproximadas em comparação com o cálculo numérico exato da equação principal. Deste modo comprovamos a validade do método utilizado para obter as soluções assintóticas aproximadas no caso dos processo com um número máximo de fótons  $M$  dominantes sobre os demais. O método proposto pode ser estendido para  $M$  maiores, porém é importante ressaltar que esta aproximação não pode ser obtida no caso oposto, ou seja, quando um processos de  $k$ -fótons é perturbado por um fraco processo de ordem  $M$ ,  $M > k$ . Os cálculos foram feitos nos casos específicos onde temos processos de emissão insaturada e no máximo dois fótons e três fótons ( $M=2$  e  $M=3$ ).

[1] H. Paul, Rev. Mod. Phys. **54**(1982) 1061

[2] J. Perina, Quantum Sattistics of Linear and Nonlinear Optical Phenomena (Kluwer, Dordrecht, 1991)

## ÓPTICA (Óptica Quântica) – 13/06/97

### CONVERSÃO PARAMÉTRICA DESCENDENTE NA PRESENÇA DE ESPELHOS E COERÊNCIA INDUZIDA SEM EMIÇÃO ESTIMULADA

PAULO HENRIQUE SOUTO RIBEIRO

*Laboratoire Kastler Brossel*

GERALDO ALEXANDRE BARBOSA

*UFAL*

Feixes de luz independentes, produzidos em diferentes cristais não-lineares através da conversão paramétrica descendente, podem ser feitos mutuamente coerentes quando seus conjugados são alinhados. Este fenômeno é conhecido como coerência induzida sem emissão estimulada. Este tipo de fenômeno é compreendido em termos da indistinguibilidade entre os feixes *signal* e *idler* produzidos nos diferentes cristais, decorrente do alinhamento entre eles. Por outro lado, podemos produzir franjas de interferência, quando a conversão paramétrica espontânea se dá na presença de espelhos que criam condições de contorno apropriadas para o processo. Neste caso, diz-se que a interferência é consequência das condições de contorno impostas pelos espelhos. No presente trabalho, mostramos que a utilização de espelhos para produção de franjas de interferência pode ser entendida como um processo de coerência induzida sem emissão estimulada. Uma teoria multimodo baseada na coerência induzida sem emissão estimulada é empregada para descrever o processo de conversão descendente na presença de espelhos. Calculamos as visibilidades das franjas em intensidade e coincidências, mostrando a dependência nas propriedades de coerência de cada feixe envolvido. Em cada caso, estas visibilidades dependem de produtos entre funções de coerência dos feixes *signal*, *idler* e *pump*. Cada função de coerência, por sua vez depende de intervalos de tempo que compreendem os tempos de propagação relativos às distâncias entre o cristal e cada um dos espelhos. Nossos resultados se mostram consistentes com as observações experimentais, descrevendo em detalhe a dependência nas posições de cada espelho. Eles explicam ainda o fato de que o efeito se produz mesmo se o laser de bombeamento possui um comprimento de coerência muito menor do que a distância entre o cristal não-linear e os espelhos.

### TELEPORTATION WITH IDENTITY INTERCHANGE OF QUANTUM STATES

MILED HASSAN YOUSSEF MOUSSA

*Departamento de Física - UFSCar*

Recently, Bennett *et al.* [1] have suggested an scheme for teleporting an unknown quantum state via dual

quantum and Einstein-Podolsky-Rosen channels. The principle of teleportation is outlined by combining the possibility of entanglement between two separated system and the projection postulate. Besides teleportation other manifestations of nonlocality include the possibility of quantum cryptography [2] and quantum computers [3]. Experimental schemes have been proposed for the implementation of teleportation which rely on recent advances both in microwave and optical regimes of cavity QED phenomena [4]. Through these new techniques coherent atom-field interaction can be made to dominate over dissipative processes due to cavity losses and atomic spontaneous emission. In this work we show that, beyond teleportation, it is possible to realize the interchange of states between two quantum systems, once their states are simultaneously teleported from one to another. The experimentally feasible scheme here presented, employing cavity QED phenomena, can be used to realize this 'identity interchange' process between entangled particles as well, and even to teleport an entanglement from one particle system to another.

1) C. H. Bennett, G. Brassard, C. Crépeau, R. Jozsa, A. Peres, and W. Wootters, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1895 (1993).

2) A. E. Ekert, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 661 (1991); C. H. Bennett and S. J. Wiesner, *ibid.* **69**, 2881 (1992); A. Ekert, J. G. Rarity, P. R. Tapster, and G. M. Palma, *ibid.* **69**, 2881 (1992), and references therein.

3) J. I. Cirac and P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4091 (1995); A. Barenco, D. Deutsch, A. Ekert, and R. Jozsa, *ibid.* **74**, 4083 (1995); T. Sleator and H. Weinfurter, *ibid.* **74**, 4087 (1995); H. F. Chau and F. Wilczek, *ibid.* **75**, 748 (1995).

4) L. Davidovich, N. Zagury, M. Brune, J. M. Raimond, and S. Haroche, *Phys. Rev. A* **50**, R895 (1994); J. I. Cirac and A. S. Parkins, *ibid.* **50**, R4441 (1994).

### RESONANCE GENERATION OF PHOTONS IN CAVITIES WITH VIBRATING WALLS

VIKTOR DODONOV

*Universidade Federal de São Carlos*

We present analytical solutions to the problem of photon creation from vacuum in a cavity with vibrating walls due to the nonstationary Casimir effect, in the case when the frequency of vibrations equals twice the frequency of some unperturbed electromagnetic mode. In the one-dimensional case (Fabry-Perot's resonator), the stationary rate of photon generation in the principal mode is proportional to the product of the frequency by the dimensionless amplitude of oscillations, whereas the total amount of photons created in all the modes increases in time as  $t^2$ , and the total energy grows exponentially. The number of photons in the resonant mode of a 3D-cavity increases in time exponentially, and the field

appears in a highly squeezed state with a strongly oscillating photon distribution function. For the frequency of the order of 10 GHz and for the amplitude of wall's oscillations about  $10^{-10}$  cm, up to several hundreds (in the 1D configuration) or even thousands (in the 3D cavity) photons can be produced in the resonance case. An account of losses shows that the necessary cavity's  $Q$ -factor must exceed the value  $10^{10}$ , which was already achieved in recent experiments in cavity electrodynamics. Consequently, the effect can be observed, in principle, at the current experimental level. The analysis of the problem of detecting the created photons shows that the interaction between a detector and the field mode can change significantly the photon distribution inside the cavity, since both the detector and the field mode occur in highly mixed (but nonthermal) quantum states. Explicit analytical solutions are obtained also for the 1D model, when the wall oscillates at the frequency coinciding with the intermode interval in the equidistant eigenfrequency spectrum of the unperturbed field. Then the total number of photons in all the modes is conserved in time, while the total energy grows exponentially, resulting in cooling the lowest modes at expense of pumping the highest ones.

#### Competition between one- and two-photon absorption/emission processes: new exact solutions

VIKTOR DODONOV, SALOMON MIZRAHI  
*Universidade Federal de São Carlos*

We give new exact analytical solutions (in terms of the confluent hypergeometric function and the Jacobi polynomials) of the master equation for the diagonal density matrix elements of the one-mode quantized field, when both one- and two-photon absorption and emission processes are present. Explicit expressions for the factorial moments of all the orders are found. The special cases of the initial Fock's, binomial, negative binomial, thermal, and coherent states, as well as of their even/odd counterparts, are considered in detail. The existence of the universal time dependent distribution of initially highly excited states is discovered. The transition time from any initial state to the ground one is finite even for highly excited states. Although the final stage of evolution is characterized by the sub-Poissonian statistics for any initial state, Mandel's parameter is very sensitive to small differences in high-order factorial moments at the intermediate stage. In the case of completely saturated two-photon emission and a weak one-photon coupling, the stationary distribution is a mixture of even and odd coherent distributions, whose relative weights are determined by the internal characteristics of the "one-photon" and "two-photon" reservoirs. If unsaturated two-photon absorption is strong enough, the steady state exhibits a sub-Poissonian photon statistics, but Mandel's parameter cannot be less

$-1/3$ . However, the distribution depends essentially on the temperature of the "one-photon bath". For weak two-photon absorption, the stationary distribution is Gaussian, provided that the temperature of the "one-photon" bath is high enough. For an inversely populated "one-photon" bath, Mandel's parameter is close to  $1/2$ .

#### Propriedades estatísticas de campos eletromagnéticos dentro e fora de cavidades dissipativas

MARCELO FRANÇA, LUIZ GUILHERME LUTTERBACH,  
LUIZ DAVIDOVICH  
*Universidade Federal do Rio de Janeiro*

O tratamento rigoroso de campos eletromagnéticos em cavidades óticas e de microondas envolve considerações detalhadas das condições de contorno nos espelhos, com os modos do campo eletromagnético se estendendo por todo o universo [1-3]. As noções de campo interno e externo surgem no tratamento aproximado em que são considerados sistemas independentes de osciladores harmônicos com alguns modos discretos para o campo interno e uma coleção contínua de osciladores harmônicos representando os modos externos. O mecanismo de interação é introduzido fenomenologicamente através de processos que destroem um fóton dentro e criam outro do lado de fora da cavidade, ou *vice-versa*, e é responsável pelos fenômenos de dissipação e descoerência. Um problema importante concerne à conexão entre as propriedades estatísticas do campo eletromagnético dentro e fora da cavidade. Mostramos neste trabalho que a aproximação dos operadores para os modos do universo por operadores vestidos que diagonalizam a hamiltoniana de Collet-Gardiner [4] permite obter expressões para a evolução temporal dos operadores dentro e fora da cavidade. Essa expressão mostra que os operadores que inicialmente são independentes se tornam correlacionados em tempos posteriores. No caso em que os estados iniciais interno e externos são decorrelacionados, é possível a dedução de uma expressão geral conectando os estados quânticos interno e externo por meio de suas funções características. Na situação em que o estado externo em  $t = 0$  é o vácuo, o tratamento fornece o mesmo resultado para a evolução do estado interno que o obtido pelo método da equação mestra, além de fornecer também a evolução para os estados externos.

- [1] B. Baseia e H. M. Nussenzweig, *Optica Acta* **31** (1984).
- [2] J. C. Penaforte e B. Baseia, *Phys. Rev* **A30** (1984).
- [3] M. Ley e R. Loudon, *J. Mod. Optics* **34** 227 (1987).
- [4] C. W. Gardiner e M. J. Collet, *Phys. Rev.* **A31** 3761 (1985).

## PERIODICIDADE NO MODELO DE JAYNES-CUMMINGS DEPENDENTE DA INTENSIDADE.

DAGOBERTO DA SILVA FREITAS, JOSÉ ANTONIO ROVERSI, ANTONIO VIDIELLA BARRANCO  
UNICAMP

O modelo de Jaynes-Cummings (JCM) descreve a interação de um modo do campo quantizado de radiação com um átomo, isolado, de dois níveis na assim chamada aproximação de onda girante. Dentro deste modelo é discutido o caso em que a interação de acoplamento depende da intensidade do campo. A dinâmica desse sistema é descrita pelo Hamiltoniano

$$\hat{H} = \omega \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{\omega}{2} \sigma_z + g (\hat{R}^\dagger \sigma_- + \hat{R} \sigma_+), \quad (1)$$

onde  $\omega$  é a frequência de transição atômica,  $g$  é a constante de acoplamento átomo-campo,  $\hat{R} = \hat{a} (\hat{a}^\dagger \hat{a})^{1/2}$ ,  $\hat{a} (\hat{a}^\dagger)$  é o operador de aniquilação (criação) do campo,  $\sigma_z$  é o operador de inversão atômica, e  $\sigma_+$  ( $\sigma_-$ ) é o operador de levantamento (abaixamento) do estado atômico.

Investigamos alguns dos aspectos básicos da interação do campo, inicialmente no estado coerente, com um átomo de dois níveis. São discutidos o colapso, reavivamento e a pureza do estado atômico através da análise da evolução temporal da função  $Q$  (quasiprobabilidade) e seu particionamento em componentes que giram no sentido horário (CW), anti-horário (CCW) e não girante (NR), seguindo a proposição de Matsuo [K. Matsuo, *Phys. Rev. A* **50**, 649 (1994)]. Notamos que o termo não girante (NR) assume valores apreciaavelmente maiores do que no caso do JCM independente da intensidade nos tempos de "revival". A dependência do acoplamento com a intensidade do campo, faz com que a função  $Q$ , bem como a pureza do estado atômico (ou do campo) apresentem um comportamento temporal periódico. No limite de baixa intensidade  $\bar{n} \approx 1$ , os resultados coincidem com aqueles do caso clássico do JCM independente da intensidade.

### Estatística de Contagem de Fótons

YARA A. FERREIRA, ARTHUR M. MORAES, CÉLIA M. A. DANTAS

Instituto de Física - Universidade Federal de Goiás

Neste trabalho investigamos a distribuição de contagem de fótons e a distribuição de tempo de espera para os estados coerentes comprimidos. A distribuição de contagem de fótons está intimamente relacionada com a distribuição de número de fótons, com a diferença de que, na prática, para se obter uma função que represente a distribuição de número de fótons de um determinado campo de luz, deve-se levar em conta a limitação experimental, considerando-se a eficiência do detector. A distribuição de tempo de espera, que também leva em conta a eficiência do detector, mede

o intervalo de tempo de chegada de dois fótons sucessivos provenientes de uma mesma fonte de luz. Ela nos diz se os fótons nesta fonte de luz apresenta ou não o efeito puramente quântico de antiagrupamento de fótons. Nós investigaremos estas distribuições para duas classes de estados coerentes comprimidos: o estado definido como  $|\alpha, z\rangle \equiv \hat{D}(\alpha)\hat{S}(z)|0\rangle$  e o estado  $|z, \alpha\rangle \equiv \hat{S}(z)\hat{D}(\alpha)|0\rangle$ . Comparamos estas distribuições para os mesmos parâmetros do campo, mostrando onde os efeitos quânticos são mais observados.

Suporte financeiro: *Proposta de um Núcleo de Pesquisa em Óptica Básica e Aplicada - PRONEX e CNPq.*

## POSITION AND MOMENTUM EIGENSTATES: AN ALTERNATIVE SQUEEZE OPERATOR

SERGIO M. DUTRA  
UNICAMP

HÉCTOR MOYA-CESSA  
INAOE, Puebla, Pue., Mexico

We propose a different squeeze operator [1] that is not unitary and therefore that is not related to a Hamiltonian evolution. The advantage is that it allows us to get close to position and momentum eigenstates without requiring an infinite squeeze parameter. There are no position nor momentum eigenstates for a harmonic oscillator [2] but our approach allows us to get as close as possible to them. Consider the operator

$$\hat{S}(\theta) = \exp \left[ (\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2}) \frac{\theta}{2} \right]. \quad (1)$$

We notice that for  $\theta = -\pi/4$ ,  $\hat{S}(\theta)$  transforms  $\hat{a}$  into the position operator  $\hat{x}$

$$\hat{S}(-\frac{\pi}{4}) \hat{a} \hat{S}^{-1}(-\frac{\pi}{4}) = \frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}} \equiv \hat{x}. \quad (2)$$

So the state

$$|X\rangle_\theta = N \hat{S}(\theta) |\alpha\rangle, \quad (3)$$

where  $|\alpha\rangle$  is a coherent state and  $N$  is a normalization constant, will approach an eigenstate of  $\hat{x}$  when  $\theta$  approaches  $-\pi/4$ . We have studied the quantum statistical properties of these  $|X\rangle_\theta$  states such as quadrature squeezing, Mandel parameter, and we have also computed its Wigner and  $Q$  functions. As our alternative squeezing operator is not unitary, we believe that it can be associated to an amplifying medium or to losses. We are currently looking for a physical process that could be associated to such operator, in much the same way as two-photon processes can lead to a description of time evolution in terms of the ordinary squeezing operator.

- [1] H. P. Yuen, *Phys. Rev. A* **13**, 2226 (1976); C. M. Caves, *Phys. Rev. D* **23**, 1693 (1981); R. Loudon and P. L. Knight, *J. Mod. Opt.* **34**, 709 (1987).

- [2] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics* (New York: Wiley, 1990).

### *Tetrad coding by quantum Bob*

G. A. BARBOSA, J. M. HICKMANN

Departamento de Física—Universidade Federal de Alagoas,  
Maceió 57072-970 AL Brazil

C. H. MONKEN

Departamento de Física—Universidade Federal de Minas  
Gerais

Belo Horizonte 30161-970 MG Brazil

A *tetrad* basis—at quantum level—constituted of polarized orthogonal states can be generated by a scheme of two nonlinear  $\chi^{(2)}$  crystals operating in a quantum interfering mode while only one photon of the conjugate pair of the *parametric down conversion luminescence* (PDCL) is manipulated to achieve a dense coding. The transmission line can be constituted either with a pair of optical fibers and single-photon detectors *or* a single optical fiber and two-photon detectors. Bennett and Wiesner [Phys. Rev. Lett. 69, 2881 (1992)] (B&W) proposed unitary transformations applied to just *one* of the two photons generated in one crystal by PDCL to create each element of a *tetrad* basis, in what one may call a “strict” dense coding scheme. The entanglement of the photon pair generates the desired quantum states or basis elements. The B&W scheme creates all combinations of *unpolarized* states made up by the two particles and *excludes* singly polarized states  $|\uparrow\uparrow\rangle$  and  $|\downarrow\downarrow\rangle$ . Along this scheme, transmission of a *trit* set of states was actually performed by Mattle et al. [Phys. Rev. Lett. 76, 4656 (1996)], using twin photon of the PDCL, two transmission trajectories and single-photon detectors. Although the B&W’s method can generate a *tetrad* basis at the quantum level, other different schemes, as the one here explored, can also generate a *tetrad* basis—including singly polarized states—by manipulating just *one* photon of a quantum state. This maximum coding of two bits per photon *cannot* be generated by classical fields, due to the lack of number (time) correlation at photon level (Mandel’s parameter  $Q \equiv (((\Delta n)^2) - \langle n \rangle) / \langle n \rangle \geq 0$ , for classical fields), despite the fact that a *tetrad* basis can also be generated classically, that is to say, with classical fields containing a large number of photons.

### Comprimento de onda do bi-fóton

HUGO HAELE ARNAUT

Departamento de Física—Universidade Federal de Minas  
Gerais, Belo Horizonte 30161-970 MG Brazil

GERALDO ALEXANDRE BARBOSA

Departamento de Física—Universidade Federal de Alagoas,  
Maceió 57072-380 AL Brazil

A teoria *multi-modo* da *luminescência paramétrica de conversão descendente* (LPD) está sendo aplicada à si-

tuação correspondente a uma montagem específica que visa a medida do comprimento de onda de *de Broglie* do bi-fóton—partícula constituída de um par de fótons gêmeos da LPD. Esta medida será obtida indiretamente através da *fase*, pois a medida direta de momento não é simples para um ou dois fótons. A situação experimental simulada permite a obtenção tanto de fótons simples assim como de estados a dois fótons, através de diferentes balanceamentos dos braços de um interferômetro de Hong-Ou-Mandel. Variações de fase dinâmica podem ser introduzidas através do deslocamento de um espelho num interferômetro de Mach-Zender ou, alternativamente, uma fase geométrica ou fase de Berry-Pantcharatnam pode ser aplicada através de um sistema óptico que produz variações cíclicas da polarização de fótons incidentes [T. Grayson, J. R. Torgerson, and G. A. Barbosa, Phys. Rev. A 49, 626 (1993)]. A montagem específica em estudo é possível de ser realizada, conforme indicam experiências anteriores e permite, portanto, uma aplicação direta da teoria a ser desenvolvida e de forma mais concreta do que uma proposta anterior, de caráter puramente especulativo [J. Jacobson, G. Bjork, I. Chuang, and Y. Yamamoto, Phys. Rev. Lett. 74, 4835 (1995)]. Este trabalho, portanto, engloba e estende trabalhos anteriores realizados com fótons gêmeos e interferômetros de Michelson [J. Brendel, W. Dultz, and W. Martienssen, Phys. Rev. A 52, 2551 (1995)] e Mach-Zender [J. G. Rarity, P. R. Tapster, and E. Jakeman, T. Larchuk, R. A. Campos, and M. C. Teich, B. E. A. Saleh, Phys. Rev. Lett. 65, 1348 (1990); Z. Y. Ou, X. Y. Zou, L.J. Wang, and L. Mandel Phys. Rev. A 42; 2957 (1990)].

### A INFLUÊNCIA DE FASES RELATIVAS NA DINÂMICA DO MODELO JAYNES-CUMMINGS.

ALVARO FERNANDEZ GOMES, ANTONIO VIDIELLA  
BARRANCO, JOSÉ ANTONIO ROVERSI  
UNICAMP

O estado binomial generalizado [D. Stoler et al. Optica Acta, 32, 345, 1985] tem-se mostrado de grande interesse frente às propriedades não clássicas e no estudo da interação átomo-campo via o modelo de Jaynes-Cummings. Este estado intermediário permite a interpolação entre diferentes estados do campo quantizado, em particular entre os estados de número e o coerente.

Consideramos um sistema que consiste de um átomo de dois níveis interagindo ressonantemente com um único modo do campo de radiação, preparado inicialmente em um estado binomial generalizado,

$$|p, M; \theta_n\rangle = \sum_{n=0}^M \left[ \frac{M! p^n (1-p)^{M-n}}{n! (M-n)!} \right] e^{i\theta_n} |n\rangle, \quad (1)$$

( $M$  é o número máximo de fótons no campo e  $p$  a probabilidade característica de ocorrência de fótons indivi-

duais no campo) em uma micro-cavidade ideal. A partir desse sistema estudamos como o comportamento da pureza do campo é influenciada pelo conjunto de fases relativas ( $\theta_n$ ) do estado do campo. Analisamos também a influência sobre o momento de dipolo elétrico médio.

Observamos que a pureza do campo durante a evolução é altamente sensível ao conjunto das fases relativas  $\theta_n$  para  $t = \pi\sqrt{pM}/g$ . Para fases aleatórias verificamos oscilações adicionais (flutuações) tanto na entropia quanto no momento de dipolo.

Devemos ressaltar que a escolha do conjunto de fases relativas do campo está intimamente ligada com a própria geração do estado, num ambiente de micromaser, onde são injetados átomos preparados em estados de superposição.

### UM HAMILTONIANO PARA GERAÇÃO DE ESTADOS PUROS DO CAMPO QUANTIZADO.

ANTONIO VIDIELLA BARRANCO, JOSÉ ANTONIO ROVERSI  
UNICAMP

A geração de estados puros não clássicos do campo quantizado é um tema central na Óptica Quântica. Já foram propostos vários esquemas para tal, a maioria baseados em sistemas do tipo "micromaser", onde átomos convenientemente preparados são injetados numa cavidade óptica de forma que ocorra transferência de coerência dos mesmos para o campo de um modo na cavidade. Após a medida do estado dos átomos emergentes da cavidade (processo não unitário), pode se gerar, em princípio, qualquer estado puro [ver K. Vogel, V.M. Akulin e W.P. Schleich Phys. Rev. Lett. **71**, 1816 (1993); C.K. Law e J.H. Eberly Phys. Rev. Lett. **76**, 1055 (1996)]. No entanto, pouco tem se progredido no sentido de obter a geração de estados através de transformações unitárias. Um avanço significativo ocorreu com a proposição, pela primeira vez, por Kilin et al. [S. Kilin e D. Horoshko Phys. Rev. Lett. **74**, 5206 (1995)], de um gerador para estados de Fock do tipo  $|\Psi\rangle = \exp(it\hat{H}_\Psi/\hbar)|0\rangle$ , que em princípio poderia ser implementado através da utilização de meios não lineares. Neste trabalho propomos uma generalização deste tratamento, obtendo com isso um gerador para estados puros do campo quantizado. O Hamiltoniano resultante consiste numa decomposição em potências de  $\hat{a}^\dagger$  e  $\hat{a}$  e funções  $f(\hat{a}^\dagger\hat{a})$  bem definidas.

### Superposição de Estados de Número Deslocado

JOSÉ RILDO DE O. QUEIROZ, CÉLIA M. A. DANTAS  
Instituto de Física - Universidade Federal de Goiás

A óptica quântica preocupa-se com o estudo de problemas relativos à luz sem análogo clássico. Alguns dos vários problemas relativo a ela são: definição e es-

tudo de propriedades de novos campos quânticos da luz, produção de novos estados, ruído quântico e as implicações dos aspectos quânticos destes campos. Neste trabalho investigamos as propriedades estatísticas de um novo estado quântico da luz. Este novo estado surge da superposição de dois estados do campo já investigados na literatura, conhecidos como estados de número deslocado. Mostraremos que algumas características importantes tais como estatística subpoissoniana, compressão e antiagrupamento de fótons, efeitos puramente quânticos não presentes no estado de número deslocado, surgem com a superposição destes estados, mostrando a importância do princípio da superposição linear da mecânica quântica para a geração de novos estados do campo. Estes efeitos dependem das fases relativas, assim como da magnitude das amplitudes complexas envolvidas. Nosso estado generaliza o estado de superposição de dois estados coerentes [conforme Schleich e colaboradores], quando colocamos o número inicial de fótons  $n = 0$  em nosso estado, assim como recuperamos também os demais dados estatísticos como a distribuição do número de fótons, o número médio de fótons, a variância do número de fótons, o fator de Fano e as variâncias nas quadraturas.

Suporte financeiro: *Proposta de um Núcleo de Pesquisa em Óptica Básica e Aplicada* - PRONEX e CNPq.

### Inversão Atômica do Estado de Número Deslocado Comprimido

HUMBERTO X. GUIMARÃES, NORTON G. DE ALMEIDA, CÉLIA M. A. DANTAS  
Instituto de Física - Universidade Federal de Goiás

A inversão atômica para a interação de um único átomo de dois níveis interagindo com um único modo do campo eletromagnético que se encontra inicialmente em um estado de Número Deslocado Comprimido [ENDC] é analisada com base no modelo de Jaynes-Cummings. O ENDC é definido como sendo  $\hat{D}(\alpha)\hat{S}(z)|n\rangle$  e reduz-se a vários casos particulares de estados já definidos na literatura, tais como: o estado coerente comprimido (fazendo-se  $n = 0$ ), estado de número deslocado (fazendo-se  $z = 0$ ), estado de número comprimido (fazendo-se  $\alpha = 0$ ), entre outros. Neste sentido, a inversão atômica, que depende sensivelmente da estatística de fótons do campo, para o ENDC é uma generalização de vários aspectos já investigados na literatura. Com base na variância do número de fótons e na fase, nos interessamos particularmente pelos aspectos que são responsáveis pelos colapsos e ressurreições presentes na inversão atômica. Assim nós enfatizamos que a definição no número é responsável pela tendência à ressurreição e a definição na fase é responsável pela tendência ao colapso, uma vez que esses efeitos estão diretamente relacionados com a variância do número de fótons. Analizamos também, a resposta

atômica comparando-a com as respectivas distribuições de número de fótons mostrando que estas distribuições de número de fótons modulam a inversão atômica, resultado este que está em consonância com os resultados obtidos na literatura para outros estados do campo.

Suporte financeiro: *Proposta de um núcleo de pesquisa em óptica básica e aplicada* - PRONEX e CNPq

### ON THE SUPERPOSITION OF NUMBER AND SQUEEZED STATES OF THE QUANTIZED LIGHT FIELD

GEUSA A. MARQUES, ADELSINDO L. DE BRITO  
*Depto. de Física - UFPB - C. Postal 5008 - CEP - 58.059-970, João Pessoa - PB.*

BASÍLIO BASÉIA, HÉLIO DIAS  
*Instituto de Física - USP - C. Postal 66.318 - CEP - 05.389 - 970, São Pulo - SP.*

Among the states usually investigated we can cite: the number state, the coherent state, the phase state - which is complementary to the number state, the squeezed state. Beyond these states of light fields, there are also states which are intermediary, the first one being the binomial state (BS), introduced by Stoler et al in 1985, which interpolates between the number state  $|n\rangle$  and the coherent state  $|\alpha\rangle$ , the intermediate number phase state (INPS), introduced for Baseia et al in 1995, which interpolates between the number state  $|n\rangle$  and the phase state  $|\theta_m\rangle$ . More recent papers in the literature [Mod. Phys. Letts. B9, 1673 (1995), B. Baseia, S. C. Granja and G. C. Marques, "Intensity Number Coherent State of the Quantized Light Field", (to appear in Physica Scripta '97)], introduced the Intermediate Number Squeezed-coherent States (INSS) of the quantized radiation field, which interpolates between the number state  $|n\rangle$  and the squeezed-state  $|z, \alpha\rangle$ . As in the case of the INSS, we will investigate the occurrence of some nonclassical effects in this alternative state. Various nonclassical effects - as sub-Poissonian statistics, antibunching and squeezing. Here, for comparison, we introduce an alternative state, which also interpolates between those limiting states,  $|n\rangle$  and  $|z, \alpha\rangle$ . It is found that nonclassical effects in this new intermediate state can be greater than those exhibited by the INSS, depending on the choice of the interpolating parameters. In the present paper allow us to investigate the occurrence of some nonclassical effects as sub-Poissonian statistics and squeezing, respectively. For a stationary and single-mode field sub-Poissonian statistics and antibunching are concomitant effects, then the verification of occurrence of one of them is enough.

### Descoerência mesoscópica como difusão de fase

PÉROLA MILMAN, LUIZ DAVIDOVICH

*Instituto de Física, UFRJ*

YVAN CASTIN

*Laboratoire Kastler-Brossel, Ecole Normale Supérieure, Paris, França*

A inexistência de superposições quânticas no nível clássico tem sido atribuída ao fenômeno da descoerência. Uma classe de estados desse tipo pode ser escrita como  $|\Psi\rangle = \frac{1}{N}(|\alpha\rangle + e^{i\psi}|\alpha\rangle)$ , onde  $|\alpha\rangle$  é um estado coerente e  $\psi$  depende dos detalhes da preparação do estado.

Técnicas baseadas na equação mestra permitem mostrar que  $|\psi\rangle$  passa de um estado puro para uma mistura estatística. Abordaremos a seguinte questão: será possível descrever o processo de descoerência em termos da difusão da fase  $\psi$ ? Mostramos que isso pode ser feito, para um modo de um campo eletromagnético em uma cavidade, interagindo com um contínuo de modos fora da cavidade. Essa descrição corresponde a uma realização da evolução descrita pela equação mestra em termos de uma equação de Schrödinger estocástica [1]. A média sobre muitas realizações corresponde ao resultado obtido a partir da equação mestra.

Consideramos que o único mecanismo dissipativo é a transmissão do campo para fora da cavidade, e o campo que sai da cavidade é continuamente monitorado por uma medida homodina balanceada, de forma que o campo usado para homodinagem está em quadratura de fase com relação ao campo medido. Calculamos a probabilidade de haver detecção utilizando o método de Monte Carlo [1] e encontramos uma equação de difusão para a probabilidade  $P(\psi, t)$  de encontrar a fase quântica com um valor  $\psi$  no instante  $t$ , válida para todo  $\alpha$  e  $t$ . A solução dessa equação nos permite chegar ao resultado obtido a partir da equação mestra [2].

[1] K. Mølmer e Y. Castin, Quantum Semiclass. Opt. 8, 49 (1996); K. Mølmer, Y. Castin e J. Dalibard, J. Opt. Soc. Am. B, 10, 524 (1993).

[2] L. Davidovich, M. Brune, J.M. Raimond e S. Haroche, Phys. Rev. A 53, 1295 (1995).

### ATOM FIELD INTERACTION IN THE JAYNES-CUMMINGS MODEL: INITIAL FIELD IN THE SUPERPOSITION ON NUMBER AND SQUEEZED STATES.

ADELSINDO LIBERATO DE BRITO, GEUSA A. MARQUES

*Depto. de Física, UFPB - C. Postal 5008 - CEP - 58.059-970, João Pessoa - PB.*

BASÍLIO BASÉIA, VANDERLEY S. BAGNATO  
*Instituto de Física, USP - São Carlos, C. Postal 369, CEP - 13.560-970 São Carlos, (SP).*

The atom-field interaction in the (exactly soluble) Jaynes-Cummings model has been investigated in the

literature, with the initial field in a number state  $|n\rangle$  and in a squeezed state  $|z, \alpha\rangle = \hat{S}(z)D(\alpha)|0\rangle$ , separately. In the first case, the atomic inversion  $\langle \hat{\sigma}_z(t) \rangle$  oscillates with constant amplitude whereas in the second case it exhibits collapses and revival effects. Much interest in the interaction various forms of nonclassical radiation with atoms has been presented in the literature in the last fifteen years: it was shown that if the field is initially in a coherent state  $\alpha\rangle$  atomic inversion which we call SNSS. The difficulties here emerge not only from the fact that atoms have a complicated structure but also because the field may be complicated, concerning to its spacial, frequency and polarization configurations. As consequence, the coupled system field-atom has no exact solution in this

general context, approximate solutions being obtained from perturbative calculations. Jaynes and Cummings introduced a very simple model, in which the atom is mapped into a two - level system and the field is assumed to be existence of the laser light, discovered in 1960, whose high degree of monocromaticity allows one to select only two levels among all others in a real atom. We will study the dynamic response of atomic inversion of a number state  $|n\rangle$  and a squeezed state  $|z, \alpha\rangle$ , and the influence of the interpolating parameter, upon collapse and revival of atomic inversion. Others non-classical effects such that evolution of the photon statistics and evolution of squeezing are also considered.

---

## ÓPTICA (Guias de Ondas e Fibras Ópticas)

### ÓPTICA (Guias de Ondas e Fibras Ópticas) – 11/06/97

#### HYDROFLUORIC ACID ATTACKING SILICA GLASS UNDER ELECTRIC FIELDS -THEORY

BERNHARD LESCHE

*IF UFRJ*

FÁTIMA C. GARCIA, EDUARDO N. HERING, LUIS C.

G. VALENTE, WALTER MARGULIS

*PUC-Rio*

ISABEL C. S. CARVALHO

*UERJ*

A. ASSEH, FREDERIK LAURELL

*Royal Institute of Technology Stockholm*

A theoretical model of the etching mechanism of silica glass with hydrofluoric acid under electric fields is presented. Etching of poled glass samples with hydrofluoric acid has turned out to be a powerful tool to study the physics behind poling. It was found that the etching rate is related to the second order non-linearity created by poling. In order to extract further information from etching experiments it is necessary to learn whether the unequal etching rate is caused by electric fields or by embedded charges. The authors showed with an interferometric study that the etching rate is affected by the application of an electric field, even in the absence of frozen charge in the glass. A linear dependence of the etching rate with field strength was found, with approximately 2.5% etching rate change for an applied field 20 MV/m. In this work we describe a simple theoretical model that attributes the dependence of the etching rate on the field to partial orientation of the HF molecules in the electric field. In our model it is assumed that the dominant etching mechanism is the reaction of HF molecules with silicon atoms. When such a molecule approaches the glass surface its axis will in general form some angle with the normal of the glass surface. A chemical reaction is assumed to occur only for small angles. Applying simple statistical mechanics we derive an expression for the field dependence of the etching rate, which describes the observed behaviour. We also show that the selective etching of poled glasses and frequency doubling fibers can be ascribed to the field dependence alone.

#### HYDROFLUORIC ACID ATTACKING SILICA GLASS UNDER ELECTRIC FIELDS -INTERFEROMETRIC STUDY

BERNHARD LESCHE

*IF UFRJ*

FÁTIMA C. GARCIA, EDUARDO N. HERING, LUIS C. G. VALENTE, WALTER MARGULIS

*PUC-Rio*

ISABEL C. S. CARVALHO

*UERJ*

A. ASSEH, FREDERIK LAURELL

*Royal Institute of Technology Stockholm*

Silica glass can be converted into a non-centrosymmetric material by optical or by electro-thermal means. It is believed that the second order non-linearity created in the glass is due to strong electric fields that are written into the glass during the optical or electro-thermal poling procedure. Etching of the poled glass samples with hydrofluoric acid has turned out to be a powerful tool to study the physics behind poling of silica glass samples. It was found that the etching rate is related to the second order non-linearity created by poling. In order to extract further information from etching experiments it is necessary to learn whether the unequal etching rate is caused by electric fields or by embedded charges. In this work an etching experiment of  $\text{SiO}_2$  in HF is described where only an electric field can be responsible for an alteration of the etching rate. An interferometric optical method was used to determine the thickness of glass etched in real time. This technique avoided low precision mechanical measurements and the necessity to interrupt the etching process. A He-Ne laser beam illuminated the glass sample from above and was reflected at the top and bottom surface of the sample. The interference of these reflections was registered. The measured light intensity oscillated with a frequency proportional to the etching rate. Information about the dependence of the etching rate on electric fields was obtained by submitting 170  $\mu\text{m}$  thick silica samples to voltages ranging from 2.7 kV to -2.7kV. A linear dependence of the etching rate with field strength was found, with 2.5% etching rate change for an applied field 20 MV/m. The present experiments clearly show that the etching rate is affected by the application of an electric field, even in the absence of frozen charge in the glass.

#### VISIBLE UP-CONVERTED LIGHT GENERATION IN $\text{Tm}^{3+}$ DOPED CHANNEL SILICA WAVEGUIDES

J. F. MARTINS-FILHO, A. G. BEZERRA-JR, A. S. L.

GOMES, CID. B. DE ARAÚJO

*Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco*

J. R. BONAR, M. V. D. VERMELHO, A. J.

MCLAUGHLIN, P. V. S. MARQUES, J. S. AITCHISON

*Department of Electronics and Electrical Engineering, University of Glasgow*

The use of silicon substrates for the realization of optoelectronic and photonic devices like amplifiers and lasers is receiving increasing attention due to its low cost of mass production, the use of the well developed silicon growth and processing techniques, waveguide fabrication on dielectric layers formed from silicon, and the possibility of hybrid integration of several devices on a single silicon optical bench, interconnected by low loss passive waveguides. One of the recent applications is the use of energy up-conversion processes for the generation of visible light from infrared radiation. In this work we present the first observation of infrared to visible up-converted light generation in a  $Tm^{3+}$  doped silica channel waveguide, fabricated on a silicon substrate by flame hydrolysis, photolithography and reactive ion etching [1]. Waveguide length and doping level are 5.9 cm and 0.56 wt%, respectively. The waveguide was pumped by the fundamental ( $1.06 \mu m$ ), first Stokes ( $1.12 \mu m$ ), and second Stokes ( $1.18 \mu m$ ) lines of the stimulated Raman scattering generated in a standard single mode telecomms fiber pumped by a mode-locked Nd:YAG laser. Up-converted light emission from the waveguide was observed at 366 nm, 455 nm, 475 nm, 648 nm, and 800 nm. The different up-conversion mechanisms responsible for each emission line, under different pumping conditions, are analyzed. It consists basically of phonon assisted multi-photon absorption, as previously identified in optical fibers [2]. These results indicate the possibility of realization of a solid state laser emitting in the blue, built with microfabrication techniques, with potential applications in undersea communications and optical storage.

- [1] - J. R. Bonar, J.A Bebbington, J. S. Aitchison, G. D. Maxwell and J. Ainslie, *Electron. Lett.* 31, 99 (1995).  
 [2] - A S. L. Gomes and Cid B. de Araujo, *J. Luminescence*, 48&49, 876 (1991).

### SOLITON GENERATION AND PROPAGATION FOR HIGH CAPACITY OPTICAL COMMUNICATION SYSTEMS

CLAUDIO MAZZALI, HUGO L. FRAGNITO  
 UNICAMP - IFGW

We demonstrate fundamental and high order Soliton propagation in conventional and Dispersion Shifted fiber at high bit rates. The Soliton pulses were generated using a novel concept of a tunable fiber ring laser in which an intra-cavity  $1 \times 2$  electro-optic modulator acts as harmonic mode-locker and adjustable output coupler. This configuration makes the device very flexible and permits that the output peak power can be adjusted by acting directly on modulator DC bias, maintaining the same pump power. With an Erbium doped fiber as the gain medium we generate laser pulses at 2.4 GHz, tunable between 1530 and 1565 nm, and FWHM of 3.4 ps measured using an autocorrelator based on

two-photons absorption in a silicon photodiode. Mode-locked regime was observed from less than 2 GHz until 2.6 GHz. The high repetition rate Soliton propagation was confirmed by two independent ways. In the first way we have measured propagation on 20km of conventional fiber and the temporal and spectral profiles at the end of this fiber reproduced the well known dynamic evolution of high order Solitons for different input powers. A second way to demonstrate the solitonic effect was made observing the called Soliton compression, where the 3.4 ps laser output was injected on 25 km of dispersion shifted fiber and was compressed to near 700 fs at the fiber end. Our source is suitable for Soliton systems because of its spectro-temporal output pulse profile, its very small inherent chirp compared to gain-switching semiconductor lasers, and its capability of tuning to match the desired dispersion for a given fiber and pulse intensity.

### GRADED INDEX WAVEGUIDES: DETERMINATION OF THE INTERFACIAL REFRACTIVE INDEX.

MARCELO BARBALHO PEREIRA, FLAVIO HOROWITZ  
 UFRGS

Knowledge of the refractive index of a coating is usually critical to its applicability in optics. In a typical multilayer stack film, the index profile is described by a succession of discrete numbers, where each layer is associated to one refractive index for its whole thickness. In the case of film waveguides with a graded index profile, an analytical curve is searched that well represents the index value as a function of depth. In particular for waveguides manufactured by ion exchange, this curve must tend to the substrate index value with increasing depth, as a lower boundary condition. At near zero film depth, determination of the film refractive index could provide the upper boundary condition, and this is our aim in this work. Therefore, techniques and procedures are described which we have used for the index measurement at the film-air interface, where a new method is presented, as an extension of the Abeles-Hacskaylo procedure. Consistent refractive index values, with precision in the third decimal place, are determined for  $Ag^+$  and  $K^+$  ion-exchange films on glass, as well as for bare glass substrates, in the neighborhood of their interface with air. Validity of the method is discussed in simple fundamental terms, which, along with the experimental evidences, indicate applicability to any graded index film, provided an index discontinuity is present at one of its extremes.

### ALL-OPTICAL SOLITON SWITCHING IN THREE CORE NONLINEAR FIBER COUPLERS

MARCIO GOMES DA SILVA, ANTONIO SERGIO  
 BEZERRA SOMBRA

*Laboratorio de Optica nao Linear e Ciencia dos Materiais (LONLCM) Departamento de Fisica Universidade Federal do Ceara (UFC)*

All optical switching devices are attracting considerable interest as fast switching components for future high-bit-rate systems. Optical fiber couplers have been of interest for their potential applications to ultrafast all optical switching processing, like optical switches. Previous studies of soliton switching in dual core optical fibers have shown excellent switching characteristics, with efficiencies around 96% for a wide range of input energies. Since then, soliton switching in nonlinear fiber couplers have been receiving considerable attention. Previous studies have demonstrated that the three-waveguide nonlinear directional coupler offers some advantages over the usual two-waveguide coupler. These studies indicate, by comparison with the two waveguide coupler, that the n-waveguide have more output states, with sharper switches characteristics, and display greater sensitivity to the input state, which are very important characteristics for the proposed all optical switching schemes. In this paper we present a study of propagation and switching of solitons in three core nonlinear fiber couplers using an analytical procedure, based in the Lagrangian density formulation. Analytical solution was obtained for the coupled equations associated to the three core coupler. Soliton switching between cores was observed and the transmission characteristics of the cores was obtained. The results are in good agreement with the numerical analysis. Comparing both techniques we can say that the Lagrangian formulation provide very good description of soliton switching in the coupler. We also present soliton eigenstates solutions of the three core nonlinear directional coupler where we have propagation without energy switching between cores. The existence of these non interacting solutions was confirmed by numerical simulation. The study of soliton switching in nonlinear fiber couplers provide possibilities for achieving, high efficiency in ultrafast all-optical signal processing, especially for optical devices.

## ÓPTICA (Guias de Ondas e Fibras Ópticas) – 11/06/97

### ANALYSIS OF CUT-OFF OF TRIPLE-CLAD FIBERS M

HUMBERTO FILOMENO DA SILVA FILHO  
*Grupo de Óptica IFSC-USP*  
 FREDERICO DIAS NUNES  
*Depto. de Eletrônica e Sistemas CT-UFPE*

This work reports the results on the study of the cut-off normalized frequency ( $V_c$ ) of triple-clad fibers M, also called coaxial fibers. These fibers have four dielectric layers: rod, well, barrier and clad, with refractive indexes  $n_1, n_2, n_3, n_4$  respectively. The coaxial fibers have called attention as an option to be dispersion-shifted fibers or being used to manufacture of devices as spectral filters. Two different M structures are analysed, M1 ( $n_3 > n_1 > n_2 > n_4$ ) and M2 ( $n_3 > n_1 > n_4 > n_2$ ).  $V_c$  is calculated as a function of the several parameters of the fibers (refractive index and layer dimensions), using transcendental equations obtained in this work. The work present the behavior of  $V_c$  for several modes belong to both structures, and a special attention is given to the fundamental mode  $HE_{11}$ . The analysis have shown that the fundamental mode of the structure M1 are allways null as is the case of the standard rod fibers used in telecommunication. On the other hand for the case of the structure M2 the fundamental mode may be or not null, depending on the set of values of the fiber parameters. For this last case a locii diagram is obtained showing the regions where  $V_c=0$  and  $V_c \neq 0$ , for several set of fiber parameters. These two regions are separated by a curve calculated with an equation given in this work. This work has received support from PRONEX: Centro de Excelência em Óptica Básica e Aplicada - USP-S. Carlos.

### OPTICAL SPECTROSCOPY OF $Cr^{3+}$ -DOPED LEAD GERMANATE FIBRES AND GLASSES.

EVELY MARTINS#, CHARLES R.  
 HAYTHORNTHWAITE, JI WANG, WILLIAN S.  
 BROCKLESBY  
*Optoelectronics Research Centre, University of  
 Southampton, SO17 1BJ, U.K.*

Fibres and glasses, once doped with transition metal ions, reveal a great potential as vibronic tunable lasers. Particularly, chromium ions added to lead-germanate fibres and glasses demonstrate a broad emission band in the near-infrared region. In this work we present the optical spectroscopic characterization of  $Cr^{3+}$ -doped lead-germanate fibres and glasses. The relative ease fabrication of chromium-doped glasses allowed us to study several compositions of host materials in order to achieve the ideal conditions for a new laser medium. The optical absorption spectra of  $Cr^{3+}$  ions have been studied in lead-germanate fibres and glasses and in silicate glasses as well. Although the spectra are host dependent the principal features are generally similar. The spectra consist of the vibronically broadened  $^4A_2 \rightarrow ^4T_1$  and  $^4A_2 \rightarrow ^4T_2$  transitions centred at 450 nm and 650 nm, respectively. The  $Cr^{3+}$  emission spectrum in the studied hosts, at room temperature, typically consists of a broad unstructured band in the near-infrared region, from 700 nm to 900 nm, resulting from the spin-

allowed  ${}^4T_2 \rightarrow {}^4A_2$  transition. At low temperature the band presents a well defined sharp line (R-line). The fluorescent decay times were measured for the broadband and the R-line. In conclusion, the data obtained guide us to achieve the challenge of this research work, i.e. the development of a new tunable laser in the near-infrared region.

# Visiting research fellow supported by CAPES.

**ANÁLISE DO TENSOR DAS TENSÕES DE  
MAXWELL NO ESPALHAMENTO DA LUZ  
POR UM CILINDRO EXCÊNTRICO  
METÁLICO COBERTO POR UMA  
CAMADA DIELÉTRICA.**

ANDRÉ GONDIM SIMÃO

UFMG/UFJF

JOSÉ PAULO RODRIGUES FURTADO DE MENDONÇA

UFJF

LUÍZ GALIZA GUIMARÃES

UFRJ

A teoria desenvolvida para tratar do espalhamento de ondas planas por esferas homogêneas (teoria de Mie) permite obter uma solução analítica para os campos gerados pelo espalhamento. Da mesma forma, uma solução analítica é obtida quando se estende esta teoria à cilindros homogêneos. O problema que estamos abordando, é o caso de um cilindro metálico(excêntrico, de raio  $b$ ) coberto por um cilindro dielétrico( raio  $a$  onde  $a > b$ ), onde ondas planas incidem (incidência normal) e cujo índice de refração é real. Para construir as soluções dos campos eletromagnéticos em todo espaço utiliza-se dos potenciais Debye que satisfazem a equação de onda escalar bidimensional, pois por ser incidência normal, os campos não apresentam dependência da coordenada  $z$ . Aplicando-se as condições de contorno encontra-se um sistema de quatro equações e seis incógnitas (três para cada polarização). Resolvendo este sistema para o coeficiente do campo interno encontra-se um conjunto infinito de equações lineares não homogêneas. Uma solução aproximada deste sistema já foi analisada em outros trabalhos, onde é considerado pequenos deslocamentos da excentricidade com relação à origem do cilindro maior. Os resultados são apenas válidos para regiões muito próximas à origem (cilindro maior). O presente estudo trata este problema perturbativamente onde, a solução do problema concêntrico é tomado como a primeira solução e a partir desta, a verdadeira solução é obtida com sucessivas iterações. Os resultados obtidos com estes algoritmos, tomados no limite de pequenos deslocamentos, concordam com os trabalhos já publicados. Devido a não simetria do problema há o aparecimento de um gradiente de força eletromagnética. Com os coeficientes determinados, obtemos os campos eletromagnéticos e calculamos a média (angular e temporal) da força sobre o cilindro metálico através da Força de Lorentz em coordenadas curvilíneas, resultando em

uma expressão que depende explicitamente destes coeficientes. Sabendo que os pólos destes coeficientes estão relacionados com as ressonâncias e com os algoritmos desenvolvidos, é possível calcular estas forças dentro e fora deste regime.

**ESTUDO TEÓRICO DO ACOPLAMENTO  
DOS CAMPOS ELETROMAGNÉTICOS DE  
UMA MICROFIBRA ATRAVÉS DE UMA  
MICROESFERA**

JOSÉ PAULO RODRIGUES FURTADO DE MENDONÇA

UFJF

LUÍZ GALIZA GUIMARÃES

UFRJ

Nos últimos anos tem despertado muito interesse no estudo de microesferas dielétricas acopladas a um sistema de fibra óptica. O que se faz é colocar uma microesfera de polietileno imersa em água e a certa distância de uma fibra óptica monomodo por onda se injeta uma luz vinda de um laser de corante. Esta fibra óptica monomodo é atacada quimicamente por uma solução de ácido fluorídrico, até que a distância do cladding ao núcleo fique em torno de alguns microns, ou seja, o núcleo da fibra fica quase exposto. Com isto a intensidade da onda evanescente que sai do núcleo aumenta, já que houve o polimento no cladding. Nas experiências de acoplamento da onda evanescente com a microesfera não existe um meio de controlar os modos que possam se acoplar na microesferas, ou seja, o aparato experimental não tem controle nos modos da onda evanescente proveniente da fibra óptica. Mostramos recentemente que variando o ângulo de incidência numa microfibra podemos controlar os modos evanescentes. Basicamente o que vamos fazer é escrever a função de onda total da esfera como sendo a soma de uma função de onda incidente ( $\Psi_{esf}^{inc}$ ) mais a função de onda espalhada pela esfera ( $\Psi_{esf}^{esp}$ ). Devemos fazer isto analogamente para o cilindro, ou seja,  $\Psi_{cil} = \Psi_{cil}^{inc} + \Psi_{cil}^{esp}$ . O que temos de observar é que cada função de onda está escrita numa base (esférica ou cilíndrica). Assim, fazendo as mudanças necessária teremos condições de encontrar as funções  $\psi$ . Estamos interessados em estudar as condições de acoplamento e o bombeamento da esfera para o cilindro e vice-versa.

**DESENVOLVIMENTO DE UM SENSOR DE  
FIBRA ÓTICA PARA DETERMINAÇÃO  
DO PONTO DE CORTE DA COALHADA  
NA FABRICAÇÃO DE QUEIJOS**

EVANDRO FERREIRA PASSOS, RINALDO DE CASTRO

OLIVEIRA, PAULO SÉRGIO MONTEIRO, SEBASTIÃO

CÉSAR CARDOSO BRANDÃO

Universidade Federal de Viçosa

Na fabricação de queijo um dos momentos que merece uma atenção especial é o ponto de corte da coalhada, que afeta diretamente a textura e o rendimento do queijo. Usualmente, a determinação do ponto de corte é feita com base numa estimativa de tempo pré-determinada, seguida de análise visual e uso de faca esterilizada para verificação da firmeza da coalhada. As propriedades mecânicas, térmicas e óticas do material sofrem variações durante o processo. Diversos dispositivos têm sido testados para determinar o ponto de corte e automatizar o processo, visando melhor qualidade e maior rendimento. Recentemente, um método baseado na mudança da refletância difusa do material foi proposto na literatura, com vantagens sobre os dispositivos mecânicos e térmicos, além de precisão suficiente para aplicações comerciais. Um feixe de fibra ótica bifurcada randômica foi utilizado como sensor. Uma lâmpada dicróica comercial serviu como fonte de luz e um fotodiodo de silício como sensor. Foram feitos vários testes monitorando o processo de produção de queijo Minas, cujo tempo de corte é da ordem de 40-45 minutos. Observamos que a variação da refletância difusa do material chega a 50 % do valor inicial. A curva de crescimento da refletância difusa apresenta uma fase intermediária do tipo sigmoidal, sendo que o instante onde a derivada apresenta um máximo ( $t_{max}$ ) está correlacionado com o tempo de corte ( $t_c$ ) através de uma relação do tipo  $t_c = k \cdot t_{max}$ , onde  $k$  pode ser determinado experimentalmente pelos operadores da fábrica de queijo. O valor de  $k$  para o queijo Minas foi estimado em 3.5 e é dependente das variáveis do processo e propriedades do leite. A automatização do processo permite antever maior uniformidade do produto e menores perdas de gordura e finos para o soro.

### GERAÇÃO DE HARMÔNICOS E CONVERSÃO ASCENDENTE DE FREQUÊNCIA EM FIBRAS ÓPTICAS DE GERMANOSILICATO DOPADAS COM PRASEODÍMIO.

HERON TEIXEIRA AMORIM, GEORGE CUNHA CARDOSO, MARIA TEREZA DE ARAÚJO, MARCOS VINÍCIOS DIAS VERMELHO, EVANDRO ARAÚJO GOUVEIA, ARTUR DA SILVA GOUVEIA NETO  
UFAL

Neste trabalho tratamos a geração de luz visível através de geração de segundo e terceiro harmônicos e conversão ascendente de frequência em fibras ópticas mono-modais de germanosilicato dopadas com praseodímio. Usamos como fonte fundamental de radiação um laser de Nd:YAG operando no regime "Q-switched" e "modelocked" em  $1,319 \mu\text{m}$ , isto é, na região de comprimento de onda da segunda janela de telecomunicações. O laser libera pulsos de 150 ps em uma taxa de repetição de 100 MHz "modelock" com uma envoltória de pulso "Q-Switched" de  $700 \mu\text{s}$  de duração e 1,0 kHz de

frequência. A taxa do crescimento do processo de dobra de frequência semeada pelo sinal de fluorescência por conversão ascendente foi estudada, bem como a geração eficiente de terceiro harmônico. É importante mencionar que o sinal de luz do terceiro harmônico foi gerado instantaneamente com a iluminação da luz de bombeamento. Para o sinal de luz do segundo harmônico, entretanto, um longo período de preparação foi necessário afim de obter intensidade apreciável, em 660 nm, quando comparada aos picos de fluorescência em 630 nm e 710 nm. No espectro de emissão, também obtivemos bandas largas em torno de 630 nm e 710 nm, correspondentes à emissão de fluorescência do nível do estado excitado  $^3P_0$  para um estado de energia mais baixo  $^3F_3$ . O mecanismo de bombeamento utilizado para popular o estado  $^3P_0$  é completado por um primeiro passo de transição de um fóton conectando o estado fundamental  $^3H_4$  ao estado excitado  $^3F_4$ , seguido de uma transição de dois fótons a partir do estado excitado  $^3F_4$ , conectando-o ao estado excitado  $^3P_0$ .

### COMPARAÇÃO DE DESEMPENHO DE ESQUEMAS NUMÉRICOS PARA A ANÁLISE DA PROPAGAÇÃO DE SOLITONS

TANIA GORNSZTEJN  
EMBRATEL  
JOSÉ RODOLFO SOUZA  
CETUC - PUCRio

Este trabalho apresenta uma comparação do desempenho de dois esquemas numéricos na análise da propagação de solitons em fibras óticas mono-modo, considerando tanto a presença de perdas como a de dispersão de ordem superior. A propagação dos pulsos na fibra ótica é descrita pela equação não linear generalizada de Schrödinger (GNLSE). Um dos esquemas utiliza expansão da função que representa o envelope do pulso em uma série de Fourier, e requer a solução de um sistema não linear de equações diferenciais parciais de primeira ordem. Este esquema (MSF) trabalha totalmente no domínio do tempo. O outro esquema é o chamado método da propagação de raios (BPM) e consiste em propagar o pulso inicial ao longo de uma pequena distância sob o efeito apenas da dispersão e, então, aplicar uma correção para incluir os efeitos da não linearidade. As partes linear e não linear da GNLSE são resolvidas, respectivamente, nos domínios da frequência e do tempo. Transformadas rápidas de Fourier (FFTs) são usadas para a transferência de um domínio ao outro. Os resultados indicam que, apesar de fazer uso intenso de FFTs, o BPM é mais eficiente computacionalmente do que o MSF. Além disto, o BPM mostrou-se mais robusto do que o MSF, que demonstrou incapacidade para tratar, por exemplo, o problema de solitons de ordens superiores.

## ÓPTICA (Guias de Ondas e Fibras Ópticas) - 13/06/97

### Fabricação de Redes de Bragg em Fibras Ópticas

CHRISTIANO J. S. MATOS, LUIZ CARLOS G. VALENTE, ISABEL C. S. CARVALHO, WALTER MARGULIS  
PUC-Rio  
R. KASHYAP

*BT Laboratories, United Kingdom*

Redes de Bragg foram fabricadas em uma montagem externa utilizando o feixe do quarto harmônico (266 nm) de um laser de Nd:YAG, Q-switched e mode-locked com potência média de UV da ordem de 50 mW. Um sistema interferométrico gera o padrão periódico que se deseja gravar. As redes são caracterizadas durante a fabricação utilizando-se como fonte de luz de análise a radiação Raman gerada a partir do acoplamento da frequência fundamental do mesmo laser de Nd:YAG através de 80 metros de fibra óptica. A luz refletida pela rede é caracterizada por um analisador de espectro óptico, na faixa de 1,1  $\mu\text{m}$  a 1,6  $\mu\text{m}$ . As redes foram produzidas em uma fibra dopada com boro submetida a alta pressão de hidrogênio durante alguns dias. Foram produzidas redes entre 1350 nm e 1650 nm com precisão de  $\pm 5$  nm e a reprodutibilidade da posição de pico para condições inalteradas de gravação de 1 nm. A largura espectral à meia altura foi sempre entre 1 nm e 2 nm, o que está dentro do esperado para redes com comprimento de aproximadamente 1 mm. A refletividade alcançada foi estimada em 15%. Como forma de se obter estruturas espectralmente mais estreitas foram feitas redes em condições idênticas espaçadas de poucos milímetros. O resultado é o aparecimento de uma interferência entre a reflexão das duas redes que dá origem a janelas de transmissão cuja largura é inferior a 0,2 nm. Ainda que as redes produzidas até o momento não apresentem as características demandadas em aplicações de telecomunicações, alta refletividade e largura espectral inferior a 1nm, pode-se desde já utilizar estas redes em sistemas de sensores, onde o que se busca é acompanhar a posição de pico de refletividade, para assim determinar grandezas que possam deslocar o espectro da rede, tais como temperatura e tensão mecânica.

### NUMERICAL SIMULATIONS ON A 250 KM TWO CHANNEL WDM SYSTEM AT 2.5 GB/S PER CHANNEL

D. F. GROSZ, H. L. FRAGNITO  
*Universidade Estadual de Campinas*

We simulate numerically a two channel WDM (Wavelength Division Multiplexing) fiber optics communication system at 2.5 Gb/s per channel using a Split Step

Fourier algorithm. The system consists of a link of 250 km of dispersion shifted fiber without in-line erbium doped fiber amplifiers (EDFAs) or repeaters, like the submarine system currently installed in the northeast coast of Brazil.

We compare system performance for the cases of NRZ (Non Return to Zero) formats and initially chirped pulses (direct modulation of laser transmitters) and initially unchirped pulses (external modulation of laser transmitters) for the case of no time overlapping between channels. We find that for direct modulated laser transmitters the spectrum broadens 20% of its initial value and for externally modulated laser transmitters the spectrum is 10% narrower. In both cases self phase modulation dominate pulse propagation. In general, because of the high dispersion lengths of the system due to the use of dispersion shifted fiber, nonlinear optical effects dominate pulse propagation and so we do not expect any distortion of the envelopes of the pulses. We also study FWM (Four Wave Mixing) sideband generation. We find that significant FWM occurs when the power per channel is larger than 10 mW. For this power the generated sideband is 20 dB below signal level. We also find that this value is independent of the type of modulation. In contrast for an input power per channel of 20 mW, FWM sidebands are 15.4 dB and 14 dB below signal level for external and direct modulation of the laser transmitter.

### PULSE POSITION MODULATION (PPM) OF ULTRASHORT PULSE TRAINS IN OPTICAL FIBRES

ANTONIO SERGIO BEZERRA SOMBRA

*Laboratorio de Optica nao Linear e Ciencia dos Materiais (LONLCM) Departamento de Fisica Universidade Federal do Ceara (UFC)*

JOSE IRAN DA SILVA

*Departamento de Engenharia Eletrica Universidade Federal do Ceara (UFC)*

The use of optical solitons for transmission of digital information has recently received a great deal of attention. A soliton is a pulse in which the nonlinearity of the fibre exactly compensate its natural dispersion, and an isolated soliton will propagate without dispersion over indefinitely large distances. In principle, the capacity of such a communication system should be extremely large. However some practical limitations are present. First, the maximum transmission rate is limited by the nonlinear interaction between successive pulses in a train of solitons, with the effect that the pulses must be separated by several pulse widths to minimize the interaction. Also the effect of noise in nonlinear communications channels has to be taken into account. For the transmission of solitons over very long fibre path requires periodic amplification to compensate fibre attenuation; the amplification process introduces

noise which interacts with the solitons and affects the propagation process. In this paper we present numerical simulations of propagation of periodic soliton trains along a nonlinear fibre channel. The use of the PPM (pulse position modulation) coding arises from the fact that PPM with short pulses permits a greater transmission rate than longer pulses, and intense pulses lead to a higher signal-noise-ratio than weak pulses. We report results on periodic 8 bits patterns generated to simulate PPM coding with 90Gb/s over 800 soliton pe-

riods. We also propose a new PPM configuration that admits a train of pulses propagating long distances at normal dispersion wavelength in optical fibers. With this configuration we could increase the bit-rate, obtained in the first configuration, operating in the normal dispersion regime as well. In this new PPM configuration we did numerical simulations where transmission velocities around 280Gb/s were obtained with good stability.

---

## ÓPTICA (Lasers)

ÓPTICA (Lasers) - 12/06/97

---

### SUB-DOPPLER FREQUENCY STABILIZATION OF OPTICALLY PUMPED FIR LASER LINES

EDJAR M. TELLES, LYNDON R. ZINK, KENNETH M. EVENSON  
*National Institute of Standards and Technology - NIST*

Three of the strongest optically pumped FIR laser lines (70, 118, and 123  $\mu\text{m}$ ) were sub Doppler stabilized and frequency measured. The locked lasers have the one-sigma frequency reproducibility of few parts in  $10^8$  and the accuracy better than 30 kHz. The dip was produced in the active medium at low pressure (4-7 Pa). It was used as a frequency discriminator for feedback stabilization using a servo. The width of gain curve was about 10 MHz and the width of Lamb dip was smaller than 2 MHz. The FIR unknown frequency and two frequencies from  $\text{CO}_2$  lasers were mixed in a metal-insulator-metal (MIM) diode. The difference between the frequencies from stabilized  $\text{CO}_2$  lasers was used as frequency standards. For this, each  $\text{CO}_2$  laser was stabilized by locking each directly to a saturation dip in the 4.3  $\mu\text{m}$   $\text{CO}_2$  fluorescence signal from a external reference cell. The pump radiation was nearly transversal and a new design cavity FIR laser was built to enhance the emission output. It was near confocal 1.40 m long Fabry-Perot cavity with gold-coated mirrors coupled a micrometer screw for cavity coarse tuning and a PZT transducer for fine tuning. A Brewster angle polyethylene beam splitter 8  $\mu\text{m}$  thick was used as a partial reflector to coupled out the FIR power. The saturated Lamb dip on gain curve was detected with a liquid helium germanium bolometer using a laser frequency modulation of 600 Hz and phase sensitive detection. The 3F detection was also used to eliminate the Doppler background. Financial Support: Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico-CNPq

---

### A NOVEL METHOD FOR FLUORESCENCE QUANTUM EFFICIENCY MEASUREMENTS BY THERMAL LENS TECHNIQUE

TOMAZ CATUNDA, ACÁCIO APARECIDO ANDRADE  
*Instituto de Física de São Carlos, Grupo de Espectroscopia de Sólidos, USP - Universidade de São Paulo*

MAURO LUCIANO BAESSO, ANTONIO CARLOS BENTO  
*Departamento de Física, UEM - Universidade Estadual de Maringá*

JURACÍ APARECIDO SAMPAIO, SÉRGIO GAMA  
*Instituto de Física Gleb Wataghin, DFESCM-GPCM, UNICAMP - Universidade Estadual de Campinas*

Low silica calcium aluminate glasses are transparent in the infrared (IR) spectral range up to 6  $\mu\text{m}$ . It has been shown that the introduction of small amounts of silica and magnesium oxide in the binary calcium aluminate glass improves the glass forming region in the phase diagram without significant loss in the IR transmission. The addition of rare-earth metals in these glasses produces fluorescence and higher thermal lens effect (TL) when the sample is illuminated by a laser beam. The absorbed incident lights converted into heat and fluorescence, and the ratio between the two depends

on the temperature induced optical path length change ( $ds/dT$ ) in the sample. A glass with minimum value of  $ds/dT$  and Nd concentration below the quenching region presents high fluorescence. Recently the TL effect has been used in quantitative way to determine  $ds/dT$  of silicate glasses, by using an analytical expression for the TL signal which permits to evaluate the energy fraction which is converted into heat. The aim of this work is to investigate the TL effect in low silica concentration aluminate glasses doped with different concentration of neodymium dioxide (0 - 5 wt% of  $\text{Nd}_2\text{O}_3$ ). The basic sample composition was 41.5 wt.%  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , 47.4 wt.% CaO, 7 wt.%  $\text{SiO}_2$ , 4.1 wt.% MgO. The mixture was melted in vacuum conditions at 1500°C. TL measurements were performed with an argon laser (515nm) as excitation beam and He-Ne laser as the probe beam. We observed that the thermal effect increases proportionally to the Nd concentration up to 4 wt.% concentration. The quantitative treatment for the Thermal Lens effect allowed us to determine the fluorescence quantum efficiency of 0.9. For the 4.5 wt% and 5 wt. % we observed a decrease in the quantum efficiency related to fluorescence quenching.

### CARACTERIZAÇÃO DE UM LASER DE VAPOR DE COBRE OPERANDO COM UMA MISTURA DE Ne-HBr

RUDIMAR RIVA, JAIME T. WATANUKI, NICOLAU A. S. RODRIGUES, CARLOS SCHWAB

*Instituto de Estudos Avançados/CTA - São José dos Campos - SP Instituto Tecnológico da Aeronáutica/CTA - São José dos Campos - SP*

Apresentamos neste trabalho as características de operação de um laser de vapor de cobre utilizando uma mistura de Ne-HBr. Esta nova técnica permite operar o laser com temperaturas inferiores a do laser convencional, simplificando a tecnologia de construção do tubo de descarga, e reduzindo sensivelmente o tempo de aquecimento do laser. No protótipo investigado neste trabalho, este tempo é de apenas 3 minutos. O protótipo construído tem um volume ativo de 350 cc do qual são extraídos até 27 W de potência média de radiação nos comprimentos de onda 510 nm e 578 nm, com uma eficiência de conversão de 1.3%. Um laser de vapor de cobre convencional de mesmo volume ativo tem a metade desta eficiência e gera cerca de 1/3 desta potência. Os parâmetros importantes de operação do laser de Cu-HBr foram investigados, e os resultados obtidos mostram que não existem parâmetros críticos de operação do laser. O laser opera de forma estável e sem muita variação da potência média no intervalo de frequências de repetição de pulsos entre 10 e 25 kHz, pressões de gás entre 20 e 50 mbar, com concentrações de HBr entre 4 e 10% e temperatura do tubo entre 500 e 900 °C. O perfil da emissão de radiação do laser de Cu-HBr medido apresenta uma distribuição quase gaussiana, resultando em uma melhor qualidade do feixe de radiação emitida.

### Alargamento Espectral do Ganho em Lasers de Estado Sólido pelo Efeito de "Hole Burning" Espacial

E. A. BARBOSA, N. U. WETTER, E. P. MALDONADO, I. M. RANIERI, S. P. MORATO, N. D. VIEIRA JR

*Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, CNEN-SP  
Supervisão de Materiais Optoeletrônicos P.O. Box 11049  
Pinheiros, São Paulo, 005549*

Estudamos o comportamento do espectro de um laser de Nd:YLF operando em  $\lambda = 1047$  nm em função da posição do meio de ganho na cavidade. O bombeamento do laser, que opera em regime contínuo (CW), é feito por um laser de diodo com potência máxima de 4W emitindo em  $\lambda = 797$  nm. Constatamos um alargamento espectral da emissão à medida que aproximou-se o meio de ganho do espelho de uma das extremidades da cavidade, o que pode ser predominantemente associado ao efeito de "hole burning" espacial (SHB). Este efeito é originado no meio de ganho do laser pelo surgimento e competição de outros modos, além do principal, por

regiões onde o ganho não está saturado. A descrição do SHB feita neste trabalho é válida para casos nos quais o comprimento de ganho é pequeno comparado com o comprimento da cavidade. Medimos a largura espectral do laser com o meio de ganho posicionado em uma das extremidades da cavidade e a comparamos com as medidas obtidas para o meio de ganho posicionado no centro. O alargamento espectral causado pelo efeito de SHB é extremamente desejável na obtenção de pulsos ultracurtos através do travamento de modos ("mode locking"). Este estudo fornece subsídios para o projeto de cavidades laser operando em regimes de "mode locking" passivo.

### Não-linearidade Kerr em cavidades laser em anel

CARLOS ANDRÉ DE CARVALHO BOSCO, LÚCIO HORA ACIOLI  
UFPE

Com a operação pulsada de lasers de Ti:safira no modo conhecido por "self mode-locking" muita atenção tem sido dada, tanto teórica[1] quanto experimentalmente[2], à otimização do funcionamento deste laser, englobando os efeitos da não-linearidade Kerr. Neste trabalho é proposto uma maneira de introduzir efeitos de unidirecionalidade numa cavidade em anel. A não-linearidade Kerr é recíproca; se a potência do laser é mantida constante o sentido de propagação do feixe é irrelevante. Neste caso, estudamos os efeitos introduzidos pela assimetria criada pelo bombeamento do cristal no efeito de auto-focalização do feixe do laser. Através do ajuste da posição do cristal e de uma fenda procuramos maximizar a derivada da cintura do feixe em relação à potência média. Pela forma da cavidade do laser teremos dois feixes contra-propagante gerados, sendo apenas um feixe favorecido com o uso de uma fenda, e o outro será impedido de circular. O método teórico usado foi o da matriz ABCD não-linear[3], que possibilita a obtenção das regiões de estabilidade da cavidade, bem como a posição da fenda onde o efeito não-linear permite discriminar o feixe CW que desfavorece o desempenho do laser de Ti:safira. Também vai ser discutida a relação entre a configuração ótima da cavidade e a técnica de "z-scan".

[1] K.-H. Lin, Y. Lai, e W. -F. Hsieh, J. Opt. Soc. Am. B, volume 12, 468, (1995)

[2] A. Kasper e K. J. Witte, Opt. Lett., volume 21, 360 (1996)

[3] V. Magni, G. Cerullo, and S. De Silvestri, Opt. Commun., volume 101, 365 (1993)

## ÓPTICA (Lasers) - 12/06/97

### "ASSIGNMENTS" DE TRANSIÇÕES LASERS NO INFRAVERMELHO LONGÍNQUO DA MOLÉCULA DE $^{13}\text{CD}_3\text{OD}$

RONALDO CELSO VISOVINI, ARTÊMIO SCALABRIN,  
DANIEL PEREIRA

*Instituto de Física "Gleb Wataghin" - UNICAMP -  
Campinas (SP)*

JOÃO CARLOS SILAS MORAES

*Departamento de Física e Química - UNESP - Ilha  
Solteira (SP)*

A geração e caracterização de novas fontes de radiação laser é uma área de pesquisa de grande interesse científico e tecnológico. A caracterização dos estados quânticos ("assignments") envolvidos nestas transições lasers representa uma grande oportunidade para o estudo do meio laser ativo, através da formulação e/ou testes de modelos teóricos. Neste trabalho propomos o "assignment" para 12 transições lasers IVL do isótopo de metanol  $^{13}\text{CD}_3\text{OD}$  [1,2]. Estas transições possuem comprimentos de onda entre  $132.7\mu\text{m}$  e  $1194.0\mu\text{m}$  e foram obtidas pelo bombeamento óptico com um laser guia de ondas de  $\text{CO}_2$  de 300MHz de sintonização. Para tanto foi utilizado um espectro à transformada de Fourier, com resolução de  $0.12\text{cm}^{-1}$ , na região de  $920\text{cm}^{-1}$  até  $1020\text{cm}^{-1}$  coincidente com o modo vibracional de estiramento CO do  $^{13}\text{CD}_3\text{OD}$ . Com este espectro pudemos estimar algumas constantes roto-vibracionais. Estas constantes, juntamente com outras encontradas a partir da comparação com outros isótopos de metanol, permitiram-nos utilizar o modelo torso-roto-vibracional para o cálculo dos níveis de energia do  $^{13}\text{CD}_3\text{OD}$ . Com estes níveis de energia e regras de seleção adequadas pudemos propor os "assignments" de transições lasers geradas experimentalmente. [1] R.C.Viscovini, E.M.Telles, A.Scalabrin, D.Pereira, "Large Offset Far-Infrared Laser Lines Generation from the C-O Stretching Q-Branch of  $^{13}\text{CD}_3\text{OD}$ ", Appl. Phys. B, aceito. [2] R.C.Viscovini, A.Scalabrin, D.Pereira, " $^{13}\text{CD}_3\text{OD}$  Optically Pumped by Waveguide  $\text{CO}_2$  Laser: New Fir Laser Lines", IEEE - Journ. Quantum Electron., aceito.

### DISPERSÃO DA ROTAÇÃO MAGNETOÓPTICA EM VIDROS CHALCOGENETOS DO TIPO Ga - S - La - O

CARMEN BEATRIZ PEDROSO, EGBERTO MUNIN+,  
JANÚNCIO A. MEDEIROS, NORBERTO ARANHA,  
ANTONIO BALBIN VILLAVERDE, LUIS CARLOS  
BARBOSA

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

Investigamos a dispersão da rotação magnetoóptica em três amostras de vidros chalcogenetos contendo diferentes composições dentro do sistema  $\text{Ga}_2\text{S}_3 - \text{La}_2\text{S}_3 - \text{La}_2\text{O}_3$ . O elevado índice de refração, acima de 2,3, aponta para uma elevada rotação magnetoóptica nesta classe de materiais, o que os torna candidatos para aplicações em dispositivos magnetoópticos. Vidros com rotação magnetoóptica elevada são úteis na construção de isoladores ópticos, sensores de campo magnético, transdutores para medida de corrente elétrica em linhas de alta tensão e sensores de deslocamento ou posição. Muitas destas aplicações podem ser beneficiadas com a utilização de vidros em substituição à materiais cristalinos, uma vez que os primeiros podem ser fabricados na forma de fibra. O campo magnético utilizado nos experimentos, na faixa de 55000 a 75000 Gauss, foi provido pela descarga de um banco capacitivo ( $500\mu\text{F}$ ) sobre um solenóide com indutância de ( $384\mu\text{H}$ ). As medidas foram realizadas em quatro comprimentos de onda: 675.5 nm, 632.8 nm, 594 nm e 543.5 nm, sendo o primeiro proveniente de um laser de semicondutor e os três últimos, provenientes de diferentes lasers de hélio-neônio. Obtivemos rotações tão altas quanto  $0.1367\text{ min G}^{-1}\text{ cm}^{-1}$  em 632.8 nm e  $0.2076\text{ min G}^{-1}\text{ cm}^{-1}$  em 543.5 nm para a amostra contendo 70  $\text{Ga}_2\text{S}_3 - 25\text{ La}_2\text{S}_3 - 5\text{ La}_2\text{O}_3$  (mol%). A elevada rotação magnetoóptica encontrada mostra que esta classe de materiais pode ser utilizada vantajosamente para aplicações em dispositivos magnetoópticos. Os dados experimentais indicam que quando  $\text{La}_2\text{S}_3$ , de maior peso molecular, entra substitutivamente ao  $\text{La}_2\text{O}_3$ , o valor da constante magnetoóptica é aumentada. No presente trabalho, são também reportadas para os vidros estudados, os índices de refração medidos em 632.8 nm com o auxílio da técnica de ângulo de Brewster.

+ Endereço atual: UNIVAP, Av. Shishima Hifumi 2911, 12244-000 São José dos Campos, Sp, Brazil

### Medidas de Amplificação em Laser de Cu-HBr

BENEDITO CHRIST, RUDIMAR RIVA, JAIME  
WATANUKI, NICOLAU A. S. RODRIGUES, CARLOS  
SCHWAB

*Instituto de Estudos Avançados/CTA - São José dos  
Campos - SP, Instituto Tecnológico da Aeronáutica/CTA -  
São José dos Campos - SP*

O desenvolvimento recente de uma nova tecnologia de laser de cobre, denominada laser de Cu-HBr, possibilitou um acréscimo considerável na potência média de radiação emitida no espectro visível de frequências ( $\lambda=510.6\text{ nm}$  e  $578.2\text{ nm}$ ), com uma eficiência de conversão superior àquela do laser de vapor de cobre convencional. A grande vantagem deste laser está na baixa temperatura de operação (500 - 900 °C), o que simplifica enormemente a tecnologia de construção do tubo de laser. No IEAv, estamos desenvolvendo um laser de cobre baseado nesta nova tecnologia, e os resultados

obtidos até o momento confirmaram a superioridade do laser de Cu-HBr em relação ao laser de vapor de cobre convencional. Nas aplicações de interesse no IEAv (separação isotópica de Urânio, e processamento de materiais, necessita-se de feixes de radiação com boa qualidade (i.e., baixa divergência) e potências média elevadas. Estudos realizados com um LVC convencional, demonstraram que isto pode ser obtido com o emprego de um conjunto oscilador-amplificador de potência, onde o feixe de radiação produzido por um oscilador operando com cavidade instável é amplificado por um ou mais lasers. Esta investigação não havia ainda sido realizada com lasers de Cu-HBr. Neste trabalho estudamos

as características de um laser de Cu-HBr com um volume ativo de  $350 \text{ cm}^3$  operando como amplificador de potência. Uma potência média total de  $25.5 \text{ W}$  foi extraída do amplificador, com uma eficiência de conversão de  $1.4\%$ . O mesmo dispositivo funcionando como oscilador e nas mesmas condições de excitação, fornece uma potência média de apenas  $19 \text{ W}$ . Fluências de saturação de  $51 \mu\text{J}/\text{cm}^2$  e  $41 \mu\text{J}/\text{cm}^2$  foram obtidas para as transições de  $510.6$  e  $578.2 \text{ nm}$  respectivamente. Em ambas as transições foi medido um ganho de baixo sinal igual a  $0.18 \text{ cm}^{-1}$ .

---

## ÓPTICA (Espectroscopia Não-Linear em Sistemas Atômicos)

### ÓPTICA (Espectroscopia Não-Linear em Sistemas Atômicos) – 12/06/97

#### ESTUDO DE ARMADILHAS MAGNETO-ÓTICAS ATRAVÉS DE SIMULAÇÕES MONTE-CARLO TRIDIMENSIONAIS

DANIEL FELINTO PIRES BARBOSA, JOSÉ  
WELLINGTON ROCHA TABOSA, SANDRA SAMPAIO  
VIANNA  
Universidade Federal de Pernambuco - Departamento de  
Física

Simulações Monte-Carlo de Armadilhas Magneto-Óticas (AMO) vêm sendo utilizadas nos últimos anos no estudo da dinâmica dos átomos armadilhados. As simulações que empregamos nesse trabalho se baseiam num modelo semiclassical que considera os graus de liberdade externos do átomo (posição e velocidade) como clássicos e trata os graus de liberdade internos de maneira quântica no cálculo das probabilidades de transição. Inicialmente estudamos a configuração de AMO formada por três pares de lasers contrapropagantes e um campo magnético quadrupolar. Estudos já foram desenvolvidos, com base nessa simulação, para a AMO convencional de seis feixes até duas dimensões [1]. No presente trabalho, nós estendemos esses estudos para três dimensões e investigamos as possíveis aplicações da simulação proposta. Dois problemas foram analisados: a previsão dos parâmetros ótimos da AMO e a distribuição espacial dos átomos devido ao desalinhamento dos feixes no plano  $xy$ . Para o cálculo dos parâmetros ótimos, nós realizamos um estudo da variação da velocidade de captura da AMO com a dessintonização, campo magnético e intensidade dos lasers. Este estudo é feito a partir da análise de um conjunto de átomos levando em consideração as diferentes trajetórias de entrada. O comportamento observado da simulação mostra a existência de um intervalo de valores ótimos do campo magnético e da dessintonização, em boa concordância com os resultados experimentais. Para obter as diversas distribuições espaciais que surgem a partir do desalinhamento dos feixes, nós fizemos um estudo baseado na evolução temporal dos átomos armadilhados. Dependendo dos parâmetros da AMO e do desalinhamento dos feixes, órbitas estáveis de diversas formas são observadas. Os resultados obtidos a partir desses dois problemas mostraram que nossa simulação está bastante coerente com os dados experimentais e consiste numa ótima ferramenta de estudo da

dinâmica de átomos armadilhados.

[1] D. Grison, Thèse de Doctorat, Université Paris VI, (1992). (CNPQ, FINEP, FACEPE)

#### TRANSFERÊNCIA DE POPULAÇÃO VIA BOMBEAMENTO ÓPTICO EM ÁTOMOS FRIOS DE CÉSIO

CLAYTON A. BENEVIDES  
UFPE  
MARCOS ORIA  
Departamento de Física - UFPB  
SANDRA S. VIANNA, JOSÉ W. R. TABOSA  
UFPE

A dinâmica da armadilha magneto-óptica (ou *Magneto-Optical Trap-MOT*) para átomos alcalinos é fortemente influenciada pelo efeito do bombeamento óptico que efetivamente retira os átomos do ciclo de esfriamento [1]. Na armadilha de césio este efeito é causado pela excitação não ressonante de átomos para o estado excitado  $6P_{3/2}$ ,  $F'=4$  cujo decaimento para o nível  $6S_{1/2}$ ,  $F=3$  leva o átomo a deixar de participar do ciclo de esfriamento, isto é,  $6S_{1/2}$ ,  $F=4 \rightarrow 6P_{3/2}$   $\rightarrow F'=5 \rightarrow 6S_{1/2}$ ,  $F=4$ . Normalmente este efeito é compensado com o uso de um laser de rebombeio que repõe os átomos no estado interagente  $6S_{1/2}$ ,  $F=4$ . Recentemente este efeito de bombeamento óptico foi convenientemente usado por Ketterle et al [2] para produzir amostras de átomos frios de sódio a altas densidades, num esquema (conhecido como *dark SPOT*) em que os átomos frios essencialmente são opticamente bombeados para o estado  $6S_{1/2}$ ,  $F=3$  onde não mais interagem com os lasers armadilha, assim eliminando uma série de efeitos que limitam a obtenção de grandes densidades em um MOT. Neste trabalho investigamos o processo de bombeamento óptico em átomos de césio em uma armadilha magneto-óptica através da excitação ressonante da transição não cíclica  $6S_{1/2}$ ,  $F=4 \rightarrow 6P_{3/2}$ ,  $F'=3$ . Em particular mostramos que em condições apropriadas este bombeamento óptico ressonante funciona como um eficiente mecanismo para se produzir de maneira contínua átomos frios no estado fundamental  $6S_{1/2}$ ,  $F=3$ . Isto constitui de fato uma alternativa mais simples ao esquema do "*dark SPOT*", também já realizado com césio [3]. Desenvolvemos também um modelo baseado em equações de taxa que está em excelente concordância com os resultados experimentais

[1] E. C. Raab et al. Phys. Rev. Lett. 59, 2631 (1987).

[2] W. Ketterle et al. Phys. Rev. Lett. 70, 2253 (1993).

[3] C. G. Townsend et al. Phys. Rev. A 53, 1702 (1996).

Departamento de Física - UFPB

### SIMULAÇÃO NUMÉRICA EM 3D DE ARMADILHAS MAGNETO ÓTICAS COM DOIS FEIXES

HANNO REGEHR, SANDRA SAMPAIO VIANNA, JOSÉ WELLINGTON ROCHA TABOSA

*Universidade Federal de Pernambuco - Departamento de Física*

Motivados por observações experimentais, utilizamos simulações do tipo Monte Carlo para estudar as características de uma armadilha magneto-ótica com apenas dois feixes de lasers focalizados. Estendemos os estudos realizados em duas dimensões para três dimensões e analisamos a dinâmica do movimento atômico para as diferentes direções do espaço. Na direção do par de feixes, o movimento assemelha-se a um movimento browniano, como observado nas armadilhas tradicionais. No plano perpendicular, as coordenadas espaciais são descritas por uma equação de Van der Pol, que caracteriza um oscilador harmônico amortecido com o coeficiente de viscosidade dependente da variável de estado. Para este plano, o coeficiente é em média cem vezes menor que o observado na direção dos feixes. Os resultados obtidos mostram que a viscosidade neste plano não é suficiente para encobrir o processo de difusão devido às flutuações da emissão espontânea. Mostramos que estas flutuações podem levar o átomo a adquirir uma velocidade superior à velocidade de escape do sistema, deixando assim a região da armadilha. Definimos desta forma um tempo de confinamento finito para o sistema, mesmo desprezando colisões com o background. A partir do cálculo da dependência da velocidade de captura com a dessintonização, intensidade dos feixes, e gradiente do campo magnético, estudamos os parâmetros ótimos de funcionamento dessa armadilha. Neste caso verificamos que no plano perpendicular, a velocidade de captura é uma ordem de grandeza menor que na direção de incidência dos feixes, levando assim a uma baixa densidade de átomos armadilhados. Finalizamos o trabalho discutindo alguns resultados preliminares quando adicionamos um par de feixes não focalizados no plano perpendicular aos feixes já existentes, que indicam um aumento substancial no número de átomos armadilhados devido à melhora, em média, da velocidade de captura.

### ÓPTICA (Espectroscopia Não-Linear em Sistemas Atômicos) – 13/06/97

#### DEGENERATE AND NON-DEGENERATE FOUR-WAVE MIXING IN COLD CESIUM ATOMS WITH OPTICAL PUMPING

GEORGE C. CARDOSO, VITOR R. DE CARVALHO, CLÁUDIO L. CÉSAR, SANDRA S. VIANNA, JOSÉ W. R. TABOSA

*UFPE*

Resonant four-wave mixing (FWM) is a powerful nonlinear spectroscopic technique which has been widely employed to investigate a variety of nonlinear optical media. In a low-density Doppler-broadened vapor, FWM can be used to observe sub-Doppler resonances as well as to study saturation effects associated with the third order nonlinear susceptibility  $\chi^{(3)}$  of the medium. With the phenomenal development achieved in the field of laser cooling and trapping of neutral atoms, samples of atoms with high densities and very low temperatures can now be easily obtained. These samples of cold atoms offer the possibility to perform FWM in a completely new domain. Differently from a room temperature atomic vapor, where just a small velocity group within the sample contributes to the FWM signal, with cold atoms this contribution comes from all the atoms. In this work we present a detailed investigation on the generation of four-wave mixing optical phase conjugation using a noncycling transition of cold cesium atoms obtained from a four-beam magneto-optical trap [1,2]. In particular, we study the efficiency of the four-wave mixing signal as a function of the density of trapped atoms as well as the intensity of the trapping beams. A simple theoretical model which accounts explicitly for the relaxations between the two hyperfine cesium ground states in the trap environment is in qualitative agreement with some of the observed results. We will also present the observation of nondegenerate four-wave mixing with hyperfine levels population transfer induced by optical pumping. Application of this effect to measure atomic diffusion in the trap will be discussed. [1] J.W.R. Tabosa, S.S. Vianna, and F.A.M. de Oliveira, to appear in Phys. Rev. A (1997). [2] J.W.R. Tabosa and S.S. Vianna, submitted to Braz. J. of Phys. (1996).

#### Tempo de Difusão de Íons de Urânio em Argônio Utilizando Lâmpada de Catodo Oco com Descarga Pulsada

JOSÉ W. NERI, NICOLAU A. S. RODRIGUES, VLADIMIR H. B. SCHEID, MARCELO G. DESTRO, CARLOS A. B. DA SILVEIRA, RUDIMAR RIVA, CARLOS SCHWAB

*Instituto de Estudos Avançados/CTA - São José dos Campos - SP Instituto Tecnológico da Aeronáutica/CTA - São José dos Campos - SP*

Lâmpadas de Catodo Oco (LCO) são ferramentas versáteis, compactas, simples e confiáveis, que fornecem vapores de metais para propósitos espectroscópicos. As colisões de íons da descarga com as paredes do catodo podem produzir um denso vapor do material constituinte do mesmo. Em trabalho anterior mostramos que

, no caso específico de uma lâmpada com catodo oco pulsada feita de Urânio e usando Ar como gás de "buffer", é possível obter vapor de Urânio por períodos maiores que um milisegundo após a descarga ser desligada e que é possível observar fotoionização em Urânio em LCO, quando seu vapor é iluminado por um par de lasers de corante pulsados sintonizados, um em 5915 Å e outro em 6056 Å. Neste trabalho descrevem-se experimentos realizados em uma Lâmpada de Catodo Oco de Urânio com Descarga Pulsada e Ar como gás de "buffer", com o objetivo de se obter uma fonte de vapor metálico para uso em espectroscopia de fotoionização. O vapor de urânio é gerado por uma descarga elétrica

pulsada, e medidas de corrente elétrica são realizadas no pós-descarga (afterglow). Íons de urânio são produzidos usando um esquema de fotoionização por absorção seqüencial de três fótons de dois comprimentos de onda, gerados por lasers de corante bombeados por lasers de vapor de cobre. O tempo de decaimento do sinal de fotoionização foi atribuído à difusão de íons de urânio para parede do catodo, e que o tempo de difusão de íons por sua vez fornece uma indicação indireta da evolução da temperatura do gás/vapor no período de pós-descarga (afterglow).

---

## ÓPTICA (Imagens e Holografia)

### ÓPTICA (Imagens e Holografia)

- 13/06/97

#### Mapeamento de Amplitudes de Vibração por Holografia em Média Temporal em Cristais de $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$

E. A. BARBOSA, M. MURAMATSU

*Laboratório de Óptica, Instituto de Física, Universidade de São Paulo*

Relatamos o desempenho de um arranjo holográfico com um cristal fotorrefrativo de  $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$  (BSO) para a medição de amplitudes de vibração pela técnica de holografia em média temporal. O registro do holograma de volume é realizado em regime de difusão (sem campo elétrico externamente aplicado) com o uso de um laser de  $\text{Ar}^+$  ( $\lambda=514,5$  nm) operando com potência de 300 mW. Neste arranjo, o feixe referência é modulado senoidalmente em fase com a mesma frequência de vibração do objeto analisado. Alterando-se a amplitude da fase modulada, as franjas do padrão de média temporal movem-se ao longo da superfície do objeto, de modo que o mapeamento pode ser efetuado. As propriedades de difração anisotrópica típicas dos cristais da família das silenitas, além de sua alta resolução espacial, permitem a obtenção de hologramas de ótima qualidade. Interferogramas em tempo quase real podem ser observados devido ao rápido tempo de resposta do cristal BSO, característica extremamente conveniente para este ensaio. Através da modulação de fase do feixe referência e da seleção adequada da amplitude da fase modulada pode-se medir amplitudes de vibração mesmo em interferogramas de pouca visibilidade. Esta técnica também permite um aumento da sensibilidade da medida de amplitudes de vibração, comparando-se com técnicas convencionais de holografia em média temporal.

#### Computer-generated speckle-free Fresnel phase plates for beam shaping

LUIZ GONÇALVES NETO

*Laboratory of Integrated Systems - USP*

YUNLONG SHENG, FRANÇOIS GALMICHE

*Dept. Physique - U. Laval - Canada*

Diffractive optical elements (DOE's) for beam shaping are surface relief phase elements that modify the far- or near-field intensity distributions of laser beams. When the desired images are not a simple square or circle, the beam shaping elements are non-periodic and can be designed usually with the iterative methods based on the Gerchberg-Saxton phase-retrieval algorithm. When a random phase is used as initial phase and the image phase is used as a free parameter for the iterations, speckle noise is introduced in the reconstructed image. The speckle noise can do not appear in the design of DOE because the discrete Fourier transform in the computation gives the amplitude and phase information of the reconstructed image only at the sampled points. However, the optical reconstruction is continuous. The finite DOE aperture leads to interpolation among the sampled image values by a sinc function. When the image with random phase is not a band limited function, the interpolation with the sinc function leads to large intensity variations, e.g. speckle noise, on the optically reconstructed image. An oversampling in image plane is necessary to simulate the optical reconstruction in which speckles can occur. We eliminate the speckles by applying the image plane constraint and the Fourier plane band-limit constraint. To avoid isolated zeros in the image plane which can cause stagnation of the iterations, we choose the constant phase as the initial phase in the design of the Fresnel phase plate. This constant phase assures the generation of a smooth hologram. This technique was applied to the design of a non-periodic beam-shaping Fresnel hologram built in the ARPA-Honeywell workshop.

## ÓPTICA (Instrumentação Óptica)

### ÓPTICA (Instrumentação Óptica)

– 11/06/97

#### INTERFEROMETRIA APLICADA AO MICROSCÓPIO DE FORÇA ATÔMICA

DENISE CRISTIANO REIGADA  
*PUC-Rio*

RODRIGO PRIOLI MENEZES  
*CBPF*

THOMAS HUSER, THILO LACOSTE, HARRY  
HEINZELMANN, HANS-JOACHIM GÜNTHERODT  
*Universidade de Basel*

A técnica de microscopia de força atômica (AFM), talvez a mais utilizada e versátil das técnicas de scanning probe microscopy, consiste na medida da força de interação entre uma ponta de prova e uma superfície. O AFM pode ser operado de duas maneiras: detecção AC e detecção DC. Na detecção DC mede-se a deflexão estática do cantilever enquanto este varre a superfície, ou a força constante ou a altura constante, sendo este mecanismo útil para medidas de perfilometria, com resolução atômica ou molecular, bem como investigação de propriedades mecânicas de superfícies, tais como fricção. Na detecção AC o cantilever é levado a oscilar na sua frequência de ressonância. Ao varrer uma superfície, o cantilever sente uma força de interação entre a ponta e a superfície, tal como Van der Waals. Esta interação modifica a frequência de ressonância e muda a fase e a amplitude de vibração, sendo este mecanismo útil para medir forças de longo alcance, tais como forças magnéticas, eletrostáticas e de Van der Waals. Muitas técnicas para medir o deslocamento do cantilever já foram descritas anteriormente, sendo que as mais recentes incluem técnicas capacitivas e ópticas. Todas estas técnicas têm suas vantagens e desvantagens com relação à complexidade, sensibilidade, estabilidade em baixas frequências, os tipos de cantilevers que podem ser utilizados e a aplicabilidade nos dois modos de operação do AFM. Neste trabalho descreve-se a montagem de um interferômetro de fibra óptica super sensível para medir o deslocamento do cantilever. Descreve-se o funcionamento do interferômetro e apresenta-se alguns dados experimentais. Este sistema, além de ser simples e robusto, apresenta uma alta sensibilidade e possibilita uma diminuição da cabeça do AFM, viabilizando a análise de superfícies em locais de acesso remoto.

#### MAGNETO-OPTICAL TRANSDUCER FOR LINEAR DISPLACEMENT MEASUREMENTS

ANTONIO BALBIN VILLAVERDE, EGBERTO MUNIN+,  
CARMEN BEATRIZ PEDROSO  
*Instituto de Física "Gleb Wataghin", UNICAMP, CP 6165  
13083-970 Campinas, SP, Brasil*

O comportamento de um sensor linear de deslocamento baseado no efeito magneto-óptico de Faraday é analisado neste trabalho. O sensor consiste de um bastão de um material magneto-ópticamente ativo que pode se deslocar livremente ao longo do eixo dentro de um sistema de ímãs permanentes. No nosso estudo a configuração magnética a ser usada é formada por dois ímãs permanentes cilíndricos, ocios e do mesmo comprimento. Ambos os ímãs são uniformemente magnetizados, com a magnetização paralela ao eixo do cilindro e montados com suas magnetizações em oposição. A performance do sensor é discutida em função dos diâmetros interno e externo dos dois ímãs, dos comprimentos deles e da amostra, da intensidade do campo magnético remanente do dois magnetos permanentes, do valor da constante de Verdet do material magneto-ópticamente ativo e do comprimento de onda da fonte de luz usada. Para uma melhor linearidade do sistema dentro de uma determinada faixa de deslocamento o diâmetro externo dos ímãs deve ser grande e o interno pequeno, quando comparados com o comprimento dos mesmos, e os comprimentos do ímã e da amostra devem ser iguais. Mostramos que é possível ter um sistema prático para o sensor que seja linear sobre uma distância equivalente a 90% do comprimento total da amostra, com um afastamento da linearidade menor que 1%, escolhendo-se convenientemente os valores dos parâmetros correspondentes à amostra e aos dois magnetos permanentes. Foi também achado que o sensor é capaz de detectar deslocamentos tão pequenos quanto  $1 \mu$  quando é usado como amostra um bastão de vidro paramagnético FR-5 fabricado pela HOYA e como fonte luminosa um laser de He-Ne que opera no comprimento de onda de 543 nm.

+ Endereço atual: UNIVAP, Av. Shishima Hifumi 2911, 12244-000 São José dos Campos, SP, Brasil

#### RESULTADOS PRELIMINARES DA ESTAÇÃO DE DIFRAÇÃO DE RAIOS-X DO LNLs/CNPq

MARGARETH K. FRANCO, SÉRGIO MORELHÃO,  
CARLOS GILES, CÍNTIA SOARES  
*Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLs  
CÉSAR CUSATIS  
Universidade Federal do Paraná - UFP*

A estação de difração de raios x foi projetada e construída visando a flexibilidade. Possibilita, pelo menos, duas técnicas de difração distintas: a difratometria de pó e a de múltiplos cristais. A operação com luz síncrotron teve início em janeiro/97 e a estação encontra-se em fase de comissionamento. O monocromador de duplo-cristal mostrou-se estável após o aquecimento inicial do primeiro cristal. O difratômetro de pó ou múltiplos cristais e a estação de difração dispõem de um detector rápido ( $\sim 10^6$  cps) de cintilação e de um detector tipo pin-diode de alta resolução de energia (250 eV a 6,6keV) operando sem nitrogênio líquido. Um detector de raios x tipo CCD bidimensional de 1152x1242 pixels de 25  $\mu$  m cada, um leitor de "image plate", que estará disponível no hall experimental, e uma câmara de controle de temperatura da amostra de 70K a 700K estão sendo adquiridos com recursos do programa PRONEX/LNLS. Foram obtidos os primeiros resultados com luz síncrotron e foi feita a caracterização preliminar da estação. As curvas de difração (rocking curve) de duplo cristal e os difratogramas de pó obtidos inicialmente estão de acordo com os valores calculados. O software de controle e coleta de dados da estação, em desenvolvimento pelo LNLS, trabalha em ambiente Delphi e permite a operação da estação através da utilização do mouse do microcomputador. O funcionamento da estação tem início previsto para julho de 1997.

### DIVISOR DE POLARIZAÇÃO POR REFLEXÃO

CARLOS R. A. LIMA, LEANDRO L. SOARES, LUCILA CESCATO

*Laboratório de Óptica, IFGW, Unicamp*

ANGELO L. GOBBI

*Centro de Pesquisa e Desenvolvimento, TELEBRAS*

Componentes de polarização são elementos que modificam o estado de polarização da luz. Cubos de polarização, lâminas de onda, prismas de Glan-Thomson, Nicol e Wollaston são exemplos clássicos destes tipos de elementos que utilizam a birrefringência natural de cristais e são em geral muito caros. Redes de difração apresentam interessantes propriedades de polarização quando seu período tem dimensões muito menores ou próximas ao comprimento de onda da luz. Analisando alguns resultados teóricos numéricos das eficiências de difração de redes perfeitamente condutoras com perfis retangulares, utilizadas na montagem de Littrow, podemos observar que para alguns parâmetros específicos desta rede, a eficiência de difração da primeira ordem para luz polarizada na direção TE (paralela às linhas da rede) atinge um máximo exatamente com a eficiência nula para a polarização TM. Se a rede tiver um período entre 0.5 e 1.5 vezes o comprimento de onda da luz incidente ela deve apresentar apenas duas ordens de difração (zero e -1), portanto, se não houver

absorção, por conservação de energia, a eficiência de difração da ordem zero deve ser exatamente complementar à eficiência da primeira ordem. Assim a eficiência da ordem zero deve ser máxima para a luz polarizada TM e nula para TE. Neste trabalho utilizamos estes resultados para projetar uma rede para operar como divisor de polarização para o comprimento de onda do laser de He-Ne (633nm). Esta rede foi gravada holograficamente em fotorresina e posteriormente transferida para um substrato de fosfeto de índio via ataque por plasma reativo para obtermos o perfil quadrado com a geometria necessária. Após o ataque a rede foi recoberta com alumínio para atender o requisito de condutor perfeito da teoria. Os resultados das medidas de difração mostraram uma excelente concordância com os resultados esperados pela teoria.

### UTILIZAÇÃO DE SISTEMA LIDAR TRANSPORTÁVEL PARA SENSORIAMENTO AMBIENTAL

RAUL DE ALMEIDA NUNES

*DCMM - Pontifícia Universidade Católica - RJ*

PAULO CESAR DE CAMPOS BARBOSA, RAÚL HERNÁNDEZ TABARES, LUIZ CARLOS SCAVARDA DO CARMO

*Depto de Física, Pontifícia Universidade Católica - RJ*

SERGEI PERSHIN, ALEXEI BUNKIN

*Academia de Ciências da Rússia*

Neste trabalho é apresentado o desenvolvimento e montagem de um sistema LIF-LIDAR compacto transportável, com laser de Nd:YAG. Por sua versatilidade, este conjunto pode ser utilizado em diferentes campos do sensoriamento remoto ou in situ. Os resultados iniciais dos testes realizados estão descritos, enfocando o sensoriamento ambiental em três vertentes: quantificação da fluorescência da clorofila em amostras de águas de diferentes localidades da região litorânea da cidade do Rio de Janeiro; análise da fluorescência de diferentes espécies de plantas e análise de amostras de solo.

Este sistema apresenta um laser com pulso probe de 8 ns, com taxa de repetição de 10 Hz, e energia do pulso nos 1<sup>o</sup>, 2<sup>o</sup> e 3<sup>o</sup> harmônicos de 600 mJ, 280 mJ e 100 mJ, respectivamente. O consumo de energia do LIDAR é de aproximadamente 1 kW e seu peso é de 20 kg. O equipamento inclui ainda um sistema de refrigeração fechado.

Para operar, a radiação do laser é direcionada através de um sistema de espelhos para o alvo remoto. As radiações retrodifusa elasticamente e de fluorescência são recolhidas por telescópio Newtoniano. A rede de difração do policromador tem resolução de 40 nm/mm na dispersão de primeira ordem. Para detecção é utilizado um intensificador de luz acoplado a um CCD linear de 1024 elementos. A faixa de operação espectral (em primeira ordem) vai de 400 a 900 nm.

A versatilidade do sistema em questão, mostrada nos testes iniciais para a espectroscopia de fluorescência em diferentes situações, sem pré-tratamento químico do material analisado, é uma vantagem incontestável. Estabelecendo-se bancos de dados para os diferentes objetos de estudo, com o controle de grandezas como radiação, temperatura e umidade, entre outras, deverá ser possível a caracterização instantânea da qualidade da água, do estado de estresse da vegetação e do tipo de solo analisado.

### OPTIMIZATION OF OPTICAL ABERRATIONS BY FUZZY LOGIC.

SADAO ISOTANI

*Instituto de Física da Universidade de São Paulo*

WALDEMAR BONVENTI JR

*Universidade de Sorocaba*

We are developing a "intelligent system" for optimization of optical projects, which variables control is based on fuzzy logic. In general, three facts make difficulties the optical project synthesis: 1. there is many variables (curvature radii, refraction indexes, distance between surfaces and objects, (and so on) and boundary values (paraxial parameters, apertures, working distances). So, it's a "many-D" problem. 2. aberration behavior it isn't linear 3. these variables are strongly bound. There is a large range of errors in results. To confront these difficulties, we propose to employ fuzzy logic to handle these variables and to analyze results. Fuzzy handles is more flexible, and we hope better to treat interlaced parameters. Fuzzy logic have been used successfully in hardware control and optimization of non-linear systems. Fuzzy algorithms aim at reducing problems in optical design and reducing experts to develop it. However, a complete development of this system have been made in several steps, requiring some specialists and software engineers, demanding on time. The initial steps are: a) to select the synthesis and optimization procedures which will receive the "fuzzyfication" treatments, b) to develop the algorithms related to procedures above, c) to develop the algorithms related to "fuzzy" adjustments on system. The efforts to get a optimized system have been emphasized toward three directions: 1. "closed procedures" based on mathematical formalism to treat optical systems with well known properties (e.g. doublets or triplets), 2. innovative optimization techniques adapted to optical systems (DLS, DLS-PSD, "Simulated Annealing"), 3. graphical analytical methods, working over Y-Y Delano's diagram and subsequent techniques.

### ESPECTRÔMETRO DE PLASMA INDUZIDO POR RUPTURA A LASER

RAÚL HERNÁNDEZ TABARES, RAUL DE ALMEIDA NUNES

*Pontifícia Universidade Católica - RJ*

SERGEI PERSHIN, ALEXEI BUNKIN

*Academia de Ciências da Rússia*

É apresentado o desenvolvimento de trabalhos relativos a medidas que identificam elementos químicos em superfícies através do uso da técnica LIBS - ( Laser-Induced Breakdown Spectroscopy ). As principais características de instrumentação do sistema LIBS são apresentadas juntamente com alguns resultados experimentais de sua aplicação na determinação de elementos atômicos em superfícies. Nesta técnica, um plasma é gerado pela incidência de um feixe de laser focalizado na superfície do material. A emissão espectral do material sublimado e ionizado no plasma é analisada para determinar os elementos atômicos presentes nesta superfície. O sistema LIBS é composto por um laser de Nd-YAG ( 1064 nm, 20 mJ, 30 ns ), um sistema óptico de focalização, um policromador, um sistema de intensificação de imagem, uma câmara CCD linear, uma unidade eletrônica de controle de tempo e um programa de controle e aquisição de dados. As principais características eletro-ópticas dos diferentes componentes do sistema e do conjunto como um todo, são apresentadas juntamente com alguns resultados e medidas preliminares realizadas. A técnica de espectrometria de plasma induzido por ruptura a laser LIBS apresenta-se em fase de desenvolvimento. Os resultados espectroscópicos apresentados já permitem uma identificação dos elementos predominantes. Para baixas concentrações ( faixa de ppm ) o poder de resolução do equipamento ainda é limitado. Para alcançar a resolução de ppm será necessário otimizar o alinhamento óptico do sistema de detecção e ajustar de forma mais fina os parâmetros envolvidos na geração e aquisição de emissão do plasma. Porém mesmo com estes resultados preliminares esta técnica já permite sua aplicação na avaliação de espessuras de filmes protetores tipo nitrato de titânio sobre aço de ferramenta ou zinco sobre ferro.

### UTILIZAÇÃO DE SISTEMA LIDAR TRANSPORTÁVEL PARA SENSORIAMENTO AMBIENTAL

RAUL DE ALMEIDA NUNES

*DCMM - Pontifícia Universidade Católica - RJ*

PAULO CESAR DE CAMPOS BARBOSA, RAÚL HERNÁNDEZ TABARES, LUIZ CARLOS SCAVARDA DO CARMO

*Depto de Física, Pontifícia Universidade Católica - RJ*

SERGEI PERSHIN, ALEXEI BUNKIN

*Academia de Ciências da Rússia*

Neste trabalho é apresentado o desenvolvimento e montagem de um sistema LIF-LIDAR compacto transportável, com laser de Nd:YAG. Por sua versatilidade, este conjunto pode ser utilizado em diferentes campos

do sensoriamento remoto ou in situ. Os resultados iniciais dos testes realizados estão descritos, enfocando o sensoriamento ambiental em três vertentes: quantificação da fluorescência da clorofila em amostras de águas de diferentes localidades da região litorânea da cidade do Rio de Janeiro; análise da fluorescência de diferentes espécies de plantas e análise de amostras de solo.

Este sistema apresenta um laser com pulso probe de 8 ns, com taxa de repetição de 10 Hz, e energia do pulso nos 1º, 2º e 3º harmônicos de 600 mJ, 280 mJ e 100 mJ, respectivamente. O consumo de energia do LIDAR é de aproximadamente 1 kW e seu peso é de 20 kg. O equipamento inclui ainda um sistema de refrigeração fechado.

Para operar, a radiação do laser é direcionada através de um sistema de espelhos para o alvo remoto. As radiações retrodifusa elasticamente e de fluorescência são recolhidas por telescópio Newtoniano. A rede de difração do policromador tem resolução de 40 nm/mm na dispersão de primeira ordem. Para detecção é utilizado um intensificador de luz acoplado a um CCD linear de 1024 elementos. A faixa de operação espectral (em primeira ordem) vai de 400 a 900 nm.

A versatilidade do sistema em questão, mostrada nos testes iniciais para a espectroscopia de fluorescência em diferentes situações, sem pré-tratamento químico do material analisado, é uma vantagem incontestável. Estabelecendo-se bancos de dados para os diferentes objetos de estudo, com o controle de grandezas como radiação, temperatura e umidade, entre outras, deverá ser possível a caracterização instantânea da qualidade da água, do estado de estresse da vegetação e do tipo de solo analisado.

#### **Projeto de um sistema de imagens para átomos aprisionados**

**RAUL HABESCH, VANDERLEI S. BAGNATO**

*Instituto de Física de São Carlos - USP*

**FERNANDO DE MORAES MENDONÇA RIBEIRO**

*Escola de Engenharia de São Carlos - USP - Dept. Mecânica*

Os avanços mais recentes na produção de gases no regime quântico estão sendo obtidos através da observação da distribuição espacial de átomos aprisionados. As recentes observações da Condensação de Bose-Einstein obtêm conclusões desta transição de fase através do aumento da localização espacial dos átomos. Nos experimentos já realizados o sistema de imagens tem sido um fator limitante. Estamos desenvolvendo um sistema de imagens com alta resolução e flexibilidade para a observação de átomos em armadilhas. O instrumento projetado consiste em um acoplador de microscópio para a armadilha. Objetivas de microscópio de grande aumento normalmente apresentam pequena distância de trabalho, enquanto que o objeto em estudo

situa-se a 150 mm após uma janela óptica. Nosso instrumento produz uma imagem real invertida que serve de objeto a um microscópio óptico convencional, com abertura numérica de até 0,18, sendo a qualidade de imagem limitada principalmente por difração: o design consiste em dois subsistemas simétricos, o que minimiza várias aberrações como Coma, Astigmatismo e curvatura de campo. Descrevemos aqui o projeto deste instrumento e considerações sobre a montagem mecânica do conjunto, atualmente em etapa de construção.

## **ÓPTICA (Instrumentação Óptica)**

### **- 13/06/97**

#### **FABRICAÇÃO DE COMPONENTES ÓPTICOS DIFRATIVOS UTILIZANDO-SE FILMES DE A-CARBONO**

**CARLOS R. A. LIMA, LEANDRO L. SOARES, LUCILA CESCATO**

*Laboratório de Óptica, IFGW, Unicamp*

**MARCO A. R. ALVES, EDMUNDO S. BRAGA**

*Laboratório de Plasma FEE, Unicamp*

O processo de deposição por PECVD é amplamente utilizado em microeletrônica e opto-eletrônica porque permite a deposição de filmes com alta qualidade e limpeza com baixo custo de produção. Em particular os filmes de a-Carbono depositados por esta técnica têm importantes propriedades industriais tais como elevada dureza mecânica, neutralidade química, tornando-os potencialmente interessante para proteção de ferramentas, para reduzir o desgaste mecânico e aumentar a resistência de superfícies expostas às perturbações climáticas. O fato de possuírem um alto índice de refração e transparência no IV próximo, além de poderem ser depositados em grandes superfícies, formando camadas bastante homogêneas torna estes materiais também interessantes para aplicações em Óptica. Por se tratar de um material relativamente novo, apenas suas propriedades de dureza e neutralidade química têm sido explorada do ponto de vista de aplicações. Estas propriedades, aliadas a facilidade de corrosão destes materiais com um simples plasma de Oxigênio, torna estes materiais, depositados na forma de filmes finos, altamente interessantes para uso em processos de microlitografia, que envolvem a gravação de padrões utilizando máscaras. Neste trabalho propomos e demonstramos a viabilidade do uso de filmes de a-Carbono para gravação de estruturas submicrométricas em relevo para a confecção de componentes ópticos difrativos. Para isto foi desenvolvido um processo específico que consiste primeiramente da gravação de estruturas

periódicas, utilizando-se exposições holográficas sobre um filme de fotorresina. O padrão gravado na fotorresina é transferido via ataque químico para uma fina camada de alumínio que serve entó como máscara ("bottom resist") para o ataque via plasma reativo do filme de a-Carbono. Foram obtidos perfis quadrados com alta qualidade e controle de forma gravados em filmes de a-Carbono sobre substratos de quartzo e silício que podem ser utilizados para produção de componentes ópticos difrativos como polarizadores e lâminas de onda.

### PROJETO DE COMPONENTES ÓPTICOS DIFRATIVOS

LEANDRO L. SOARES, CARLOS R. A. LIMA, LUCILA CESCATO

*Laboratório de Óptica, IFGW, Unicamp*

HELMUT HAIDNER

*Techn. Hochschule Darmstadt, Alemanha*

Nos últimos trinta anos tem surgido uma forte tendência na substituição de componentes ópticos convencionais por componentes ópticos difrativos devido aos menores custos de produção e possibilidade de miniaturização e integração com componentes optoeletrônicos. Os avanços nos métodos de projeto, assim como o surgimento de novos materiais e técnicas de gravação eficientes contribuíram para expandir as aplicações destes componentes, assim como para sua viabilidade. Para se projetar componentes ópticos microestruturados é necessário, entretanto, a solução rigorosa das equações de Maxwell. Os métodos de solução numérica se dividem basicamente em dois grupos: Integral e Diferencial. Ambos os métodos, entretanto, exigem softwares complexos e específicos para cada tipo de estruturas (forma do perfil, condutividade, etc.). Neste trabalho foram utilizados dois softwares escritos em linguagem C que só executados numa workstation que nos permitem o cálculo das eficiências e das fases de difração em função dos parâmetros da rede (período, comprimento de onda, profundidade, ângulo de incidência e duty cycle). Um destes programas realiza o cálculo de estruturas lamelares perfeitamente condutoras para as duas componentes ortogonais de polarização TE (com o campo elétrico incidente paralelo ao sulcos da rede) e TM (com o campo magnético incidente paralelo ao sulcos da rede). O outro, mais complexo, realiza o cálculo para redes lamelares ou trapezoidais, metálicas ou dielétricas, para TE e TM, a única restrição é a

utilização para redes metálicas e polarização TM. Estes dois programas foram utilizados para projetar três componentes ópticos difrativos: Divisor de polarização (Beam Splitter), Lâmina de quarto de onda e Interconexão Óptica do tipo uma entrada e quatro saídas. Assim, para cada tipo de componente, foram calculados os parâmetros geométricos das redes de difração que desempenhem a função óptica desejada.

### CORRELAÇÃO DE SPECKLE DINÂMICO PRODUZIDO POR ESPALHAMENTO DE LUZ LASER POR PARTÍCULAS NUM MEIO LÍQUIDO.

AKIYOSHI MIZUKAMI

*Faculdade de Tecnologia de São Paulo*

MIKIYA MURAMATSU, DIOGO SOGA

*Instituto de Física da USP*

O objetivo deste trabalho é o estudo da correlação de intensidade de speckles dinâmicos devido ao movimento de partículas sob iluminação de luz laser. A importância do mesmo é a sua aplicação no estudo da poluição ambiental por micro partículas suspensas e a possibilidade de explicação da atividade biológica devido ao movimento de partículas que provoca a decorrelação da intensidade quando a amostra é iluminada por luz laser. Utilizou-se como elemento espalhador grão de vidro de diferentes tamanhos suspensos em glicerina, sendo a amostra iluminada por um difusor de vidro intercalado entre o laser e a amostra. O movimento de queda de grãos de vidro sob a ação da força da gravidade, da força de empuxo e da força viscosa é que dá origem ao padrão de speckles dinâmicos. A luz espalhada é analisada, atrás da amostra, por meio de uma câmera CCD e cujos sinais foram digitalizadas e calculada automaticamente a correlação de intensidade em intervalos sucessivos, tomando o instante inicial como referência. Utilizou-se amostras de grãos com diâmetro de aproximadamente 4 a 10 microns e 10 a 30 microns. Para cada amostra verificou-se que o tempo de decorrelação é aproximadamente proporcional ao tamanho do speckle que ilumina a amostra e a dependência dessa correlação com o diâmetro do grãos de vidro, isto é, quanto maior o diâmetro do grão de vidro, maior é a sua velocidade de queda, portanto para uma mesma iluminação de tamanho de speckle mais rápida é a sua decorrelação.

# Índice de Autores e Apresentações

## Períodos

- 1 - Sessões Paralelas - 08:00 - 10:00
- 2 - Palestras Convidadas - 10:30 - 11:30
- 3 - Sessões Paralelas - 11:30 - 13:00
- 4 - Painéis - 14:30 - 17:00
- 5 - Palestras Convidadas - 17:30 - 18:30

| Autor                 | Dia | Período | Sala  | Pág.  | Autor                | Dia | Período | Sala  | Pág.  |
|-----------------------|-----|---------|-------|-------|----------------------|-----|---------|-------|-------|
| A. Junior, A.         | 11  | 4       | ..... | 84    | Alcalde, A. M.       | 11  | 4       | ..... | 280   |
| Abatte, M.            | 12  | 4       | ..... | 393   | Alcantara Jr, P.     | 13  | 4       | ..... | 209   |
| Abbate, M.            | 12  | 4       | ..... | 393   | Alcaraz, F. C.       | 12  | 1       | 5     | ..... |
| Abbate, M.            | 12  | 1       | 6     | ..... | Alcaraz, F. C.       | 12  | 4       | ..... | 106   |
| Abraham, E. R. I.     | 12  | 3       | 4     | ..... | Alencar, A. M.       | 11  | 4       | ..... | 299   |
| Abramof, E.           | 12  | 1       | 9     | ..... | Alexe-Ionescu, A. L. | 12  | 1       | 7     | ..... |
| Abramof, E.           | 11  | 1       | 9     | ..... | Alex, G. F.          | 12  | 4       | ..... | 152   |
| Acchar, W.            | 12  | 4       | ..... | 197   | Alfieri Sobrinho, G. | 12  | 4       | ..... | 104   |
| Achete, C. A.         | 13  | 3       | 6     | ..... | Alfonso, A. B.       | 11  | 4       | ..... | 285   |
| Achete, C. A.         | 13  | 3       | 6     | ..... | Almeida, A. de       | 12  | 4       | ..... | 16    |
| Achete, C. A.         | 13  | 4       | ..... | 374   | Almeida, A. M. O. de | 12  | 3       | 9     | ..... |
| Achete, C. A.         | 13  | 4       | ..... | 375   | Almeida, A. M. O. de | 13  | 4       | ..... | 70    |
| Acioli, L. H.         | 12  | 3       | 10    | ..... | Almeida, E. F. de    | 11  | 1       | 1     | ..... |
| Acosta, R. H.         | 11  | 4       | ..... | 302   | Almeida, E. F. de    | 11  | 4       | ..... | 187   |
| Acquadro, J. C.       | 11  | 1       | 4     | ..... | Almeida, J. R. L. de | 11  | 4       | ..... | 81    |
| Adesida, I.           | 12  | 4       | ..... | 263   | Almeida, M. A. de    | 13  | 4       | ..... | 72    |
| Adhikari, S. K.       | 11  | 4       | ..... | 40    | Almeida, M. P. de    | 11  | 3       | 7     | ..... |
| Adhikari, S. K.       | 12  | 1       | 5     | ..... | Almeida, M. P. de    | 11  | 4       | ..... | 299   |
| Adorno, A. T.         | 11  | 3       | 1     | ..... | Almeida, N. G. de    | 13  | 4       | ..... | 418   |
| Adorno, A. T.         | 13  | 4       | ..... | 219   | Almeida, N. S.       | 13  | 4       | ..... | 174   |
| Aguiar, F. M. de      | 13  | 4       | ..... | 178   | Almeida, N. S.       | 13  | 4       | ..... | 167   |
| Aguiar, F. M. de      | 11  | 3       | 2     | ..... | Almeida, N. S.       | 11  | 3       | 2     | ..... |
| Aguiar, F. M. de      | 11  | 3       | 2     | ..... | Almeida, R. M. C.    | 13  | 4       | ..... | 33    |
| Aguiar, J. A.         | 11  | 1       | 5     | ..... | Almeida, R. M. C. de | 11  | 1       | 7     | ..... |
| Aguiar, J. A.         | 13  | 1       | 5     | ..... | Almeida, W. A.       | 11  | 4       | ..... | 132   |
| Aguiar, J. A.         | 12  | 4       | ..... | 369   | Almeida, W. M. M.    | 11  | 4       | ..... | 240   |
| Aguiar, J. A.         | 13  | 3       | 5     | ..... | Alonso, J. A.        | 11  | 1       | 1     | ..... |
| Aguiar, J. A.         | 13  | 1       | 5     | ..... | Altshuler, B.        | 11  | 5       | A     | ..... |
| Aguiar, M. A. M. de   | 11  | 3       | 7     | ..... | Altshuler, E.        | 11  | 4       | ..... | 350   |
| Aguiar, M. C. de O.   | 11  | 4       | ..... | 283   | Alvarez, F.          | 13  | 4       | ..... | 214   |
| Aguilar, A. C.        | 12  | 4       | ..... | 259   | Alves, A. R.         | 11  | 1       | 9     | ..... |
| Aiello, O. E.         | 12  | 4       | ..... | 101   | Alves, A. S.         | 12  | 1       | 9     | ..... |
| Aitchison, J. S.      | 11  | 3       | 10    | ..... | Alves, C. A. P.      | 11  | 4       | ..... | 81    |
| Albuquerque, A. S. de | 11  | 4       | ..... | 133   | Alves, C. S.         | 11  | 4       | ..... | 134   |
| Albuquerque, E. L.    | 11  | 4       | ..... | 282   | Alves, H. W. L.      | 12  | 4       | ..... | 261   |
| Albuquerque, E. L.    | 11  | 4       | ..... | 283   | Alves, H. W. L.      | 11  | 3       | 9     | ..... |
| Albuquerque, E. L.    | 13  | 4       | ..... | 169   | Alves, J. L. A.      | 12  | 4       | ..... | 261   |
| Albuquerque, J. E. de | 13  | 3       | 7     | ..... | Alves, J. L. A.      | 11  | 3       | 9     | ..... |
| Albuquerque, M. P. de | 13  | 4       | ..... | 169   | Alves, J. R. V.      | 13  | 4       | ..... | 210   |
| Albuquerque, M. P. de | 11  | 1       | 7     | ..... | Alves, K. M. B.      | 12  | 4       | ..... | 149   |
| Albuquerque, M. P. de | 12  | 4       | ..... | 152   | Alves, K. M. B.      | 12  | 4       | ..... | 152   |
| Albuquerque, M. P. de | 12  | 1       | 1     | ..... | Alves, M. A. R.      | 13  | 1       | 10    | ..... |
| Albuquerque, M. P. de | 12  | 1       | 1     | ..... | Alves, M. do C. M.   | 11  | 1       | 6     | ..... |

| Autor                    | Dia | Período | Sala | Pág. | Autor                | Dia | Período | Sala | Pág. |
|--------------------------|-----|---------|------|------|----------------------|-----|---------|------|------|
| Alves, M. do C. M.       | 13  | 4       |      | 175  | Anoardo, E.          | 12  | 1       | 7    | 324  |
| Alves, M. do C. M.       | 12  | 1       | 1    | 244  | Anoardo, E.          | 12  | 4       |      | 328  |
| Alves, M. V.             | 12  | 4       |      | 48   | Anoardo, E.          | 11  | 4       |      | 303  |
| Alves, M. V.             | 12  | 4       |      | 262  | Anselmo, D. H. A. L. | 13  | 4       |      | 169  |
| Alves, N.                | 13  | 4       |      | 313  | Anteneodo, C.        | 12  | 4       |      | 113  |
| Alves, N.                | 13  | 4       |      | 314  | Antunes, A.          | 11  | 3       | 4    | 60   |
| Alves, N. A.             | 12  | 1       | 7    | 86   | Antunes, A. B.       | 11  | 3       | 2    | 165  |
| Alves, O. C.             | 12  | 3       | 3    | 22   | Antunes, A. B.       | 13  | 3       | 2    | 157  |
| Alves, O. L.             | 12  | 4       |      | 196  | Anyele, H. T.        | 12  | 4       |      | 254  |
| Alves, O. L.             | 11  | 4       |      | 280  | Appezato, P. de C.   | 11  | 4       |      | 75   |
| Alves, O. L.             | 11  | 4       |      | 186  | Aquere Filho, K.     | 13  | 4       |      | 33   |
| Alves, O. L.             | 12  | 4       |      | 201  | Arafa, M.            | 13  | 3       | 9    | 292  |
| Alves, R. M. P.          | 13  | 4       |      | 174  | Arai, N. N.          | 12  | 4       |      | 256  |
| Alves, V. M.             | 12  | 4       |      | 327  | Aranha, N.           | 12  | 4       |      | 196  |
| Amancio, L. E.           | 12  | 1       | 7    | 329  | Aranha, N.           | 12  | 1       | 1    | 246  |
| Amaral Jr, M. R. do      | 11  | 4       |      | 146  | Aranha, N.           | 11  | 4       |      | 184  |
| Amaral, L.               | 13  | 1       | 6    | 370  | Aranha, N.           | 12  | 4       |      | 430  |
| Amaral, L.               | 13  | 4       |      | 173  | Araujo Neto, P.      | 13  | 4       |      | 210  |
| Amaral, L.               | 13  | 4       |      | 372  | Araujo, A. A.        | 13  | 4       |      | 380  |
| Amaral, L.               | 13  | 4       |      | 375  | Araujo, A. E. P. de  | 13  | 4       |      | 209  |
| Amaral, L. Q. do         | 13  | 1       | 7    | 336  | Araujo, C. B. D.     | 11  | 3       | 10   | 421  |
| Amaral, L. Q. do         | 12  | 3       | 7    | 320  | Araujo, C. B. de     | 12  | 1       | 10   | 403  |
| Amaral, O. A. V. do      | 11  | 4       |      | 40   | Araujo, C. B. de     | 12  | 1       | 10   | 405  |
| Amato, M. A.             | 12  | 1       | 7    | 323  | Araujo, C. B. de     | 12  | 4       |      | 406  |
| Amores, E. B. de         | 12  | 4       |      | 25   | Araujo, C. B. de     | 12  | 1       | 10   | 405  |
| Amorim, H. S. de         | 11  | 4       |      | 20   | Araujo, C. B. de     | 12  | 1       | 10   | 403  |
| Amorim, H. T.            | 11  | 4       |      | 425  | Araujo, C. B. de     | 12  | 4       |      | 406  |
| Ana, M. S.               | 11  | 4       |      | 239  | Araujo, D. B. de     | 11  | 4       |      | 185  |
| Anazawa, R. M.           | 12  | 4       |      | 46   | Araujo, E. B. de     | 11  | 1       | 6    | 396  |
| An, C. Y.                | 12  | 4       |      | 255  | Araujo, E. B. de     | 11  | 4       |      | 240  |
| Anda, E. V.              | 12  | 4       |      | 158  | Araujo, J. M. da     | 11  | 4       |      | 84   |
| Anda, E. V.              | 12  | 4       |      | 158  | Araujo, J. M. de     | 11  | 4       |      | 84   |
| Anda, E. V.              | 13  | 4       |      | 265  | Araujo, M. A. B. de  | 11  | 4       |      | 185  |
| Anda, E. V.              | 12  | 3       | 9    | 252  | Araujo, M. A. B. de  | 11  | 4       |      | 240  |
| Anda, E. V.              | 13  | 1       | 9    | 290  | Araujo, M. B. de     | 11  | 4       |      | 300  |
| Anda, E. V.              | 13  | 4       |      | 269  | Araujo, M. B. de     | 11  | 4       |      | 301  |
| Anda, E. V.              | 12  | 4       |      | 162  | Araujo, M. B. de     | 11  | 4       |      | 301  |
| Andrade Jr, J. S. de     | 11  | 3       | 7    | 339  | Araujo, M. T. de     | 11  | 4       |      | 425  |
| Andrade Jr, R. de        | 12  | 3       | 5    | 365  | Araujo, R. C. de     | 11  | 4       |      | 133  |
| Andrade Junior, J. S. de | 11  | 4       |      | 299  | Araujo, R. C. de     | 12  | 4       |      | 154  |
| Andrade Junior, J. S. de | 11  | 3       | 7    | 338  | Araujo, R. C. de     | 11  | 4       |      | 134  |
| Andrade Junior, R. de    | 12  | 4       |      | 153  | Araujo, R. E. de     | 12  | 1       | 10   | 404  |
| Andrade, A. A.           | 11  | 4       |      | 189  | Araujo, S.           | 13  | 1       | 7    | 119  |
| Andrade, A. A.           | 12  | 4       |      | 203  | Araujo, S. A.        | 13  | 4       |      | 36   |
| Andrade, A. A.           | 12  | 3       | 10   | 428  | Ardila, D. R.        | 13  | 1       | 1    | 235  |
| Andrade, A. M. H. de     | 13  | 1       | 2    | 140  | Ardila, D. R.        | 11  | 4       |      | 185  |
| Andrade, L. H. da C.     | 12  | 4       |      | 228  | Ardisson, J. D.      | 11  | 4       |      | 132  |
| Andrade, R. F. S.        | 13  | 1       | 7    | 120  | Ardisson, J. D.      | 12  | 4       |      | 154  |
| Andrade, R. F. S.        | 12  | 4       |      | 114  | Ardisson, J. D.      | 12  | 4       |      | 154  |
| Andrade, R. F. S.        | 11  | 4       |      | 78   | Ardisson, J. D.      | 11  | 4       |      | 133  |
| Andreeta, J. P.          | 13  | 1       | 1    | 235  | Areas, E. P. G.      | 12  | 4       |      | 340  |
| Andreeta, J. P.          | 11  | 4       |      | 185  | Arellano, W. A.      | 11  | 3       | 9    | 275  |
| Andreeta, J. P.          | 13  | 1       | 1    | 234  | Arenzon, J. J.       | 12  | 1       | 7    | 87   |
| Anjos, V. de C. dos      | 13  | 1       | 9    | 290  | Arenzon, J. J.       | 11  | 4       |      | 74   |
| Anjos, V. de C. dos      | 13  | 1       | 9    | 289  | Arias, A. C.         | 13  | 4       |      | 311  |
| Anna, M. M. S.           | 11  | 4       |      | 40   | Armand, M.           | 11  | 5       | B    | 304  |

| Autor                    | Dia | Período | Sala | Pág. | Autor                  | Dia | Período | Sala | Pág. |
|--------------------------|-----|---------|------|------|------------------------|-----|---------|------|------|
| Armand, M.               | 11  | 1       | 7    | 305  | Bagnato, V.            | 11  | 4       |      | 44   |
| Arnaut, H. H.            | 13  | 4       |      | 417  | Bagnato, V. S.         | 11  | 3       | 4    | 61   |
| Arovas, D.               | 12  | 4       |      | 104  | Bagnato, V. S.         | 11  | 3       | 4    | 60   |
| Arruda, A. S. de         | 11  | 4       |      | 85   | Bagnato, V. S.         | 11  | 3       | 4    | 61   |
| Artaxo, P.               | 12  | 4       |      | 51   | Bagnato, V. S.         | 11  | 4       |      | 439  |
| Assch, A.                | 11  | 3       | 10   | 421  | Bagnato, V. S.         | 12  | 4       |      | 198  |
| Assch, A.                | 11  | 3       | 10   | 421  | Bagnato, V. S.         | 11  | 3       | 4    | 61   |
| Assuncao, F. R.          | 11  | 4       |      | 132  | Bagnato, V. S.         | 11  | 4       |      | 184  |
| Aubreton, J.             | 12  | 3       | 6    | 384  | Bagnato, V. S.         | 12  | 4       |      | 48   |
| Auler, L. T. S.          | 11  | 4       |      | 237  | Bagnato, V. S.         | 12  | 4       |      | 49   |
| Auler, L. T. S.          | 11  | 4       |      | 241  | Bagnato, V. S.         | 12  | 4       |      | 50   |
| Avanci, L. H.            | 13  | 1       | 6    | 371  | Bagnato, V. S.         | 11  | 3       | 4    | 60   |
| Avanci, L. H.            | 12  | 1       | 9    | 250  | Bagnato, V. S.         | 13  | 4       |      | 419  |
| Avila, M. A.             | 11  | 4       |      | 349  | Bagnato, V. S.         | 11  | 1       | 10   | 412  |
| Avila, M. de A.          | 11  | 1       | 5    | 348  | Bahiana, M.            | 11  | 3       | 7    | 339  |
| Aviles, R.               | 11  | 4       |      | 132  | Baibich, M. N.         | 11  | 3       | 2    | 165  |
| Awana, V. P. S.          | 12  | 4       |      | 369  | Baibich, M. N.         | 13  | 3       | 2    | 157  |
| Ayala, A. P.             | 12  | 3       | 1    | 196  | Baierle, R. J.         | 12  | 4       |      | 264  |
| Ayala, A. P.             | 12  | 4       |      | 230  | Bakuzis, A. F.         | 11  | 4       |      | 296  |
| Ayta, W. E. F.           | 12  | 4       |      | 197  | Bakuzis, A. F.         | 11  | 4       |      | 297  |
| Ayta, W. E. F.           | 13  | 4       |      | 208  | Bakuzis, A. F.         | 11  | 4       |      | 300  |
| Azevedo, A.              | 13  | 4       |      | 178  | Balancin, O.           | 11  | 3       | 1    | 192  |
| Azevedo, A.              | 11  | 3       | 2    | 165  | Baldan, M.             | 11  | 4       |      | 75   |
| Azevedo, A.              | 11  | 3       | 2    | 164  | Baldan, M. R.          | 12  | 4       |      | 108  |
| Azevedo, E. R.           | 11  | 4       |      | 236  | Baldochi, S. L.        | 12  | 4       |      | 198  |
| Azevedo, E. R.           | 13  | 1       | 3    | 30   | Baldochi, S. L.        | 12  | 4       |      | 230  |
| Azevedo, E. R.           | 12  | 4       |      | 14   | Baldochi, S. L.        | 12  | 4       |      | 202  |
| Azevedo, E. R.           | 12  | 4       |      | 14   | Balogh, D. T.          | 13  | 4       |      | 312  |
| Azevedo, G. de M.        | 13  | 1       | 6    | 371  | Balogh, D. T.          | 12  | 4       |      | 327  |
| Azevedo, I. S.           | 13  | 1       | 5    | 356  | Baltazar-Rodrigues, J. | 13  | 4       |      | 216  |
| Azevedo, I. S.           | 11  | 4       |      | 130  | Balzuweit, K.          | 13  | 4       |      | 206  |
| Azevedo, W. M. de        | 12  | 1       | 10   | 403  | Bandeira, I. N.        | 12  | 4       |      | 255  |
| Bachman, L.              | 11  | 4       |      | 81   | Bandeira, I. N.        | 12  | 1       | 9    | 251  |
| Baesso, M.               | 12  | 4       |      | 200  | Bandeira, I. N.        | 11  | 1       | 9    | 279  |
| Baesso, M. L.            | 12  | 4       |      | 326  | Baptista, G. B.        | 13  | 3       | 6    | 378  |
| Baesso, M. L.            | 11  | 4       |      | 189  | Baptista, G. B.        | 13  | 3       | 6    | 378  |
| Baesso, M. L.            | 12  | 4       |      | 203  | Baptista, M. da S.     | 13  | 4       |      | 69   |
| Baesso, M. L.            | 12  | 3       | 10   | 428  | Baptista, M. da S.     | 13  | 4       |      | 69   |
| Baffa Filho, O.          | 12  | 4       |      | 24   | Baptistella, L. H. B.  | 12  | 4       |      | 200  |
| Baffa Filho, O.          | 12  | 4       |      | 27   | Baqueiro, D. M.        | 12  | 1       | 4    | 52   |
| Baffa, O.                | 12  | 4       |      | 26   | Baranauskas, V.        | 12  | 4       |      | 388  |
| Baffa, O.                | 12  | 4       |      | 26   | Baranauskas, V.        | 11  | 1       | 6    | 395  |
| Baggio-Saitovitch, E.    | 13  | 4       |      | 169  | Baran, Z.              | 12  | 4       |      | 227  |
| Baggio-Saitovitch, E.    | 11  | 4       |      | 351  | Barbatti, M.           | 11  | 1       | 4    | 38   |
| Baggio-Saitovitch, E.    | 12  | 1       | 2    | 171  | Barberato, C.          | 12  | 4       |      | 340  |
| Baggio-Saitovitch, E.    | 13  | 1       | 5    | 356  | Barberato, C.          | 13  | 3       | 7    | 309  |
| Baggio-Saitovitch, E.    | 11  | 4       |      | 130  | Barberato, C.          | 12  | 1       | 1    | 244  |
| Baggio-Saitovitch, E.    | 11  | 4       |      | 131  | Barberi, R.            | 12  | 1       | 7    | 323  |
| Baggio-Saitovitch, E.    | 11  | 4       |      | 132  | Barberis, G. E.        | 11  | 4       |      | 240  |
| Baggio-Saitovitch, E.    | 13  | 4       |      | 219  | Barberis, G. E.        | 11  | 4       |      | 187  |
| Baggio-Saitovitch, E.    | 11  | 4       |      | 353  | Barberis, G. E.        | 11  | 4       |      | 135  |
| Baggio-Saitovitch, E.    | 11  | 4       |      | 354  | Barbero, G.            | 12  | 1       | 7    | 322  |
| Baggio-Saitovitch, E. M. | 12  | 4       |      | 366  | Barbero, G.            | 12  | 1       | 7    | 323  |
| Baggio-Saitovitch, E. M. | 11  | 4       |      | 350  | Barbieri, R. S.        | 11  | 4       |      | 44   |
| Baggio-Saitovitch, E. M. | 11  | 4       |      | 128  | Barbieri, R. S.        | 11  | 4       |      | 45   |
| Baggio-Saitovitch, E. M. | 13  | 1       | 2    | 141  | Barbosa Filho, F. F.   | 13  | 4       |      | 97   |
| Baggio-Saitovitch, E. M. | 13  | 1       | 5    | 357  |                        |     |         |      |      |

| Autor                | Dia | Período | Sala | Pág. | Autor                | Dia | Período | Sala | Pág. |
|----------------------|-----|---------|------|------|----------------------|-----|---------|------|------|
| Barbosa Neto, N. M.  | 11  | 1       | 1    | 222  | Bastone, E. de C.    | 12  | 4       |      | 367  |
| Barbosa Neto, N. M.  | 11  | 1       | 1    | 223  | Bastos, T. C.        | 12  | 4       |      | 328  |
| Barbosa, A. C. de C. | 13  | 4       |      | 172  | Batista, A.          | 13  | 4       |      | 206  |
| Barbosa, C. R. H.    | 12  | 4       |      | 366  | Batista, F. A.       | 11  | 4       |      | 132  |
| Barbosa, C. R. H.    | 11  | 4       |      | 352  | Batista, J. A.       | 12  | 4       |      | 226  |
| Barbosa, D. F. P.    | 12  | 4       |      | 432  | Batista, J. A.       | 12  | 4       |      | 264  |
| Barbosa, E. A.       | 12  | 3       | 10   | 429  | Batista, W. O. G.    | 12  | 4       |      | 227  |
| Barbosa, E. A.       | 13  | 1       | 10   | 435  | Bazeia, D.           | 12  | 4       |      | 327  |
| Barbosa, G. A.       | 13  | 4       |      | 414  | Bean, J. C.          | 11  | 4       |      | 284  |
| Barbosa, G. A.       | 13  | 3       | 10   | 413  | Beatrice, C. R. S.   | 13  | 4       |      | 219  |
| Barbosa, G. A.       | 11  | 1       | 10   | 410  | Bee, A.              | 13  | 1       | 7    | 335  |
| Barbosa, G. A.       | 11  | 1       | 10   | 411  | Behar, M.            | 13  | 4       |      | 372  |
| Barbosa, G. A.       | 13  | 4       |      | 417  | Behar, M.            | 13  | 1       | 6    | 371  |
| Barbosa, G. A.       | 13  | 4       |      | 417  | Behar, M.            | 13  | 4       |      | 373  |
| Barbosa, L. C.       | 11  | 3       | 9    | 275  | Behar, M.            | 13  | 4       |      | 375  |
| Barbosa, L. C.       | 11  | 3       | 9    | 274  | Behnia, K.           | 13  | 1       | 5    | 357  |
| Barbosa, L. C.       | 12  | 4       |      | 196  | Beims, M. W.         | 13  | 1       | 4    | 56   |
| Barbosa, L. C.       | 11  | 4       |      | 280  | Beims, M. W.         | 13  | 4       |      | 71   |
| Barbosa, L. C.       | 11  | 4       |      | 186  | Bein, B.             | 12  | 4       |      | 202  |
| Barbosa, L. C.       | 11  | 4       |      | 187  | Belanger, D. P.      | 12  | 1       | 2    | 171  |
| Barbosa, L. C.       | 12  | 4       |      | 201  | Bell, M. J. V.       | 13  | 1       | 9    | 289  |
| Barbosa, L. C.       | 12  | 4       |      | 430  | Belmonte, S. B.      | 12  | 4       |      | 149  |
| Barbosa, M. C.       | 13  | 3       | 7    | 90   | Belogorokhov, A. I.  | 11  | 4       |      | 287  |
| Barbosa, M. C.       | 13  | 3       | 7    | 89   | Belogorokhov, A. I.  | 11  | 4       |      | 288  |
| Barbosa, M. C.       | 11  | 4       |      | 74   | Belogorokhov, A. I.  | 13  | 4       |      | 270  |
| Barbosa, M. C.       | 12  | 4       |      | 341  | Belogorokhova, L. I. | 11  | 4       |      | 287  |
| Barbosa, M. C.       | 12  | 4       |      | 106  | Belogorokhova, L. I. | 11  | 4       |      | 288  |
| Barbosa, M. S.       | 12  | 1       | 4    | 54   | Belogorokhova, L. I. | 13  | 4       |      | 270  |
| Barbosa, P. C. de C. | 11  | 4       |      | 437  | Belo, L. C. M.       | 11  | 1       | 2    | 125  |
| Barbosa, P. C. de C. | 11  | 4       |      | 438  | Bemski, G.           | 12  | 3       | 3    | 22   |
| Bargo, P. R.         | 11  | 1       | 3    | 10   | Bemski, G.           | 11  | 4       |      | 20   |
| Bargo, P. R.         | 13  | 1       | 3    | 29   | Benatti, C. R.       | 11  | 4       |      | 21   |
| Bariev, R. Z.        | 12  | 1       | 5    | 364  | Benavente, E.        | 11  | 4       |      | 239  |
| Barja, P. R.         | 11  | 4       |      | 17   | Benevides, C. A.     | 12  | 4       |      | 432  |
| Barnes, G. T.        | 12  | 4       |      | 16   | Benevides, R. C.     | 12  | 4       |      | 255  |
| Barone, P. M. V. B.  | 12  | 1       | 7    | 329  | Bento, A. C.         | 11  | 4       |      | 189  |
| Barranco, A. V.      | 13  | 4       |      | 416  | Bento, A. C.         | 12  | 4       |      | 203  |
| Barranco, A. V.      | 13  | 4       |      | 417  | Bento, A. C.         | 12  | 3       | 10   | 428  |
| Barranco, A. V.      | 13  | 4       |      | 418  | Berggren, K. F.      | 12  | 1       | 9    | 250  |
| Barreto, A. M. F.    | 13  | 4       |      | 208  | Bernardes, A. T.     | 13  | 3       | 3    | 32   |
| Barrio, J. M.        | 13  | 3       | 1    | 247  | Bernardes, A. T.     | 12  | 4       |      | 103  |
| Barros, B.           | 11  | 4       |      | 353  | Bernardes, A. T.     | 12  | 4       |      | 342  |
| Barros, B.           | 11  | 4       |      | 354  | Bernardes, A. T.     | 13  | 1       | 7    | 119  |
| Barthem, V. M. T. S. | 13  | 1       | 2    | 141  | Bernardo, V.         | 12  | 4       |      | 385  |
| Bartra, W. L.        | 12  | 4       |      | 406  | Bernhard, B. H.      | 12  | 4       |      | 163  |
| Baruchel, J.         | 11  | 5       | 10   | 189  | Bernhard, B. H.      | 11  | 4       |      | 148  |
| Baseia, B.           | 12  | 4       |      | 50   | Bernussi, A. A.      | 13  | 4       |      | 267  |
| Baseia, B.           | 13  | 4       |      | 419  | Bernussi, A. A.      | 12  | 4       |      | 260  |
| Baseia, B.           | 13  | 4       |      | 419  | Berton, R.           | 13  | 4       |      | 311  |
| Baseia, B.           | 11  | 1       | 10   | 412  | Bertotti, G.         | 13  | 1       | 2    | 142  |
| Basmaji, P.          | 12  | 4       |      | 258  | Bessa Filho, E.      | 12  | 4       |      | 263  |
| Basmaji, P.          | 13  | 4       |      | 266  | Bettega, M. H. F.    | 11  | 1       | 4    | 38   |
| Basmaji, P.          | 13  | 4       |      | 266  | Bettega, M. H. F.    | 11  | 4       |      | 42   |
| Basmaji, P.          | 13  | 4       |      | 269  | Bettega, M. H. F.    | 11  | 1       | 4    | 37   |
| Basmaji, P.          | 12  | 4       |      | 262  | Bettini, J.          | 12  | 1       | 9    | 249  |
| Basso, V.            | 13  | 1       | 2    | 142  | Bettini, J.          | 12  | 1       | 9    | 250  |

| Autor                  | Dia | Período | Sala | Pág. | Autor               | Dia | Período | Sala | Pág. |
|------------------------|-----|---------|------|------|---------------------|-----|---------|------|------|
| Bezerra Jr, A. G.      | 12  | 4       |      | 406  | Bradley, C. C.      | 13  | 2       | A    | 409  |
| Bezerra-Jr, A. G.      | 12  | 1       | 10   | 403  | Braga, A. F. B.     | 13  | 1       | 1    | 234  |
| Bezerra-Jr, A. G.      | 11  | 3       | 10   | 421  | Braga, E. S.        | 13  | 1       | 10   | 439  |
| Bezerra, E. F.         | 11  | 1       | 1    | 223  | Branco, J. R. T.    | 13  | 1       | 7    | 119  |
| Bezerra, J. C.         | 13  | 4       |      | 268  | Branco, N. da S.    | 11  | 4       |      | 80   |
| Bianchi, R. F.         | 12  | 1       | 7    | 325  | Branco, N. da S.    | 11  | 4       |      | 81   |
| Bianchi, R. F.         | 11  | 3       | 7    | 339  | Brandao, S. C. C.   | 11  | 4       |      | 424  |
| Bian, S.               | 12  | 4       |      | 408  | Brandt, E. H.       | 12  | 3       | 5    | 364  |
| Bian, S.               | 12  | 4       |      | 409  | Brandt, E. H.       | 11  | 2       | A    | 360  |
| Biasi, R. S. de        | 11  | 4       |      | 236  | Brandt, M.          | 13  | 4       |      | 310  |
| Bielschowsky, C. E.    | 11  | 4       |      | 44   | Branicio, P. S.     | 12  | 4       |      | 102  |
| Bindilatti, V.         | 12  | 1       | 2    | 172  | Brasil, V. de B.    | 11  | 4       |      | 181  |
| Bindilatti, V.         | 13  | 4       |      | 170  | Bretas, R.          | 12  | 4       |      | 204  |
| Birtcher, R. C.        | 13  | 1       | 6    | 370  | Brito, A. L. de     | 13  | 4       |      | 419  |
| Bisch, P. M.           | 12  | 4       |      | 114  | Brito, A. L. de     | 13  | 4       |      | 419  |
| Bisch, P. M.           | 13  | 4       |      | 34   | Brito, P. E. de     | 12  | 1       | 5    | 363  |
| Bisch, P. M.           | 12  | 1       | 3    | 4    | Brito, V. da P.     | 12  | 4       |      | 118  |
| Bisch, P. M.           | 11  | 3       | 3    | 1    | Brocklesby, W. S.   | 11  | 4       |      | 423  |
| Bisch, P. M.           | 13  | 4       |      | 35   | Brondino, O. C.     | 12  | 1       | 6    | 389  |
| Bisch, P. M.           | 13  | 4       |      | 6    | Brown, I. G.        | 12  | 4       |      | 385  |
| Bisch, P. M.           | 11  | 4       |      | 20   | Bruckmann, M. E.    | 13  | 1       | 6    | 370  |
| Bispo, A. P.           | 12  | 4       |      | 196  | Bruckmann, M. E.    | 13  | 4       |      | 173  |
| Bispo, J. de M.        | 12  | 4       |      | 24   | Brum, J. A.         | 11  | 4       |      | 283  |
| Bispo, J. de M.        | 12  | 4       |      | 26   | Brum, J. A.         | 11  | 4       |      | 284  |
| Bitensky, I. S.        | 13  | 4       |      | 379  | Brunetti, A.        | 11  | 4       |      | 242  |
| Blak, A. R.            | 12  | 4       |      | 225  | Brunetti, A. H.     | 11  | 4       |      | 240  |
| Bloch, D.              | 13  | 1       | 4    | 57   | Brunetto, S. Q.     | 12  | 4       |      | 13   |
| Bloes, A. C.           | 13  | 4       |      | 310  | Brunetto, S. Q.     | 12  | 4       |      | 13   |
| Boas, J. M. V.         | 12  | 4       |      | 102  | Brunetto, S. Q.     | 12  | 4       |      | 14   |
| Bobagamba, T. J.       | 11  | 4       |      | 19   | Brunetto, S. Q.     | 11  | 1       | 3    | 12   |
| Boechat, B.            | 11  | 4       |      | 80   | Brunetto, S. Q.     | 11  | 1       | 3    | 12   |
| Boff, M. A. S.         | 13  | 4       |      | 175  | Brunetto, S. Q.     | 12  | 4       |      | 16   |
| Bolfarini, C.          | 12  | 1       | 6    | 389  | Brunnet, L. G.      | 11  | 3       | 7    | 63   |
| Bolivar-Marinez, L. E. | 12  | 1       | 3    | 4    | Bruno, A. C.        | 12  | 4       |      | 366  |
| Bonagamba, T. J.       | 11  | 4       |      | 239  | Bruno, A. C.        | 11  | 4       |      | 352  |
| Bonagamba, T. J.       | 11  | 4       |      | 239  | Bruno, A. C.        | 12  | 4       |      | 367  |
| Bonagamba, T. J.       | 11  | 3       | 7    | 339  | Bruno, A. C.        | 13  | 1       | 3    | 31   |
| Bonar, J. R.           | 11  | 3       | 10   | 421  | Bud'ko, S. L.       | 13  | 1       | 2    | 140  |
| Bonfadini, M. R.       | 13  | 4       |      | 206  | Bud'ko, S. L.       | 13  | 1       | 5    | 357  |
| Bonventi Jr, W.        | 11  | 4       |      | 438  | Bud'ko, S. L.       | 11  | 4       |      | 351  |
| Bonvent, J. J.         | 12  | 1       | 7    | 323  | Bue, M. L.          | 13  | 1       | 2    | 142  |
| Borges Jr, I.          | 11  | 4       |      | 44   | Buisson, O.         | 12  | 1       | 5    | 362  |
| Borges, A. N.          | 11  | 4       |      | 286  | Buisson, O.         | 12  | 1       | 5    | 361  |
| Borges, H.             | 11  | 4       |      | 148  | Bunkin, A.          | 11  | 4       |      | 437  |
| Borges, H. A.          | 11  | 1       | 2    | 125  | Bunkin, A.          | 11  | 4       |      | 438  |
| Borges, P. D.          | 13  | 4       |      | 273  | Bunkin, A.          | 11  | 4       |      | 438  |
| Borissevitch, G.       | 11  | 4       |      | 18   | Burgel, F. R.       | 11  | 4       |      | 19   |
| Bormio-Nunes, C.       | 11  | 1       | 5    | 349  | Busser, C. A. C.    | 12  | 4       |      | 162  |
| Bormio-Nunes, C.       | 11  | 4       |      | 352  | Bustamante, A.      | 11  | 4       |      | 238  |
| Bosco, C. A. de C.     | 12  | 3       | 10   | 429  | Buzano, C.          | 13  | 4       |      | 93   |
| Bosquetti, D.          | 11  | 4       |      | 284  | Cabral Jr, C. E.    | 13  | 4       |      | 218  |
| Bosquetti, D.          | 11  | 4       |      | 285  | Cabral, F. de A. O. | 11  | 4       |      | 134  |
| Botelho, E.            | 11  | 4       |      | 123  | Cabral, F. P. A.    | 13  | 4       |      | 313  |
| Bouabci, M. B.         | 12  | 1       | 7    | 89   | Cabral, L. R. E.    | 11  | 1       | 5    | 348  |
| Bourdon, A.            | 13  | 1       | 7    | 335  | Cabrera, G. G.      | 12  | 4       |      | 108  |
| Bourson, P.            | 13  | 1       | 1    | 233  | Caetano, C. A. C.   | 12  | 4       |      | 25   |

| Autor               | Dia | Período | Sala  | Pág.      | Autor                  | Dia | Período | Sala      | Pág.      |
|---------------------|-----|---------|-------|-----------|------------------------|-----|---------|-----------|-----------|
| Caetano, W.         | 11  | 4       | ..... | 18        | Cardoso, G. C.         | 13  | 3       | 10        | ..... 433 |
| Caffrey, M.         | 12  | 3       | 3     | ..... 22  | Cardoso, G. C.         | 11  | 4       | ..... 425 |           |
| Caihol, V.          | 12  | 4       | ..... | 393       | Cardoso, L. P.         | 13  | 1       | 6         | ..... 371 |
| Ca, J. R. G. de M.  | 12  | 4       | ..... | 106       | Cardoso, L. P.         | 12  | 1       | 9         | ..... 250 |
| Caldas, A.          | 11  | 4       | ..... | 144       | Caride, A. O.          | 11  | 4       | ..... 398 |           |
| Caldas, A.          | 11  | 4       | ..... | 144       | Caride, A. O.          | 13  | 4       | ..... 373 |           |
| Caldas, I. L.       | 13  | 4       | ..... | 67        | Carles, R.             | 12  | 4       | ..... 258 |           |
| Caldas, I. L.       | 13  | 4       | ..... | 69        | Carmo, L. C. S. do     | 11  | 4       | ..... 437 |           |
| Caldas, I. L.       | 13  | 4       | ..... | 69        | Carmo, L. C. S. do     | 13  | 4       | ..... 217 |           |
| Caldas, I. L.       | 13  | 4       | ..... | 70        | Carmo, L. C. S. do     | 11  | 4       | ..... 438 |           |
| Caldas, M.          | 12  | 4       | ..... | 264       | Carmona, H. A.         | 13  | 4       | ..... 268 |           |
| Caldas, M. J.       | 13  | 4       | ..... | 207       | Carneiro, A. A. O.     | 12  | 4       | ..... 27  |           |
| Caldas, M. J.       | 12  | 1       | 3     | ..... 4   | Carneiro, C. E. I.     | 12  | 1       | 7         | ..... 89  |
| Caldas, M. J.       | 13  | 1       | 7     | ..... 336 | Carneiro, C. E. I.     | 11  | 4       | ..... 79  |           |
| Caldas, M. J.       | 12  | 4       | ..... | 328       | Carneiro, G.           | 12  | 3       | 7         | ..... 98  |
| Caliri, A.          | 12  | 4       | ..... | 101       | Carneiro, G.           | 13  | 3       | 5         | ..... 359 |
| Caliri, A.          | 12  | 4       | ..... | 341       | Carreno, M. P. C.      | 12  | 4       | ..... 262 |           |
| Caliri, A.          | 12  | 4       | ..... | 343       | Carrico, A. S.         | 13  | 4       | ..... 174 |           |
| Caliri, A.          | 12  | 4       | ..... | 109       | Carrico, A. S.         | 13  | 4       | ..... 167 |           |
| Calves, N. G.       | 11  | 1       | 4     | ..... 38  | Carvalho Junior, W.    | 12  | 4       | ..... 260 |           |
| Calves, N. G.       | 11  | 1       | 4     | ..... 37  | Carvalho Junior, W. de | 13  | 4       | ..... 267 |           |
| Calvo, E. J.        | 12  | 4       | ..... | 392       | Carvalho, A. T. G. de  | 13  | 1       | 9         | ..... 289 |
| Calvo, R.           | 11  | 4       | ..... | 17        | Carvalho, C. A. A. de  | 13  | 4       | ..... 265 |           |
| Camargo, P. C. de   | 13  | 1       | 2     | ..... 140 | Carvalho, C. L.        | 13  | 4       | ..... 316 |           |
| Camargo, P. C. de   | 12  | 4       | ..... | 151       | Carvalho, C. R. C. de  | 11  | 1       | 4         | ..... 37  |
| Camelo Neto, G.     | 12  | 4       | ..... | 117       | Carvalho, C. R. C. de  | 11  | 1       | 4         | ..... 39  |
| Camilo Jr, A.       | 12  | 4       | ..... | 332       | Carvalho, C. R. de     | 12  | 4       | ..... 24  |           |
| Camilo Jr, A.       | 11  | 1       | 7     | ..... 306 | Carvalho, C. R. de     | 12  | 4       | ..... 26  |           |
| Campanha, J. R.     | 13  | 4       | ..... | 219       | Carvalho, I. C. S.     | 11  | 3       | 10        | ..... 421 |
| Campos, C. A.       | 12  | 3       | 1     | ..... 195 | Carvalho, I. C. S.     | 13  | 1       | 10        | ..... 426 |
| Campos, M. S. de    | 13  | 4       | ..... | 317       | Carvalho, I. C. S.     | 11  | 3       | 10        | ..... 421 |
| Campos, O. O. S.    | 11  | 4       | ..... | 298       | Carvalho, J. F.        | 13  | 1       | 1         | ..... 234 |
| Campos, P. R. de A. | 13  | 4       | ..... | 95        | Carvalho, M. M. G. de  | 12  | 1       | 9         | ..... 249 |
| Candela, D. R. S.   | 11  | 4       | ..... | 131       | Carvalho, M. M. G. de  | 12  | 1       | 9         | ..... 250 |
| Canevarollo, O. A.  | 11  | 4       | ..... | 239       | Carvalho, R. P. D.     | 11  | 4       | ..... 17  |           |
| Canfield, P. C.     | 13  | 1       | 2     | ..... 140 | Carvalho, V. E. de     | 12  | 1       | 6         | ..... 390 |
| Cannas, S. A.       | 11  | 4       | ..... | 76        | Carvalho, V. R. de     | 13  | 3       | 10        | ..... 433 |
| Cannas, S. A.       | 11  | 1       | 7     | ..... 111 | Casanova, F.           | 12  | 4       | ..... 204 |           |
| Cantao, M. P.       | 11  | 4       | ..... | 399       | Casanova, F.           | 12  | 4       | ..... 205 |           |
| Canuto, S.          | 11  | 4       | ..... | 41        | Casanova, F.           | 12  | 4       | ..... 205 |           |
| Canuto, S.          | 11  | 4       | ..... | 42        | Casarin, F. de O.      | 13  | 4       | ..... 175 |           |
| Canuto, S.          | 11  | 4       | ..... | 43        | Cascante, F. E. A.     | 13  | 4       | ..... 381 |           |
| Canuto, S.          | 12  | 1       | 4     | ..... 53  | Cassia-Moura, R.       | 13  | 4       | ..... 7   |           |
| Canuto, S.          | 11  | 4       | ..... | 45        | Castelletto, V.        | 12  | 4       | ..... 340 |           |
| Canuto, S.          | 12  | 1       | 4     | ..... 52  | Castilho, C. M. C. de  | 13  | 4       | ..... 382 |           |
| Canuto, S.          | 13  | 1       | 4     | ..... 56  | Castillo, I. A.        | 11  | 4       | ..... 144 |           |
| Caparelli, E. de C. | 13  | 3       | 10    | ..... 413 | Castillo, I. A.        | 11  | 1       | 5         | ..... 346 |
| Caparica, A. de A.  | 13  | 4       | ..... | 96        | Castillo, I. A.        | 11  | 4       | ..... 352 |           |
| Capaz, R. B.        | 13  | 1       | 7     | ..... 336 | Castin, Y.             | 13  | 4       | ..... 419 |           |
| Carara, M.          | 11  | 3       | 2     | ..... 165 | Castro Neto, A. H.     | 12  | 3       | 9         | ..... 253 |
| Carara, M.          | 11  | 4       | ..... | 134       | Castro, A. R. B. de    | 12  | 4       | ..... 50  |           |
| Carbonio, R. E.     | 11  | 1       | 1     | ..... 221 | Castro, C. C. de       | 13  | 4       | ..... 379 |           |
| Cardona, P. S. P.   | 12  | 4       | ..... | 49        | Castro, C. C. de       | 13  | 4       | ..... 379 |           |
| Cardoso, A. J. C.   | 11  | 1       | 9     | ..... 277 | Castro, C. C. de       | 13  | 4       | ..... 382 |           |
| Cardoso, C. A.      | 11  | 1       | 5     | ..... 348 | Castro, C. F. de S.    | 12  | 1       | 4         | ..... 53  |
| Cardoso, F. C.      | 12  | 4       | ..... | 327       | Castro, C. S. C.       | 12  | 1       | 6         | ..... 391 |

| Autor                   | Dia | Periodo | Sala  | Pág.  | Autor                 | Dia                   | Periodo | Sala  | Pág.  |       |
|-------------------------|-----|---------|-------|-------|-----------------------|-----------------------|---------|-------|-------|-------|
| Castro, J. D. e         | 13  | 4       | ..... | 172   | Chinaglia, D. L.      | 12                    | 4       | ..... | 343   |       |
| Castro, J. D. e         | 11  | 3       | 2     | ..... | 164                   | Chinaglia, D. L.      | 12      | 4     | ..... |       |
| Castro, M. A. de        | 11  | 4       | ..... | 40    | Chinaglia, D. L.      | 13                    | 3       | 7     | ..... |       |
| Castro, M. P. P. de     | 12  | 1       | 9     | ..... | 249                   | Chinaglia, E. F.      | 13      | 4     | ..... |       |
| Castro, S. C. de        | 11  | 4       | ..... | 186   | Chinaglia, E. F.      | 13                    | 4       | ..... |       |       |
| Castro, S. C. de        | 12  | 4       | ..... | 392   | Chiquito, A. J.       | 11                    | 1       | 9     | ..... |       |
| Castro, S. G. C. de     | 12  | 4       | ..... | 392   | Chiquito, A. J.       | 12                    | 4       | ..... |       |       |
| Castro, S. G. C. de     | 12  | 1       | 1     | ..... | 245                   | Chiquito, A. J.       | 12      | 4     | ..... |       |
| Castro, T. T. M. de     | 11  | 4       | ..... | 77    | Choque, N. M. S.      | 11                    | 4       | ..... |       |       |
| Catalani, F.            | 12  | 4       | ..... | 48    | Chou, L.              | 12                    | 4       | ..... |       |       |
| Catherinot, A.          | 12  | 3       | 6     | ..... | 384                   | Christ, B.            | 12      | 4     | ..... |       |
| Caticha, N.             | 11  | 4       | ..... | 122   | Chubaci, J. F. D.     | 12                    | 4       | ..... |       |       |
| Cattani, M.             | 12  | 4       | ..... | 387   | Chubaci, J. F. D.     | 11                    | 4       | ..... |       |       |
| Catunda, T.             | 11  | 4       | ..... | 189   | Cilense, M.           | 13                    | 4       | ..... |       |       |
| Catunda, T.             | 12  | 4       | ..... | 203   | Cinelli, M. J.        | 12                    | 3       | 6     | ..... |       |
| Catunda, T.             | 12  | 3       | 10    | ..... | 428                   | Claro, F.             | 13      | 1     | 9     | ..... |
| Cavalcante, E. M.       | 13  | 4       | ..... | 318   | Clerici, J. H.        | 12                    | 4       | ..... |       |       |
| Cavalcante, W. L.       | 13  | 4       | ..... | 92    | Closs, H.             | 12                    | 1       | 9     | ..... |       |
| Cavalcanti, A. V. de A. | 13  | 4       | ..... | 314   | Closs, H.             | 11                    | 1       | 9     | ..... |       |
| Cavalcanti, L. P.       | 12  | 3       | 3     | ..... | 23                    | Coaquira, J. A. H.    | 11      | 4     | ..... |       |
| Cavalcanti, R. M.       | 13  | 4       | ..... | 265   | Coelho, L. F. S.      | 11                    | 1       | 4     | ..... |       |
| Cavalcanti, S. B.       | 13  | 3       | 10    | ..... | 413                   | Coelho, L. F. S.      | 11      | 1     | 4     | ..... |
| Cavalli, A.             | 12  | 1       | 7     | ..... | 329                   | Cohenca, C. H.        | 11      | 4     | ..... |       |
| Cavalli, A.             | 12  | 1       | 3     | ..... | 3                     | Coimbra, D.           | 11      | 4     | ..... |       |
| C, B. D. S. S.          | 11  | 4       | ..... | 86    | Coleman, J. J.        | 12                    | 4       | ..... |       |       |
| Cerdeira, F.            | 11  | 4       | ..... | 284   | Collado, V. M.        | 13                    | 4       | ..... |       |       |
| Cesar, C. L.            | 11  | 3       | 9     | ..... | 275                   | Colnago, L. A.        | 11      | 1     | 3     | ..... |
| Cesar, C. L.            | 11  | 3       | 9     | ..... | 274                   | Compagnon-Caillol, V. | 12      | 1     | 1     | ..... |
| Cesar, C. L.            | 13  | 3       | 10    | ..... | 433                   | Conde, A. J. G.       | 11      | 1     | 3     | ..... |
| Cesar, C. L.            | 11  | 4       | ..... | 186   | Consiglio, R.         | 12                    | 3       | 2     | ..... |       |
| Cesar, C. L.            | 11  | 4       | ..... | 187   | Constantino, C. J. L. | 12                    | 1       | 7     | ..... |       |
| Cesar, C. L.            | 11  | 4       | ..... | 280   | Continentino, M. A.   | 11                    | 1       | 2     | ..... |       |
| Cescato, L.             | 11  | 4       | ..... | 437   | Continentino, M. A.   | 11                    | 1       | 2     | ..... |       |
| Cescato, L.             | 13  | 1       | 10    | ..... | 440                   | Continentino, M. A.   | 11      | 4     | ..... |       |
| Cescato, L.             | 13  | 1       | 10    | ..... | 439                   | Continentino, M. A.   | 11      | 1     | 2     | ..... |
| Cezar, J. C.            | 12  | 1       | 1     | ..... | 244                   | Continentino, M. A.   | 11      | 4     | ..... |       |
| Chacham, H.             | 13  | 1       | 4     | ..... | 57                    | Coqblin, B.           | 12      | 4     | ..... |       |
| Chacham, H.             | 13  | 1       | 9     | ..... | 289                   | Corat, E. J.          | 12      | 3     | 6     | ..... |
| Chalub, F. A.           | 13  | 4       | ..... | 93    | Corat, E. J.          | 12                    | 4       | ..... |       |       |
| Chang, S.               | 13  | 1       | 6     | ..... | 371                   | Corat, E. J.          | 12      | 4     | ..... |       |
| Chaparro, G. A. L.      | 12  | 4       | ..... | 105   | Corat, E. J.          | 12                    | 4       | ..... |       |       |
| Charret, I. da C.       | 12  | 4       | ..... | 159   | Corat, E. J.          | 12                    | 3       | 6     | ..... |       |
| Chaudhuri, P.           | 11  | 4       | ..... | 40    | Cornejo, D. R.        | 13                    | 1       | 2     | ..... |       |
| Chaves, A. S.           | 12  | 4       | ..... | 228   | Cornejo, D. R.        | 12                    | 1       | 2     | ..... |       |
| Chavez, F. V.           | 12  | 4       | ..... | 204   | Cornejo, D. R.        | 11                    | 4       | ..... |       |       |
| Chavez, F. V.           | 12  | 4       | ..... | 205   | Correia, R. R. B.     | 12                    | 1       | 10    | ..... |       |
| Chesman, C.             | 13  | 4       | ..... | 178   | Cortes, R.            | 12                    | 1       | 1     | ..... |       |
| Chesman, C.             | 11  | 3       | 2     | ..... | 164                   | Cortezao, S. U.       | 12      | 4     | ..... |       |
| Chevrollier, M.         | 13  | 1       | 4     | ..... | 57                    | Costa Filho, A. J. da | 11      | 4     | ..... |       |
| Chiappe, G.             | 12  | 3       | 9     | ..... | 252                   | Costa Filho, R. N.    | 13      | 4     | ..... |       |
| Chiappe, G.             | 12  | 4       | ..... | 162   | Costa Filho, R. N.    | 11                    | 3       | 2     | ..... |       |
| Chiappin, J. R. N.      | 13  | 3       | 7     | ..... | 91                    | Costa Filho, R. N. da | 11      | 3     | 9     | ..... |
| Chiaradia, C.           | 12  | 4       | ..... | 24    | Costa Jr, A. T. da    | 13                    | 4       | ..... |       |       |
| Chiaradia, C.           | 12  | 4       | ..... | 26    | Costa Jr, A. T. da    | 11                    | 3       | 2     | ..... |       |
| Chien, C. L.            | 11  | 3       | 2     | ..... | 165                   | Costa Jr, M. I. da    | 12      | 4     | ..... |       |
| Chinaglia, C. R.        | 12  | 1       | 6     | ..... | 389                   | Costa Jr, M. I. da    | 13      | 4     | ..... |       |

| Autor              | Dia | Período | Sala | Pág. | Autor                   | Dia | Período | Sala | Pág. |
|--------------------|-----|---------|------|------|-------------------------|-----|---------|------|------|
| Costa Jr, M. I. da | 11  | 4       |      | 130  | Cumin, L. M. G.         | 11  | 4       |      | 44   |
| Costa Neto, C.     | 11  | 4       |      | 239  | Cunha, A. G.            | 13  | 4       |      | 219  |
| Costa, B. J.       | 12  | 1       | 10   | 403  | Cunha, A. G.            | 11  | 4       |      | 353  |
| Costa, B. J.       | 12  | 4       |      | 202  | Cunha, A. G.            | 11  | 4       |      | 353  |
| Costa, B. J. da    | 11  | 4       |      | 188  | Cunha, A. G.            | 11  | 4       |      | 354  |
| Costa, B. V.       | 12  | 1       | 2    | 135  | Cunha, C.               | 12  | 1       | 4    | 52   |
| Costa, F. A. da    | 11  | 4       |      | 82   | Cunha, F. B.            | 12  | 4       |      | 114  |
| Costa, F. A. da    | 11  | 4       |      | 83   | Cunha, J. B. M. da      | 13  | 3       | 2    | 156  |
| Costa, F. A. da    | 11  | 4       |      | 84   | Cunha, J. B. M. da      | 11  | 1       | 2    | 125  |
| Costa, F. A. da    | 11  | 4       |      | 84   | Cunha, J. B. M. da      | 11  | 1       | 6    | 397  |
| Costa, F. A. da    | 11  | 4       |      | 84   | Cunha, J. B. M. da      | 13  | 4       |      | 175  |
| Costa, I. S.       | 12  | 1       | 4    | 52   | Cunha, J. B. M. da      | 11  | 4       |      | 148  |
| Costa, J. A. P. da | 12  | 4       |      | 197  | Cunha, M. F. da         | 12  | 4       |      | 262  |
| Costa, J. E. R.    | 12  | 1       | 2    | 135  | Cunha, S. F. da         | 12  | 4       |      | 149  |
| Costa, M. F. da    | 11  | 4       |      | 40   | Cunha, S. F. da         | 11  | 4       |      | 129  |
| Costa, M. V. T.    | 13  | 4       |      | 172  | Cunha, S. F. da         | 11  | 4       |      | 129  |
| Costa, M. V. T.    | 12  | 3       | 2    | 139  | Cuppo, F. L. S.         | 12  | 1       | 10   | 404  |
| Costa, M. V. T.    | 13  | 4       |      | 167  | Cuppo, F. L. S.         | 12  | 3       | 7    | 320  |
| Costa, M. V. T.    | 13  | 4       |      | 168  | Curado, E. M. F.        | 11  | 4       |      | 78   |
| Costa, M. V. T.    | 11  | 1       | 2    | 124  | Curado, E. M. F.        | 13  | 4       |      | 95   |
| Costa, R. M.       | 13  | 1       | 5    | 357  | Cura, V. L. D. M.       | 13  | 4       |      | 174  |
| Costa, S. C.       | 12  | 4       |      | 344  | Curvelo, A. A. da S.    | 12  | 1       | 7    | 330  |
| Costa, U. M. S.    | 13  | 3       | 7    | 91   | Cury, L. A.             | 11  | 1       | 9    | 277  |
| Costa, W. B. da    | 12  | 4       |      | 365  | Cury, L. A.             | 11  | 4       |      | 285  |
| Cottam, M. G.      | 13  | 4       |      | 167  | Cusatis, C.             | 11  | 4       |      | 436  |
| Cotta, T. A. P. G. | 11  | 4       |      | 298  | Cusatis, C.             | 12  | 4       |      | 198  |
| Courrol, L. C.     | 12  | 1       | 1    | 246  | Custodio, M. C. C.      | 13  | 1       | 1    | 233  |
| Courrol, L. C.     | 12  | 4       |      | 231  | D'Aguiar Neto, M. M. F. | 12  | 4       |      | 202  |
| Coutinho, K.       | 11  | 4       |      | 43   | D'Ajello, P. C. T.      | 11  | 4       |      | 398  |
| Coutinho, K.       | 12  | 1       | 4    | 53   | D'Ajello, P. C. T.      | 11  | 1       | 6    | 397  |
| Coutinho, S.       | 11  | 4       |      | 78   | D'Almeida, F. M. R.     | 12  | 1       | 5    | 362  |
| Coutinho, S.       | 12  | 4       |      | 117  | D'Almeida, F. M. R.     | 12  | 1       | 5    | 362  |
| Coutinho, S. G.    | 11  | 1       | 7    | 110  | D'Almeida, F. M. R.     | 12  | 1       | 5    | 362  |
| Cox, D. L.         | 13  | 2       | B    | 142  | D'Incao, J. P.          | 12  | 4       |      | 48   |
| Cox, H. M.         | 11  | 1       | 9    | 278  | Dacal, L. C. O.         | 13  | 3       | 9    | 292  |
| Cozac Neto, J.     | 11  | 4       |      | 236  | Dahmouche, K.           | 11  | 3       | 7    | 339  |
| Craievich, A. F.   | 11  | 4       |      | 280  | Damiao, A. J.           | 12  | 4       |      | 226  |
| Craievich, A. F.   | 12  | 4       |      | 340  | Dantas, A. L.           | 13  | 4       |      | 167  |
| Craievich, A. F.   | 13  | 3       | 7    | 309  | Dantas, A. L. L.        | 11  | 4       |      | 298  |
| Craievich, A. F.   | 12  | 1       | 1    | 244  | Dantas, C. M. A.        | 13  | 4       |      | 416  |
| Cremona, M.        | 13  | 4       |      | 217  | Dantas, C. M. A.        | 13  | 4       |      | 418  |
| Crestana, S.       | 12  | 4       |      | 51   | Dantas, C. M. A.        | 13  | 4       |      | 418  |
| Cruvinel, P. E.    | 12  | 4       |      | 51   | Dantas, S. de O.        | 12  | 1       | 7    | 329  |
| Cruvinel, P. E.    | 12  | 4       |      | 51   | Dardenne, L. E.         | 13  | 4       |      | 6    |
| Cruz, C. H. de B.  | 11  | 3       | 9    | 274  | Dargam, T. G.           | 11  | 4       |      | 286  |
| Cruz, F. C. da     | 12  | 4       |      | 47   | Davidovich, L.          | 11  | 1       | 10   | 412  |
| Cruz, H. R. da     | 13  | 3       | 7    | 91   | Davidovich, L.          | 11  | 1       | 10   | 411  |
| Cruz, J. M. R.     | 11  | 1       | 9    | 278  | Davidovich, L.          | 13  | 3       | 10   | 413  |
| Cruz, N. C. da     | 13  | 4       |      | 372  | Davidovich, L.          | 13  | 4       |      | 415  |
| Cruz, N. C. da     | 11  | 1       | 6    | 396  | Davidovich, L.          | 13  | 4       |      | 419  |
| Cruz, N. C. da     | 11  | 4       |      | 400  | Davidovich, M. A.       | 12  | 3       | 9    | 252  |
| Cuevas, R. F.      | 11  | 4       |      | 280  | Degraffenreid, W.       | 11  | 3       | 4    | 61   |
| Cuevas, R. F.      | 11  | 4       |      | 186  | Degreve, L.             | 12  | 4       |      | 104  |
| Cuevas, R. F.      | 11  | 4       |      | 187  | Degreve, L.             | 12  | 4       |      | 105  |
| Cuffini, S. L.     | 12  | 1       | 1    | 246  | Degreve, L.             | 12  | 4       |      | 106  |
| Cuffini, S. L.     | 11  | 1       | 1    | 221  | Denardin, J. C.         | 13  | 1       | 2    | 140  |

| Autor               | Dia | Período | Sala | Pág. | Autor                  | Dia | Período | Sala | Pág. |
|---------------------|-----|---------|------|------|------------------------|-----|---------|------|------|
| Destro, M. G.       | 13  | 3       | 10   | 433  | Emmel, P. D.           | 12  | 4       |      | 259  |
| Dewel, G.           | 13  | 1       | 7    | 119  | Emmerich, F. G.        | 11  | 4       |      | 239  |
| Dhanabalan, A.      | 12  | 1       | 7    | 331  | Emmerich, F. G.        | 13  | 4       |      | 219  |
| Dhanabalan, A.      | 12  | 1       | 7    | 331  | Emmerich, F. G.        | 11  | 4       |      | 353  |
| Dhanabalan, A.      | 12  | 1       | 7    | 330  | Emura, M.              | 13  | 1       | 2    | 139  |
| Dhanabalan, A.      | 12  | 1       | 7    | 330  | Enderlein, R.          | 11  | 4       |      | 287  |
| Diagonel, E.        | 12  | 4       |      | 259  | Enderlein, R.          | 11  | 4       |      | 288  |
| Dias, H.            | 13  | 4       |      | 419  | Enderlein, R.          | 13  | 4       |      | 270  |
| Dias, I. F. L.      | 12  | 4       |      | 260  | Engelsberg, M.         | 11  | 4       |      | 237  |
| Dias, I. F. L.      | 13  | 4       |      | 271  | Engelsberg, M.         | 11  | 1       | 3    | 10   |
| Dias, I. F. L.      | 12  | 1       | 9    | 249  | Erichsen Junior, R.    | 12  | 3       | 7    | 99   |
| Dias, P. L.         | 13  | 4       |      | 218  | Escote, M. T.          | 11  | 4       |      | 183  |
| Diehl, A.           | 11  | 4       |      | 74   | Esquivel, D. M.        | 12  | 4       |      | 24   |
| Dietzsch, O.        | 13  | 4       |      | 210  | Evangelista, L. R.     | 13  | 4       |      | 93   |
| Dodonov, V.         | 13  | 4       |      | 414  | Evangelista, L. R.     | 12  | 4       |      | 325  |
| Dodonov, V.         | 13  | 4       |      | 415  | Evenson, K. M.         | 12  | 3       | 10   | 428  |
| Dodonov, V.         | 13  | 3       | 10   | 413  | Fabbri, M.             | 13  | 3       | 7    | 90   |
| Dodonov, V. V.      | 12  | 4       |      | 105  | Fabbri, M.             | 11  | 4       |      | 75   |
| Domiciano, S. M.    | 11  | 4       |      | 242  | Fabbri, M.             | 12  | 4       |      | 255  |
| Domingues, P. H.    | 12  | 4       |      | 160  | Fabbri, M.             | 12  | 4       |      | 100  |
| Domingues, P. H.    | 11  | 4       |      | 146  | Fabbri, M.             | 12  | 4       |      | 256  |
| Dominguez, D. R. C. | 12  | 3       | 7    | 99   | Fabbri, M.             | 11  | 4       |      | 75   |
| Donangelo, R. J.    | 11  | 1       | 4    | 38   | Fabiano, A.            | 11  | 4       |      | 294  |
| Donatti, D. A.      | 11  | 4       |      | 181  | Fabre, C.              | 11  | 1       | 10   | 410  |
| Donoso, J. P.       | 11  | 4       |      | 237  | Fancio, E.             | 13  | 4       |      | 211  |
| Donoso, J. P.       | 13  | 4       |      | 310  | Faria, C. C. de        | 12  | 4       |      | 367  |
| Donoso, J. P.       | 11  | 4       |      | 239  | Faria, N. V. de C.     | 12  | 4       |      | 46   |
| Donoso, J. P.       | 11  | 4       |      | 241  | Faria, N. V. de C.     | 11  | 1       | 4    | 38   |
| Donoso, J. P.       | 11  | 4       |      | 241  | Faria, N. V. de C.     | 11  | 1       | 4    | 38   |
| Donoso, J. P.       | 11  | 4       |      | 242  | Faria, N. V. de C.     | 11  | 1       | 4    | 37   |
| Doria, M. M.        | 12  | 1       | 5    | 362  | Faria, R. M.           | 11  | 3       | 7    | 339  |
| Doria, M. M.        | 12  | 1       | 5    | 362  | Faria, R. M.           | 13  | 4       |      | 310  |
| Doria, M. M.        | 12  | 1       | 5    | 361  | Faria, R. M.           | 12  | 4       |      | 343  |
| Doria, M. M.        | 12  | 1       | 5    | 362  | Faria, R. M.           | 12  | 1       | 7    | 325  |
| Doria, R.           | 13  | 4       |      | 36   | Faria, R. M.           | 13  | 1       | 7    | 336  |
| Doria, R.           | 12  | 4       |      | 344  | Faria, R. M.           | 13  | 3       | 9    | 292  |
| Doria, R.           | 12  | 4       |      | 408  | Faria, R. M.           | 12  | 4       |      | 343  |
| Drake, J.           | 11  | 3       | 9    | 275  | Faria, R. M.           | 13  | 3       | 7    | 307  |
| Duarte, J. L.       | 12  | 4       |      | 260  | Faria, R. M.           | 12  | 4       |      | 327  |
| Ducloy, M.          | 13  | 1       | 4    | 57   | Faria, R. M.           | 12  | 4       |      | 345  |
| Dumelow, T.         | 12  | 4       |      | 197  | Faria, R. M.           | 13  | 3       | 7    | 309  |
| Dumelow, T.         | 13  | 4       |      | 168  | Faria, R. M.           | 12  | 4       |      | 342  |
| Duque, C. A.        | 11  | 4       |      | 281  | Farias, G. A.          | 13  | 4       |      | 167  |
| Duque, J. G. dos S. | 13  | 4       |      | 213  | Farias, G. A.          | 13  | 4       |      | 266  |
| Duran, J. E. R.     | 12  | 4       |      | 15   | Farias, G. A.          | 11  | 4       |      | 281  |
| Dutra, S. M.        | 13  | 3       | 10   | 412  | Farias, G. A.          | 11  | 4       |      | 281  |
| Dutra, S. M.        | 13  | 4       |      | 416  | Farias, G. A.          | 11  | 3       | 2    | 166  |
| Dutta, S. K.        | 11  | 3       | 4    | 61   | Farias, G. de A.       | 11  | 3       | 9    | 274  |
| Edwards, K.         | 11  | 4       |      | 21   | Farias, G. de A.       | 11  | 1       | 9    | 279  |
| Eiras, J. A.        | 11  | 1       | 6    | 396  | Farias, G. de A.       | 13  | 1       | 9    | 291  |
| Eiras, J. A.        | 12  | 3       | 1    | 196  | Farias, P. C. M. de A. | 13  | 4       |      | 212  |
| Eiras, J. A.        | 12  | 4       |      | 203  | Farizon, B.            | 11  | 1       | 4    | 38   |
| Eiras, J. A.        | 12  | 4       |      | 203  | Farizon, B.            | 11  | 1       | 4    | 37   |
| Ejnisman, R.        | 12  | 4       |      | 49   | Farizon, M.            | 11  | 1       | 4    | 38   |
| Ellis, D.           | 13  | 4       |      | 169  | Farizon, M.            | 11  | 1       | 4    | 37   |
| Emmel, P. D.        | 11  | 4       |      | 282  | Fattore, M. de S. L.   | 12  | 4       |      | 116  |

| Autor                     | Dia | Período | Sala | Pág. | Autor                  | Dia | Período | Sala | Pág. |
|---------------------------|-----|---------|------|------|------------------------|-----|---------|------|------|
| Fazenda, A. L.            | 13  | 3       | 7    | 90   | Figueiredo Neto, A. M. | 12  | 1       | 7    | 323  |
| Fazzio, A.                | 12  | 4       |      | 256  | Figueiredo Neto, A. M. | 12  | 1       | 10   | 404  |
| Fazzio, A.                | 13  | 1       | 4    | 56   | Figueiredo Neto, A. M. | 11  | 4       |      | 295  |
| Fehsenfeld, K. M.         | 11  | 4       |      | 78   | Figueiredo Neto, A. M. | 12  | 3       | 7    | 320  |
| Feitosa, E.               | 11  | 4       |      | 21   | Figueiredo Neto, A. M. | 11  | 4       |      | 299  |
| Feitosa, E.               | 11  | 4       |      | 21   | Figueiredo Neto, A. M. | 11  | 4       |      | 302  |
| Felicio, J. R. D. de      | 13  | 4       |      | 94   | Figueiredo Neto, A. M. | 11  | 4       |      | 303  |
| Felicio, J. R. D. de      | 11  | 4       |      | 79   | Figueiredo Neto, A. M. | 11  | 4       |      | 303  |
| Felicio, J. R. D. de      | 12  | 1       | 7    | 86   | Figueiredo, M. T. de   | 12  | 4       |      | 343  |
| Ferire, V. N.             | 13  | 4       |      | 266  | Figueiredo, R. S. de   | 11  | 4       |      | 185  |
| Fermin, J. R.             | 11  | 3       | 2    | 165  | Figueiredo, R. S. de   | 12  | 4       |      | 229  |
| Fernandes-Baca, J. A.     | 12  | 1       | 2    | 171  | Figueiredo, W.         | 11  | 4       |      | 76   |
| Fernandes, A. A. R.       | 13  | 4       |      | 174  | Figueiredo, W.         | 11  | 4       |      | 77   |
| Fernandes, A. A. R.       | 13  | 4       |      | 174  | Figueiredo, W.         | 11  | 4       |      | 77   |
| Fernandes, J. C.          | 11  | 1       | 2    | 125  | Filho, J. M.           | 12  | 4       |      | 228  |
| Fernandes, J. C.          | 11  | 4       |      | 148  | Fink, R.               | 13  | 4       |      | 381  |
| Fernandes, J. dos P.      | 13  | 4       |      | 213  | Fireman, E. C.         | 11  | 4       |      | 147  |
| Fernandes, J. K. de O.    | 13  | 4       |      | 209  | Fischer, H.            | 12  | 1       | 1    | 244  |
| Fernandes, R. M.          | 13  | 4       |      | 176  | Fisk, Z.               | 11  | 4       |      | 126  |
| Fernandez, M. T.          | 11  | 1       | 1    | 221  | Fittipaldi, I. P.      | 11  | 4       |      | 82   |
| Ferrara, N. F.            | 12  | 4       |      | 387  | Fittipaldi, I. P.      | 11  | 4       |      | 86   |
| Ferrari, E. F.            | 13  | 4       |      | 173  | Flemming, J.           | 11  | 3       | 4    | 60   |
| Ferrari, E. F.            | 12  | 4       |      | 254  | Flerentino, A. O.      | 11  | 4       |      | 237  |
| Ferraz, A.                | 12  | 1       | 5    | 363  | Florencio, O.          | 13  | 4       |      | 218  |
| Ferreira Junior, S. da C. | 12  | 4       |      | 115  | Florentino, A. de O.   | 11  | 4       |      | 188  |
| Ferreira, A.              | 11  | 4       |      | 353  | Florentino, A. de O.   | 11  | 4       |      | 242  |
| Ferreira, A.              | 12  | 1       | 9    | 251  | Flores, L.             | 11  | 4       |      | 350  |
| Ferreira, A.              | 11  | 4       |      | 354  | Flores, M.             | 11  | 4       |      | 20   |
| Ferreira, C. A.           | 12  | 4       |      | 325  | Flores, M. A.          | 12  | 3       | 3    | 22   |
| Ferreira, C. A.           | 12  | 4       |      | 340  | Flores, W. H.          | 13  | 3       | 2    | 156  |
| Ferreira, C. L.           | 11  | 4       |      | 401  | Flores, W. H.          | 13  | 4       |      | 175  |
| Ferreira, E. S.           | 11  | 4       |      | 183  | Flores, W. H.          | 11  | 1       | 6    | 397  |
| Ferreira, E. S.           | 11  | 4       |      | 187  | Flores, W. H.          | 13  | 4       |      | 175  |
| Ferreira, G. F. L.        | 13  | 3       | 7    | 307  | Foct, J.               | 12  | 4       |      | 229  |
| Ferreira, G. F. L.        | 12  | 4       |      | 344  | Foerster, B.           | 13  | 1       | 3    | 30   |
| Ferreira, J. M.           | 12  | 4       |      | 369  | Foerster, B.           | 11  | 1       | 3    | 11   |
| Ferreira, J. M.           | 13  | 3       | 5    | 358  | Foerster, C. E.        | 13  | 4       |      | 215  |
| Ferreira, J. M.           | 13  | 1       | 5    | 355  | Foglio, M. E.          | 12  | 4       |      | 159  |
| Ferreira, J. M. C.        | 13  | 1       | 5    | 355  | Folly, W. S. D.        | 12  | 4       |      | 151  |
| Ferreira, J. V. B.        | 12  | 4       |      | 161  | Folly, W. S. D.        | 11  | 1       | 2    | 126  |
| Ferreira, L. G.           | 11  | 4       |      | 42   | Folly, W. S. D.        | 13  | 4       |      | 177  |
| Ferreira, L. G.           | 11  | 1       | 4    | 37   | Fonseca, A. L. de A.   | 12  | 1       | 4    | 53   |
| Ferreira, N. G.           | 12  | 3       | 6    | 384  | Fonseca, E. J. da S.   | 11  | 1       | 10   | 410  |
| Ferreira, N. G.           | 12  | 4       |      | 386  | Fonseca, L. R. C.      | 11  | 3       | 9    | 274  |
| Ferreira, S. O.           | 12  | 1       | 9    | 251  | Fontanini, S.          | 12  | 1       | 7    | 322  |
| Ferreira, S. O.           | 11  | 1       | 9    | 279  | Fontcuberta, J.        | 11  | 4       |      | 130  |
| Ferreira, Y. A.           | 13  | 4       |      | 416  | Fontes, M. B.          | 11  | 4       |      | 128  |
| Fichet, M.                | 13  | 1       | 4    | 57   | Fontes, M. B.          | 12  | 1       | 2    | 171  |
| Fiedler-Ferrara, N.       | 13  | 4       |      | 66   | Fontes, M. B.          | 11  | 4       |      | 131  |
| Figiel, H.                | 11  | 4       |      | 127  | Formigoni, C. E.       | 12  | 4       |      | 27   |
| Figueira, M. S.           | 12  | 4       |      | 158  | Formigoni, C. E.       | 12  | 4       |      | 28   |
| Figueira, M. S.           | 12  | 4       |      | 158  | Fornari Jr, C. C. M.   | 12  | 4       |      | 340  |
| Figueira, M. S.           | 12  | 4       |      | 159  | Fornari, C.            | 12  | 4       |      | 325  |
| Figueiredo Neto, A. M.    | 12  | 3       | 7    | 319  | Fornes, J. A.          | 13  | 4       |      | 8    |
| Figueiredo Neto, A. M.    | 12  | 1       | 7    | 322  | Fornes, J. A.          | 11  | 4       |      | 301  |
| Figueiredo Neto, A. M.    | 13  | 1       | 7    | 335  | Fraga, E. S.           | 13  | 4       |      | 265  |

| Autor                | Dia | Período | Sala | Pág. | Autor               | Dia | Período | Sala | Pág. |
|----------------------|-----|---------|------|------|---------------------|-----|---------|------|------|
| Fragnito, H. L.      | 13  | 1       | 10   | 426  | Gagnon, R.          | 13  | 1       | 5    | 357  |
| Fragnito, H. L.      | 11  | 3       | 10   | 422  | Gaillard, M. J.     | 11  | 1       | 4    | 38   |
| Franaa, M.           | 13  | 4       |      | 415  | Gaillard, M. J.     | 11  | 1       | 4    | 37   |
| Franca, A. S.        | 13  | 4       |      | 212  | Gallas, J. A. C.    | 11  | 3       | 7    | 63   |
| Franca, F.           | 13  | 4       |      | 177  | Gallas, J. A. C.    | 13  | 4       |      | 71   |
| Franca, F.           | 11  | 4       |      | 148  | Gallas, J. A. C.    | 13  | 4       |      | 71   |
| Francisco, C. A. de  | 11  | 4       |      | 44   | Gallego, L.         | 11  | 4       |      | 351  |
| Franco, B. J. O.     | 13  | 4       |      | 206  | Gallo Junior, L.    | 13  | 4       |      | 6    |
| Franco, M. K.        | 11  | 4       |      | 436  | Galmiche, F.        | 13  | 1       | 10   | 435  |
| Franco, M. K. K. D.  | 11  | 4       |      | 399  | Galvao, D. S.       | 12  | 4       |      | 332  |
| Franco, R. W. A.     | 11  | 4       |      | 188  | Galvao, D. S.       | 12  | 1       | 3    | 5    |
| Franco, R. W. de A.  | 11  | 4       |      | 241  | Galvao, D. S.       | 11  | 1       | 7    | 306  |
| Franco, R. W. de A.  | 11  | 4       |      | 242  | Galvao, D. S.       | 12  | 1       | 3    | 4    |
| Franzan, A. H.       | 12  | 4       |      | 255  | Galvao, D. S.       | 12  | 1       | 7    | 329  |
| Frare Junior, P. L.  | 11  | 4       |      | 241  | Galzerani, J. C.    | 11  | 1       | 9    | 277  |
| Frateschi, N. C.     | 12  | 1       | 9    | 249  | Gama, E. A. M. da   | 13  | 1       | 2    | 141  |
| Freire Jr, F. L.     | 11  | 1       | 6    | 395  | Gama, S.            | 11  | 4       |      | 127  |
| Freire Jr, F. L.     | 11  | 4       |      | 398  | Gama, S.            | 11  | 4       |      | 128  |
| Freire Jr, F. L.     | 12  | 4       |      | 384  | Gama, S.            | 12  | 4       |      | 153  |
| Freire Jr, F. L.     | 13  | 4       |      | 374  | Gama, S.            | 11  | 4       |      | 132  |
| Freire, C.           | 13  | 4       |      | 206  | Gama, S.            | 11  | 4       |      | 133  |
| Freire, C.           | 11  | 1       | 1    | 222  | Gama, S.            | 12  | 4       |      | 154  |
| Freire, J. A.        | 12  | 4       |      | 104  | Gama, S.            | 12  | 4       |      | 200  |
| Freire, J. A. K.     | 11  | 1       | 9    | 279  | Gama, S.            | 11  | 4       |      | 134  |
| Freire, P. de T. C.  | 11  | 1       | 1    | 223  | Gama, S.            | 11  | 4       |      | 189  |
| Freire, P. de T. C.  | 12  | 3       | 1    | 194  | Gama, S.            | 12  | 4       |      | 203  |
| Freire, P. de T. C.  | 11  | 1       | 1    | 223  | Gama, S.            | 12  | 3       | 10   | 428  |
| Freire, P. de T. C.  | 12  | 4       |      | 228  | Gandra, F.          | 11  | 4       |      | 128  |
| Freire, R. R.        | 13  | 4       |      | 93   | Gandra, F. G.       | 11  | 4       |      | 132  |
| Freire, S. L. S.     | 11  | 4       |      | 285  | Gandra, F. G.       | 11  | 4       |      | 133  |
| Freire, V. N.        | 11  | 4       |      | 281  | Garbin, J. R.       | 11  | 4       |      | 44   |
| Freire, V. N.        | 11  | 4       |      | 281  | Garcia, C. G.       | 13  | 4       |      | 213  |
| Freire, V. N.        | 11  | 3       | 9    | 274  | Garcia, F.          | 12  | 4       |      | 46   |
| Freire, V. N.        | 13  | 1       | 9    | 290  | Garcia, F.          | 11  | 4       |      | 129  |
| Freire, V. N.        | 12  | 3       | 1    | 195  | Garcia, F.          | 11  | 4       |      | 129  |
| Freire, V. N.        | 11  | 1       | 9    | 279  | Garcia, F. C.       | 11  | 3       | 10   | 421  |
| Freire, V. N.        | 13  | 1       | 9    | 291  | Garcia, F. C.       | 11  | 3       | 10   | 421  |
| Freitas, D. da S.    | 13  | 4       |      | 416  | Garcia, K. C.       | 11  | 4       |      | 19   |
| Freitas, J. C. C. de | 11  | 4       |      | 239  | Garcia, S.          | 12  | 4       |      | 366  |
| Freitas, J. E.       | 11  | 1       | 7    | 111  | Garcia, S.          | 11  | 4       |      | 350  |
| Freitas, J. E. de    | 11  | 3       | 7    | 338  | Garcia, S. G.       | 13  | 1       | 5    | 356  |
| Freitas, W. A. de    | 13  | 4       |      | 218  | Garcia, V. H.       | 13  | 4       |      | 217  |
| Frejlich, J.         | 13  | 1       | 1    | 234  | Garratt-Reed, A. J. | 11  | 4       |      | 351  |
| Frejlich, J.         | 12  | 4       |      | 408  | Garratt, R. C.      | 11  | 4       |      | 19   |
| Frere, A. F.         | 11  | 1       | 3    | 11   | Gastelois, P. L.    | 12  | 4       |      | 154  |
| Frizzarini, M.       | 12  | 4       |      | 260  | Gastelois, P. L.    | 12  | 1       | 6    | 390  |
| Frota-Pessoa, S.     | 13  | 4       |      | 178  | Geim, A.            | 13  | 4       |      | 268  |
| Frota-Pessoa, S.     | 12  | 3       | 2    | 138  | Gendry, M.          | 12  | 4       |      | 258  |
| Fukuoka, R. S.       | 11  | 4       |      | 352  | Genova, L. A.       | 13  | 4       |      | 211  |
| Furtado, C. A.       | 11  | 1       | 7    | 306  | Geraldo, A. B. C.   | 11  | 3       | 1    | 193  |
| Furtado, M. T.       | 12  | 4       |      | 260  | Germano, J. S. E.   | 11  | 1       | 4    | 39   |
| Furtado, S. R.       | 12  | 4       |      | 262  | Gerton, J.          | 12  | 3       | 4    | 54   |
| Furuya, K.           | 13  | 4       |      | 70   | Geshev, J. P.       | 11  | 1       | 6    | 397  |
| Furuya, K.           | 13  | 3       | 10   | 412  | Geshev, J. P.       | 13  | 4       |      | 175  |
| Furuzawa, S. K.      | 13  | 1       | 3    | 30   | Gesland, J.         | 12  | 4       |      | 230  |
| Gabriel, F.          | 13  | 1       | 7    | 119  | Gesland, J. Y.      | 12  | 3       | 1    | 196  |

| Autor                 | Dia | Período | Sala | Pág. | Autor                   | Dia | Período | Sala | Pág. |
|-----------------------|-----|---------|------|------|-------------------------|-----|---------|------|------|
| Gesualdi, A.          | 12  | 1       | 1    | 245  | Goncalves, S.           | 13  | 3       | 6    | 377  |
| Ghiner, A.            | 13  | 3       | 1    | 248  | Goncalves, W. M.        | 12  | 4       |      | 101  |
| Ghiner, A.            | 12  | 1       | 4    | 53   | Goncalves, W. M.        | 13  | 4       |      | 67   |
| Ghivelder, L.         | 11  | 4       |      | 144  | Gonzales, J. P. D.      | 11  | 4       |      | 188  |
| Ghivelder, L.         | 11  | 1       | 5    | 346  | Gonzales, P. G.         | 13  | 4       |      | 216  |
| Ghivelder, L.         | 11  | 4       |      | 352  | Gonzalez-Borrero, P. P. | 12  | 4       |      | 258  |
| Ghosh, A.             | 12  | 1       | 5    | 364  | Gonzalez-Hernandez, J.  | 11  | 4       |      | 182  |
| Ghosh, A. S.          | 11  | 4       |      | 40   | Gonzalez, C. E.         | 11  | 4       |      | 303  |
| Giacometti, J. A.     | 13  | 4       |      | 312  | Gonzalez, G.            | 11  | 4       |      | 239  |
| Giacometti, J. A.     | 13  | 4       |      | 313  | Gonzalez, J. L.         | 11  | 4       |      | 350  |
| Giacometti, J. A.     | 13  | 3       | 7    | 307  | Gonzalez, J. M.         | 13  | 1       | 2    | 139  |
| Giacometti, J. A.     | 13  | 4       |      | 314  | Gornsztejn, T.          | 11  | 4       |      | 425  |
| Giannella-Neto, A.    | 12  | 4       |      | 28   | Gouvea, D.              | 12  | 4       |      | 225  |
| Gibkes, J.            | 12  | 4       |      | 202  | Gouvea, M. E. de        | 12  | 1       | 2    | 136  |
| Giles, C.             | 11  | 4       |      | 436  | Gouveia Neto, A. da S.  | 11  | 4       |      | 425  |
| Giles, C.             | 12  | 4       |      | 151  | Gouveia, E. A.          | 11  | 4       |      | 425  |
| Giles, C.             | 12  | 4       |      | 393  | Goya, G. F.             | 13  | 1       | 2    | 141  |
| Giordanengo, B.       | 12  | 4       |      | 366  | Goya, G. F.             | 12  | 4       |      | 150  |
| Giordanengo, B.       | 11  | 4       |      | 350  | Graeff, C. F. O.        | 12  | 4       |      | 27   |
| Giordanengo, B.       | 12  | 1       | 2    | 171  | Graeff, C. F. de O.     | 12  | 4       |      | 254  |
| Giordanengo, B.       | 13  | 4       |      | 219  | Graeff, C. F. de O.     | 13  | 4       |      | 310  |
| Giordanengo, B. G. H. | 11  | 4       |      | 128  | Granado, E.             | 11  | 4       |      | 126  |
| Giordanengo, B. G. H. | 11  | 4       |      | 131  | Granato, E.             | 12  | 4       |      | 108  |
| Girao, J. H. S.       | 13  | 4       |      | 206  | Grande, P. L.           | 13  | 1       | 6    | 371  |
| Gobato, Y. G.         | 13  | 1       | 9    | 291  | Grandi, B. C. S.        | 11  | 4       |      | 77   |
| Gobbi, A. L.          | 11  | 4       |      | 437  | Grandini, C. R.         | 13  | 4       |      | 214  |
| Gobbi, A. L.          | 12  | 4       |      | 260  | Grandini, C. R.         | 13  | 4       |      | 218  |
| Gobbi, A. L.          | 12  | 4       |      | 264  | Grandi, T. A.           | 11  | 3       | 1    | 191  |
| Goldman, C.           | 13  | 3       | 3    | 32   | Grandi, T. A.           | 13  | 4       |      | 213  |
| Goldmann, A.          | 12  | 1       | 6    | 389  | Grandi, T. A.           | 13  | 4       |      | 215  |
| Gomes Junior, S. R.   | 12  | 4       |      | 117  | Gratz, E.               | 11  | 4       |      | 127  |
| Gomes, A. F.          | 13  | 4       |      | 417  | Grillon, M. P.          | 11  | 4       |      | 86   |
| Gomes, A. M. de S.    | 12  | 4       |      | 151  | Grinberg, F.            | 11  | 4       |      | 303  |
| Gomes, A. M. de S.    | 11  | 1       | 2    | 126  | Groenen, J.             | 12  | 4       |      | 258  |
| Gomes, A. M. de S.    | 13  | 4       |      | 177  | Groeneveld, K.          | 11  | 4       |      | 40   |
| Gomes, A. S. L.       | 12  | 1       | 10   | 403  | Grossinger, R.          | 11  | 4       |      | 127  |
| Gomes, A. S. L.       | 11  | 3       | 10   | 421  | Grosz, D. F.            | 13  | 1       | 10   | 426  |
| Gomes, A. S. L.       | 12  | 4       |      | 406  | Gruber, J.              | 13  | 4       |      | 311  |
| Gomes, A. S. L.       | 12  | 1       | 10   | 404  | Guedes, F. B.           | 11  | 4       |      | 239  |
| Gomes, I. C. S.       | 13  | 4       |      | 206  | Guedes, G. P.           | 11  | 1       | 3    | 12   |
| Gomes, L.             | 12  | 1       | 1    | 246  | Guedes, G. P.           | 12  | 4       |      | 16   |
| Gomes, L.             | 12  | 4       |      | 231  | Guedes, I.              | 12  | 3       | 1    | 194  |
| Gomes, M. A. B.       | 13  | 4       |      | 312  | Guedes, I.              | 11  | 1       | 1    | 222  |
| Gomes, M. A. de F.    | 11  | 4       |      | 78   | Guedes, I.              | 11  | 1       | 1    | 223  |
| Gomes, M. A. de F.    | 12  | 4       |      | 118  | Guedes, I.              | 12  | 4       |      | 228  |
| Gomes, U. U.          | 12  | 3       | 1    | 195  | Guedes, I.              | 11  | 1       | 1    | 223  |
| Gomez, N. R.          | 12  | 1       | 10   | 405  | Guenzburger, D.         | 12  | 4       |      | 163  |
| Gomez, S. L.          | 12  | 1       | 10   | 404  | Guerra, D. R.           | 13  | 4       |      | 206  |
| Gomez, S. L.          | 12  | 3       | 7    | 320  | Guerreiro, M. R.        | 11  | 3       | 1    | 192  |
| Goncalves Neto, L.    | 13  | 1       | 10   | 435  | Guevara, J. A.          | 11  | 1       | 1    | 221  |
| Goncalves, G. R. R.   | 11  | 4       |      | 294  | Guilherme, J.           | 13  | 4       |      | 209  |
| Goncalves, L. C. D.   | 13  | 4       |      | 269  | Guimaraes, A. P.        | 12  | 3       | 4    | 55   |
| Goncalves, L. L.      | 11  | 4       |      | 80   | Guimaraes, A. P.        | 12  | 4       |      | 149  |
| Goncalves, L. L.      | 12  | 4       |      | 107  | Guimaraes, A. P.        | 12  | 4       |      | 46   |
| Goncalves, P. S.      | 11  | 3       | 7    | 65   | Guimaraes, A. P.        | 11  | 4       |      | 41   |
| Goncalves, S.         | 12  | 3       | 7    | 319  | Guimaraes, A. P.        | 12  | 4       |      | 101  |

| Autor                  | Dia | Período | Sala  | Pág.      | Autor             | Dia | Período | Sala | Pág.      |
|------------------------|-----|---------|-------|-----------|-------------------|-----|---------|------|-----------|
| Guimaraes, A. P.       | 11  | 4       | ..... | 127       | Hernandes, A. C.  | 13  | 1       | 1    | ..... 234 |
| Guimaraes, A. P.       | 11  | 4       | ..... | 127       | Hernandes, A. C.  | 12  | 4       |      | ..... 200 |
| Guimaraes, A. P.       | 12  | 4       | ..... | 159       | Hernandes, A. C.  | 12  | 4       |      | ..... 231 |
| Guimaraes, F. E. G.    | 12  | 4       | ..... | 263       | Hernandes, A. C.  | 12  | 4       |      | ..... 263 |
| Guimaraes, H. X.       | 13  | 4       | ..... | 418       | Hernandez, A. C.  | 12  | 4       |      | ..... 228 |
| Guimaraes, L. G.       | 11  | 4       | ..... | 279       | Hernandez, A. C.  | 12  | 4       |      | ..... 232 |
| Guimaraes, L. G.       | 11  | 4       | ..... | 424       | Heussner, R. W.   | 11  | 1       | 5    | ..... 349 |
| Guimaraes, L. G.       | 11  | 4       | ..... | 424       | Hibler, I.        | 12  | 4       |      | ..... 325 |
| Guimaraes, P. S. S.    | 11  | 1       | 9     | ..... 277 | Hickmann, J. M.   | 13  | 3       | 10   | ..... 413 |
| Guimaraes, P. S. S.    | 13  | 4       |       | ..... 267 | Hickmann, J. M.   | 13  | 4       |      | ..... 417 |
| Guimaraes, R. B.       | 11  | 1       | 2     | ..... 125 | Hidalgo, A. A.    | 12  | 3       | 7    | ..... 320 |
| Guimaraes, R. B.       | 11  | 4       |       | ..... 148 | Hilberg, M.       | 12  | 1       | 2    | ..... 171 |
| Guisoni, N. C.         | 13  | 4       |       | ..... 96  | Hilhorst, H. J.   | 12  | 2       | A    | ..... 65  |
| Guisoni, N. C.         | 13  | 4       |       | ..... 96  | Hilhorst, H. J.   | 11  | 1       | 7    | ..... 111 |
| Gundel, A.             | 11  | 3       | 2     | ..... 165 | Hipolito, O.      | 13  | 4       |      | ..... 272 |
| Gundel, A.             | 11  | 4       |       | ..... 134 | Hirata, J. H.     | 13  | 4       |      | ..... 210 |
| Guntherodt, H.         | 11  | 4       |       | ..... 436 | Hirsch, T.        | 13  | 4       |      | ..... 374 |
| Gusev, G. M.           | 13  | 4       |       | ..... 269 | Hirsch, T.        | 13  | 4       |      | ..... 375 |
| Gusev, G. M.           | 13  | 4       |       | ..... 272 | Hoffmann, R.      | 13  | 4       |      | ..... 380 |
| Gusken, E.             | 13  | 4       |       | ..... 214 | Holauer, G.       | 12  | 1       | 5    | ..... 362 |
| Gusken, E.             | 13  | 4       |       | ..... 214 | Hollauer, G.      | 12  | 1       | 5    | ..... 362 |
| Gusmaao, M.            | 12  | 3       | 2     | ..... 138 | Hollauer, G.      | 12  | 1       | 5    | ..... 361 |
| Haar, E. T.            | 12  | 1       | 2     | ..... 172 | Hong, J. S.       | 13  | 1       | 5    | ..... 356 |
| Haar, E. T.            | 13  | 4       |       | ..... 170 | Hong, J. S.       | 13  | 1       | 5    | ..... 355 |
| Habesch, R.            | 11  | 4       |       | ..... 439 | Honorato, F. A.   | 13  | 4       |      | ..... 210 |
| Hackel, C.             | 12  | 4       |       | ..... 15  | Hornos, J. E. M.  | 12  | 4       |      | ..... 47  |
| Haddad, T. A. S.       | 12  | 1       | 7     | ..... 88  | Hornos, J. E. M.  | 12  | 4       |      | ..... 48  |
| Haetinger, C. M.       | 11  | 4       |       | ..... 144 | Hornos, J. E. M.  | 12  | 1       | 4    | ..... 54  |
| Haidner, H.            | 13  | 1       | 10    | ..... 440 | Horowicz, R. J.   | 12  | 1       | 10   | ..... 404 |
| Hai, G.                | 12  | 4       |       | ..... 100 | Horowicz, R. J.   | 12  | 1       | 10   | ..... 405 |
| Hai, G. Q.             | 11  | 4       |       | ..... 281 | Horowicz, R. J.   | 12  | 4       |      | ..... 407 |
| Hamburger, A. I.       | 13  | 4       |       | ..... 96  | Horowicz, R. J.   | 12  | 3       | 7    | ..... 320 |
| Hanamoto, L. K.        | 12  | 4       |       | ..... 227 | Horowitz, F.      | 11  | 3       | 10   | ..... 422 |
| Handa, Y. P.           | 13  | 3       | 7     | ..... 309 | Hsieh, K. C.      | 12  | 4       |      | ..... 263 |
| Hansmann, U. H.        | 12  | 1       | 7     | ..... 86  | Huet, F.          | 11  | 3       | 1    | ..... 193 |
| Harmand, J.            | 12  | 4       |       | ..... 260 | Hulet, R. G.      | 13  | 2       | A    | ..... 409 |
| Harmand, J.            | 12  | 1       | 9     | ..... 249 | Hulet, R. G.      | 12  | 3       | 4    | ..... 54  |
| Hasenack, C. M.        | 11  | 4       |       | ..... 398 | Hulmmegen, I. A.  | 12  | 4       |      | ..... 340 |
| Hasenack, C. M.        | 11  | 4       |       | ..... 398 | Hummelgen, I. A.  | 12  | 4       |      | ..... 254 |
| Hayashi, M. A.         | 13  | 1       | 6     | ..... 371 | Hummelgen, I. A.  | 13  | 4       |      | ..... 310 |
| Hayashi, M. A.         | 12  | 1       | 9     | ..... 250 | Hummelgen, I. A.  | 13  | 4       |      | ..... 311 |
| Haythornthwaite, C. R. | 11  | 4       |       | ..... 423 | Hummelgen, I. A.  | 13  | 4       |      | ..... 311 |
| Heer, W. A. de         | 12  | 4       |       | ..... 201 | Hummelgen, I. A.  | 12  | 4       |      | ..... 325 |
| Heiman, D.             | 11  | 4       |       | ..... 288 | Hummelgen, I. A.  | 13  | 4       |      | ..... 312 |
| Heinzelmann, H.        | 11  | 4       |       | ..... 436 | Hummelgen, I. A.  | 13  | 4       |      | ..... 312 |
| Helena, E. L. de S.    | 11  | 4       |       | ..... 122 | Huser, T.         | 11  | 4       |      | ..... 436 |
| Henriques, A. B.       | 13  | 4       |       | ..... 269 | Idiart, M. A.     | 11  | 4       |      | ..... 122 |
| Henriques, E. F.       | 12  | 4       |       | ..... 326 | Idiart, M. A. P.  | 12  | 3       | 7    | ..... 99  |
| Henriques, F. B.       | 13  | 4       |       | ..... 375 | Ierardi, M. C. F. | 13  | 3       | 7    | ..... 308 |
| Henriques, V. B.       | 12  | 4       |       | ..... 326 | Iglesias, J. R.   | 12  | 3       | 9    | ..... 252 |
| Henriques, V. B.       | 13  | 4       |       | ..... 7   | Iglesias, J. R.   | 12  | 3       | 7    | ..... 319 |
| Henriques, V. B.       | 13  | 4       |       | ..... 96  | Iglesias, J. R.   | 12  | 4       |      | ..... 163 |
| Hering, E. N.          | 11  | 3       | 10    | ..... 421 | Ikawa, F.         | 12  | 4       |      | ..... 260 |
| Hering, E. N.          | 11  | 3       | 10    | ..... 421 | Imaizumi, M.      | 13  | 4       |      | ..... 214 |
| Hernandes, A. C.       | 13  | 1       | 1     | ..... 233 | Imaizumi, M.      | 13  | 4       |      | ..... 214 |
| Hernandes, A. C.       | 11  | 4       |       | ..... 184 | Ioriatti, L.      | 13  | 1       | 9    | ..... 290 |

| Autor                | Dia | Período | Sala | Pág. | Autor               | Dia | Período | Sala | Pág. |
|----------------------|-----|---------|------|------|---------------------|-----|---------|------|------|
| Isaac, F.            | 13  | 1       | 3    | 29   | Kapusta, C.         | 11  | 4       |      | 127  |
| Isaac, F.            | 12  | 4       |      | 25   | Karavanskii, V. A.  | 11  | 4       |      | 287  |
| Isaac, F.            | 12  | 4       |      | 25   | Kashimoto, E. M.    | 13  | 4       |      | 208  |
| Isotani, S.          | 11  | 4       |      | 401  | Kashyap, R.         | 13  | 1       | 10   | 426  |
| Isotani, S.          | 11  | 4       |      | 438  | Kassab, L. R. P.    | 11  | 4       |      | 183  |
| Issmael Jr, A. K.    | 12  | 4       |      | 46   | Kassab, L. R. P.    | 11  | 4       |      | 187  |
| Itman Filho, A.      | 12  | 1       | 6    | 389  | Kawa, O.            | 12  | 4       |      | 198  |
| Ito, A. S.           | 11  | 3       | 3    | 1    | Kellerman, G.       | 13  | 3       | 7    | 309  |
| Ito, A. S.           | 11  | 4       |      | 18   | Kellerman, G.       | 12  | 1       | 1    | 244  |
| Ito, A. S.           | 11  | 3       | 3    | 1    | Keller, W.          | 12  | 4       |      | 199  |
| Itri, R.             | 12  | 3       | 3    | 22   | Keller, W.          | 13  | 3       | 1    | 248  |
| Itri, R.             | 13  | 1       | 7    | 336  | Keller, W.          | 12  | 4       |      | 199  |
| Iwamoto, H.          | 12  | 4       |      | 260  | Kiminami, C. S.     | 12  | 1       | 6    | 389  |
| Izzo, D.             | 12  | 3       | 7    | 98   | Kimmich, R.         | 11  | 4       |      | 302  |
| Jackson, R. A.       | 12  | 3       | 1    | 194  | Kimmich, R.         | 11  | 4       |      | 303  |
| Jacobsohn, L. G.     | 12  | 4       |      | 384  | Kimmich, R.         | 11  | 4       |      | 303  |
| Jacques, S. L.       | 13  | 1       | 3    | 30   | Kinast, E. J.       | 11  | 1       | 1    | 221  |
| Jaick, L. J. E. -    | 12  | 4       |      | 24   | King, D. A.         | 12  | 2       | 10   | 370  |
| Jalabert, R. A.      | 12  | 3       | 9    | 253  | Kist, T. B. L.      | 11  | 1       | 10   | 411  |
| Jalbert, G.          | 11  | 1       | 4    | 38   | Kiwi, M.            | 13  | 3       | 6    | 377  |
| Jalbert, G.          | 11  | 1       | 4    | 37   | Klauss, H. H.       | 12  | 1       | 2    | 171  |
| Jalbert, G.          | 11  | 4       |      | 44   | Klautau, A. B.      | 13  | 4       |      | 178  |
| Japiassu, G. M.      | 11  | 1       | 2    | 124  | Kleiman, G. G.      | 12  | 4       |      | 392  |
| Jardim, R. de F.     | 13  | 1       | 5    | 354  | Kleiman, G. G.      | 13  | 4       |      | 379  |
| Jardim, R. de F.     | 12  | 4       |      | 366  | Kleiman, G. G.      | 12  | 1       | 6    | 391  |
| Jardim, R. de F.     | 11  | 4       |      | 183  | Kleiman, G. G.      | 12  | 1       | 6    | 391  |
| Jardim, R. de F.     | 13  | 3       | 5    | 358  | Kleiman, G. G.      | 12  | 4       |      | 392  |
| Jardim, R. F.        | 11  | 4       |      | 183  | Klein, A. N.        | 11  | 4       |      | 398  |
| Jardim, R. F.        | 12  | 4       |      | 150  | Kleinke, M. U.      | 12  | 4       |      | 15   |
| Jauberteau, I.       | 12  | 3       | 6    | 384  | Kleinke, M. U.      | 12  | 4       |      | 116  |
| Javier, L. A. T.     | 12  | 4       |      | 162  | Knobel, M.          | 13  | 4       |      | 173  |
| Jesus, D. R. de      | 13  | 4       |      | 170  | Knobel, M.          | 13  | 3       | 2    | 157  |
| Jesus, V. L. B. de   | 12  | 4       |      | 46   | Knobel, M.          | 13  | 3       | 2    | 156  |
| Jiang, S.            | 11  | 3       | 2    | 165  | Knobel, M.          | 13  | 4       |      | 176  |
| Job, A. E.           | 13  | 4       |      | 315  | Knobel, M.          | 11  | 4       |      | 133  |
| Job, A. E.           | 13  | 4       |      | 315  | Koberle, R.         | 13  | 2       | 10   | 5    |
| Jonen, S.            | 11  | 4       |      | 145  | Koch, R.            | 12  | 1       | 3    | 3    |
| Joras, F. dos S.     | 11  | 4       |      | 40   | Koehler, M.         | 12  | 4       |      | 254  |
| Jorge, P. M. da C.   | 12  | 4       |      | 408  | Koehler, M.         | 13  | 4       |      | 312  |
| Jorio, A.            | 13  | 3       | 7    | 91   | Koenraad, P. M.     | 13  | 4       |      | 266  |
| Jorio, A.            | 11  | 1       | 1    | 223  | Kohl, A.            | 12  | 1       | 9    | 249  |
| Jornada, J. A. H. da | 11  | 1       | 1    | 222  | Koide, K.           | 13  | 4       |      | 210  |
| Judcal, G. O. N.     | 11  | 1       | 6    | 397  | Koiller, B.         | 11  | 4       |      | 286  |
| Juliano, L.          | 11  | 4       |      | 18   | Kokshenev, V. B.    | 12  | 4       |      | 160  |
| Juliao, J. F.        | 12  | 3       | 1    | 195  | Kokshenev, V. B.    | 12  | 4       |      | 229  |
| Junior, P. E. M. R.  | 13  | 1       | 3    | 29   | Kokshenev, V. B.    | 12  | 4       |      | 229  |
| Jurado, S. G.        | 12  | 4       |      | 368  | Kokshenev, V. B.    | 13  | 4       |      | 73   |
| Jurelo, A. R.        | 11  | 1       | 5    | 347  | Kokshenev, V. B.    | 13  | 4       |      | 73   |
| Kaga, H.             | 12  | 1       | 5    | 363  | Koning, M. de       | 12  | 1       | 3    | 3    |
| Kakuno, E. M.        | 11  | 4       |      | 399  | Konstantinov, P. P. | 13  | 1       | 5    | 355  |
| Kakuno, E. M.        | 11  | 1       | 6    | 395  | Kopelevich, Y.      | 11  | 1       | 5    | 348  |
| Kakuno, E. M.        | 11  | 4       |      | 400  | Kopmann, W.         | 12  | 1       | 2    | 171  |
| Kalbitzer, H. R.     | 11  | 4       |      | 19   | Kowata, E.          | 11  | 4       |      | 183  |
| Kanashiro, L. S.     | 12  | 4       |      | 227  | Kowata, E.          | 11  | 4       |      | 187  |
| Kanda, D. H. F.      | 13  | 4       |      | 316  | Krause, J. C.       | 12  | 4       |      | 160  |
| Kanda, D. H. F.      | 13  | 4       |      | 317  | Krause, J. C.       | 13  | 4       |      | 215  |

| Autor                 | Dia | Período | Sala  | Pág. | Autor                 | Dia | Período | Sala  | Pág. |
|-----------------------|-----|---------|-------|------|-----------------------|-----|---------|-------|------|
| Krause, J. C.         | 11  | 4       | ..... | 130  | Leite, J. R.          | 11  | 4       | ..... | 282  |
| Krebs, P. R.          | 11  | 4       | ..... | 122  | Leite, J. R.          | 12  | 4       | ..... | 258  |
| Kremer, G. M.         | 11  | 4       | ..... | 44   | Leite, J. R.          | 12  | 1       | 10    | 405  |
| Kretly, L. C.         | 13  | 4       | ..... | 372  | Leite, J. R.          | 11  | 4       | ..... | 286  |
| Kretly, L. C.         | 13  | 1       | 6     | 371  | Leite, J. R.          | 12  | 4       | ..... | 260  |
| Kuhner, G. S.         | 12  | 4       | ..... | 366  | Leite, J. R.          | 12  | 4       | ..... | 261  |
| Kuratani, N.          | 11  | 4       | ..... | 401  | Leite, J. R.          | 11  | 3       | 9     | 276  |
| Kuri, M. G. P.        | 12  | 1       | 6     | 389  | Leite, J. R.          | 11  | 4       | ..... | 287  |
| Kuzel, M.             | 11  | 4       | ..... | 40   | Leite, J. R.          | 11  | 4       | ..... | 288  |
| Lacerda, A. H.        | 11  | 4       | ..... | 183  | Leite, J. R.          | 13  | 4       | ..... | 270  |
| Lacerda, C. P.        | 13  | 4       | ..... | 267  | Leite, J. R.          | 13  | 4       | ..... | 272  |
| Lacerda, M. de M.     | 11  | 1       | 6     | 395  | Leite, N. F.          | 12  | 3       | 6     | 384  |
| Lacerda, M. de M.     | 11  | 4       | ..... | 398  | Leite, N. F.          | 12  | 4       | ..... | 386  |
| Lacerda, R. G.        | 12  | 3       | 6     | 383  | Leite, N. F.          | 12  | 4       | ..... | 386  |
| Lacoste, T.           | 11  | 4       | ..... | 436  | Leite, N. F.          | 12  | 4       | ..... | 387  |
| Ladeira, L. O.        | 11  | 4       | ..... | 132  | Leite, N. F.          | 12  | 3       | 6     | 383  |
| Ladeira, L. O.        | 12  | 1       | 6     | 390  | Leite, R. E. A. J. R. | 12  | 4       | ..... | 257  |
| Laks, B.              | 12  | 4       | ..... | 332  | Leite, V. B. P.       | 12  | 1       | 3     | 3    |
| Laks, B.              | 11  | 1       | 7     | 306  | Lelievre-Berna, E.    | 12  | 1       | 1     | 245  |
| Laks, B.              | 13  | 4       | ..... | 380  | Lemaire, T.           | 12  | 4       | ..... | 227  |
| Lamy-Freund, M. T.    | 12  | 3       | 3     | 23   | Lemes, M. R.          | 12  | 1       | 3     | 3    |
| Lamy-Freund, M. T.    | 11  | 4       | ..... | 18   | Lemes, M. R.          | 11  | 4       | ..... | 45   |
| Lancaster, M. J.      | 13  | 1       | 5     | 356  | Lente, M. H.          | 12  | 4       | ..... | 203  |
| Lancaster, M. J.      | 13  | 1       | 5     | 355  | Lenzi, E. K.          | 12  | 4       | ..... | 115  |
| Lanciotti Jr, F.      | 12  | 4       | ..... | 258  | Leonel, S. de A.      | 12  | 1       | 2     | 136  |
| Landa, G.             | 12  | 4       | ..... | 258  | Lepiensi, C. M.       | 13  | 4       | ..... | 215  |
| Landau, D. P.         | 12  | 1       | 2     | 135  | Lepiensi, C. M.       | 11  | 4       | ..... | 399  |
| Landers, R.           | 12  | 4       | ..... | 392  | Lepiensi, C. M.       | 13  | 1       | 6     | 372  |
| Landers, R.           | 12  | 1       | 6     | 391  | Lepiensi, C. M.       | 13  | 4       | ..... | 374  |
| Landers, R.           | 12  | 1       | 6     | 391  | Lequeux, N.           | 12  | 1       | 1     | 246  |
| Landers, R.           | 12  | 4       | ..... | 392  | Lesche, B.            | 11  | 3       | 10    | 421  |
| Landinez, D.          | 11  | 1       | 5     | 348  | Lesche, B.            | 11  | 3       | 10    | 421  |
| Lanfredi, A. J. de C. | 12  | 3       | 5     | 365  | Levine, A.            | 13  | 4       | ..... | 271  |
| Lang, C.              | 13  | 4       | ..... | 381  | Levine, H.            | 12  | 4       | ..... | 104  |
| Lara, D. P.           | 11  | 4       | ..... | 75   | Levin, Y.             | 13  | 3       | 7     | 90   |
| Lara, M. C. F. L.     | 11  | 4       | ..... | 295  | Levin, Y.             | 13  | 3       | 7     | 89   |
| Larbalestier, D. C.   | 11  | 1       | 5     | 349  | Levin, Y.             | 11  | 4       | ..... | 74   |
| Larica, C.            | 12  | 4       | ..... | 149  | Lewenkopf, C. H.      | 12  | 3       | 9     | 252  |
| Larica, C.            | 12  | 4       | ..... | 152  | Lewenkopf, C. H.      | 13  | 4       | ..... | 70   |
| Larica, C.            | 13  | 4       | ..... | 219  | Lewenkopf, C. H.      | 12  | 3       | 9     | 253  |
| Larica, C.            | 11  | 4       | ..... | 353  | Li, B.                | 11  | 3       | 2     | 165  |
| Las, W. C.            | 12  | 4       | ..... | 225  | Libero, V. L.         | 12  | 3       | 2     | 138  |
| Laurell, F.           | 11  | 3       | 10    | 421  | Libero, V. L.         | 12  | 4       | ..... | 103  |
| Laurell, F.           | 11  | 3       | 10    | 421  | Libero, V. L.         | 12  | 4       | ..... | 161  |
| Laureto, E.           | 12  | 4       | ..... | 260  | Libero, V. L.         | 12  | 4       | ..... | 108  |
| Lauretto, E.          | 13  | 4       | ..... | 271  | Licinio, P.           | 13  | 1       | 7     | 120  |
| Leburton, J.          | 11  | 3       | 9     | 274  | Licinio, P.           | 12  | 4       | ..... | 342  |
| Lederer, P.           | 11  | 3       | 5     | 360  | Li, M. S.             | 12  | 4       | ..... | 228  |
| Legoas, S.            | 13  | 4       | ..... | 178  | Li, M. S.             | 12  | 4       | ..... | 231  |
| Leising, G.           | 13  | 4       | ..... | 310  | Li, M. S.             | 12  | 4       | ..... | 232  |
| Leitao, U. A.         | 11  | 1       | 2     | 125  | Lima Jr, M. M. de     | 11  | 4       | ..... | 186  |
| Leite, C. V. B.       | 13  | 3       | 6     | 378  | Lima, A. L. de        | 11  | 4       | ..... | 86   |
| Leite, C. V. de B.    | 13  | 3       | 6     | 378  | Lima, A. R. de        | 12  | 4       | ..... | 101  |
| Leite, E. R.          | 12  | 3       | 5     | 365  | Lima, A. R. de        | 12  | 4       | ..... | 102  |
| Leite, E. R.          | 11  | 1       | 5     | 346  | Lima, B. H. B.        | 12  | 4       | ..... | 327  |
| Leite, J. R.          | 13  | 4       | ..... | 265  | Lima, C. R. A.        | 11  | 4       | ..... | 437  |

| Autor                | Dia | Período | Sala | Pág. | Autor                  | Dia | Período | Sala | Pág. |
|----------------------|-----|---------|------|------|------------------------|-----|---------|------|------|
| Lima, C. R. A.       | 13  | 1       | 10   | 440  | Lucena, M. A.          | 11  | 3       | 2    | 164  |
| Lima, C. R. A.       | 13  | 1       | 10   | 439  | Luk'Yanchuk, I.        | 13  | 3       | 7    | 91   |
| Lima, D.             | 13  | 1       | 7    | 119  | Luna, H.               | 11  | 1       | 4    | 38   |
| Lima, E. A.          | 12  | 4       |      | 367  | Luna, H.               | 11  | 1       | 4    | 37   |
| Lima, E. R.          | 13  | 4       |      | 210  | Lutterbach, L. G.      | 13  | 3       | 10   | 413  |
| Lima, I.             | 12  | 4       |      | 103  | Lutterbach, L. G.      | 13  | 4       |      | 415  |
| Lima, I. C. da C.    | 11  | 1       | 9    | 278  | Luz, D. M.             | 12  | 4       |      | 103  |
| Lima, J. C. de       | 11  | 3       | 1    | 191  | M. Junior, A. V.       | 12  | 4       |      | 27   |
| Lima, J. C. de       | 13  | 4       |      | 213  | M. Junior, A. V.       | 12  | 4       |      | 28   |
| Lima, J. F. de       | 12  | 3       | 1    | 194  | M. Neto, J.            | 12  | 4       |      | 160  |
| Lima, J. F. de       | 12  | 4       |      | 230  | Macchione, E. L. A.    | 13  | 4       |      | 210  |
| Lima, J. F. de       | 13  | 4       |      | 209  | Macedo, A. M. S.       | 11  | 3       | 7    | 63   |
| Lima, J. F. de       | 12  | 4       |      | 230  | Macedo, M. A.          | 13  | 4       |      | 213  |
| Lima, J. F. de       | 12  | 4       |      | 231  | Macedo, M. A.          | 11  | 3       | 1    | 191  |
| Lima, J. R. de       | 12  | 4       |      | 340  | Macedo, W. A. A.       | 12  | 4       |      | 154  |
| Lima, M. A. P.       | 11  | 4       |      | 41   | Macedo, W. A. A.       | 11  | 4       |      | 133  |
| Lima, M. A. P.       | 11  | 1       | 4    | 37   | Macedo, W. A. A.       | 12  | 1       | 6    | 390  |
| Lima, M. A. P.       | 11  | 1       | 4    | 38   | Macedo, W. A. de A.    | 12  | 4       |      | 154  |
| Lima, M. A. P.       | 11  | 4       |      | 42   | Macedo, Z. S.          | 12  | 4       |      | 230  |
| Lima, M. A. P.       | 11  | 1       | 4    | 37   | Machado, F. L. de A.   | 13  | 4       |      | 209  |
| Lima, M. A. P.       | 11  | 1       | 4    | 39   | Machado, F. L. de A.   | 13  | 3       | 2    | 156  |
| Lima, M. C. A.       | 13  | 1       | 9    | 291  | Machado, J. C.         | 11  | 1       | 7    | 306  |
| Lima, N. A. de       | 12  | 3       | 2    | 138  | Machado, K. D.         | 13  | 4       |      | 92   |
| Lima, N. B.          | 13  | 4       |      | 211  | Machado, P. C. M.      | 11  | 4       |      | 286  |
| Lima, O. F. de       | 11  | 4       |      | 349  | Machado, R. F.         | 12  | 4       |      | 117  |
| Lima, O. F. de       | 11  | 1       | 5    | 346  | Maciel, G. S.          | 12  | 1       | 10   | 403  |
| Lima, O. F. de       | 11  | 1       | 5    | 348  | Magalhaes, A. C. N. de | 11  | 4       |      | 76   |
| Lima, W. L. C.       | 12  | 3       | 2    | 137  | Magalhaes, D. V. de    | 12  | 4       |      | 198  |
| Linhares, M. P.      | 12  | 4       |      | 24   | Magalhaes, D. V.       | 12  | 4       |      | 407  |
| Lino, A. T.          | 13  | 4       |      | 265  | Magalhaes, D. V.       | 12  | 4       |      | 200  |
| Lino, A. T.          | 13  | 4       |      | 272  | Magalhaes, S. G.       | 11  | 4       |      | 82   |
| Lino, J. L. da S.    | 11  | 4       |      | 41   | Magalhes, W. F. D.     | 13  | 4       |      | 314  |
| Li, R. W. C.         | 13  | 4       |      | 311  | Magon, C. J.           | 11  | 4       |      | 237  |
| Lisboa Filho, P. N.  | 11  | 1       | 5    | 346  | Magon, C. J.           | 13  | 4       |      | 310  |
| Litterst, F. J.      | 12  | 1       | 2    | 171  | Magon, C. J.           | 11  | 4       |      | 241  |
| Lobo, P. D. de C.    | 12  | 1       | 3    | 2    | Magon, C. J.           | 11  | 4       |      | 241  |
| Longo, E.            | 11  | 1       | 5    | 346  | Magon, C. J.           | 11  | 4       |      | 188  |
| Loos, M.             | 11  | 3       | 3    | 1    | Magon, C. J.           | 11  | 4       |      | 242  |
| Lopes, F. J. P.      | 13  | 4       |      | 35   | Mahan, G. D.           | 11  | 4       |      | 147  |
| Lopes, I. P. B.      | 11  | 4       |      | 17   | Main, P.               | 13  | 4       |      | 268  |
| Lopes, M. C. A.      | 11  | 4       |      | 43   | Maitre, A.             | 11  | 1       | 10   | 410  |
| Lopes, M. Q.         | 13  | 4       |      | 71   | Maki, J. N.            | 11  | 4       |      | 299  |
| Lopez, A. P.         | 13  | 1       | 5    | 356  | Makler, S. S.          | 13  | 4       |      | 265  |
| Lourenco, S. A.      | 12  | 4       |      | 260  | Malacarne, L. C.       | 12  | 4       |      | 115  |
| Louro, S. R. W.      | 11  | 4       |      | 19   | Malarenko Jr, H.       | 12  | 1       | 2    | 172  |
| Lubyshev, D. I.      | 13  | 4       |      | 269  | Malarenko Jr, H.       | 13  | 4       |      | 170  |
| Lubyshev, D. I.      | 12  | 4       |      | 262  | Maldonado, E. P.       | 12  | 3       | 10   | 429  |
| Luca Filho, J. V. de | 11  | 3       | 4    | 61   | Malmonge, J. A.        | 13  | 4       |      | 317  |
| Luca, J. de          | 12  | 4       |      | 342  | Malmonge, J. A.        | 13  | 4       |      | 317  |
| Lucas, C. A.         | 11  | 4       |      | 43   | Malmonge, J. A.        | 13  | 4       |      | 317  |
| Lucena, L. dos S.    | 12  | 1       | 7    | 89   | Malmonge, L. F.        | 13  | 4       |      | 316  |
| Lucena, L. dos S.    | 12  | 4       |      | 117  | Mammana, V. P.         | 12  | 4       |      | 385  |
| Lucena, L. dos S.    | 12  | 4       |      | 344  | Mammana, V. P.         | 12  | 4       |      | 386  |
| Lucena, L. dos S.    | 11  | 3       | 7    | 338  | Manffra, E. F.         | 13  | 4       |      | 67   |
| Lucena, L. S.        | 11  | 1       | 7    | 111  | Mangueira, A. G. S.    | 12  | 4       |      | 230  |
| Lucena, M. A.        | 13  | 4       |      | 178  | Manoel, E. R.          | 12  | 4       |      | 263  |

| Autor                | Dia | Período | Sala  | Pág.      | Autor                 | Dia | Período | Sala  | Pág.      |
|----------------------|-----|---------|-------|-----------|-----------------------|-----|---------|-------|-----------|
| Mansanares, A. M.    | 11  | 4       | ..... | 17        | Martins, J. S. de S.  | 13  | 1       | 7     | ..... 119 |
| Mansanares, A. M.    | 12  | 4       | ..... | 226       | Martins, L. F. de O.  | 11  | 4       | ..... | 398       |
| Mansanares, A. M.    | 12  | 4       | ..... | 326       | Martins, L. F. de O.  | 11  | 4       | ..... | 398       |
| Mansanares, A. M.    | 13  | 3       | 9     | ..... 292 | Martins, M. D.        | 12  | 4       | ..... | 154       |
| Manzoli, J. E.       | 13  | 4       | ..... | 272       | Martins, M. D.        | 12  | 1       | 6     | ..... 390 |
| Marcassa, L. G.      | 11  | 3       | 4     | ..... 60  | Martins, M. L.        | 12  | 4       | ..... | 115       |
| Marcassa, L. G.      | 11  | 3       | 4     | ..... 61  | Martins, M. L.        | 12  | 4       | ..... | 116       |
| Marcassa, L. G.      | 11  | 3       | 4     | ..... 61  | Martins, R. B.        | 13  | 3       | 9     | ..... 292 |
| Marcassa, L. G.      | 12  | 4       | ..... | 47        | Martins, S. G. F.     | 13  | 4       | ..... | 35        |
| Marcassa, L. G.      | 12  | 4       | ..... | 48        | Mascarenhas, E.       | 12  | 1       | 9     | ..... 251 |
| Marchioli, M. A.     | 12  | 4       | ..... | 105       | Mascarenhas, Y. P.    | 12  | 1       | 1     | ..... 246 |
| Marchioli, M. A.     | 12  | 4       | ..... | 50        | Mascarenhas, Y. P.    | 11  | 1       | 1     | ..... 221 |
| Marcos, P. J. B.     | 11  | 4       | ..... | 183       | Mashovets, D. V.      | 13  | 1       | 5     | ..... 355 |
| Marcos, P. J. B.     | 11  | 4       | ..... | 187       | Massad, E.            | 13  | 4       | ..... | 34        |
| Marega Jr, E.        | 12  | 4       | ..... | 258       | Mastelaro, V. R.      | 12  | 1       | 1     | ..... 246 |
| Marega Jr, E.        | 13  | 4       | ..... | 266       | Matinaga, F. M.       | 11  | 4       | ..... | 285       |
| Marega Jr, E.        | 13  | 4       | ..... | 266       | Matos, C. J. S.       | 13  | 1       | 10    | ..... 426 |
| Marega Jr, E.        | 11  | 4       | ..... | 284       | Matos, J. do R.       | 12  | 4       | ..... | 150       |
| Marega Jr, E.        | 11  | 4       | ..... | 285       | Matos, M.             | 13  | 4       | ..... | 380       |
| Marega Jr, E.        | 12  | 4       | ..... | 262       | Matos, M. A.          | 11  | 1       | 3     | ..... 10  |
| Margulis, W.         | 11  | 3       | 10    | ..... 421 | Matoso, L. H. C.      | 13  | 4       | ..... | 317       |
| Margulis, W.         | 13  | 1       | 10    | ..... 426 | Matsuoka, M.          | 11  | 4       | ..... | 184       |
| Margulis, W.         | 11  | 3       | 10    | ..... 421 | Matsuoka, M.          | 11  | 4       | ..... | 401       |
| Maria Neto, J.       | 11  | 4       | ..... | 146       | Matthai, C.           | 12  | 4       | ..... | 254       |
| Mariotto, G.         | 12  | 4       | ..... | 384       | Mattos, C. R. de      | 11  | 4       | ..... | 122       |
| Mariz, A. M.         | 11  | 4       | ..... | 282       | Mattos, O. R.         | 11  | 3       | 1     | ..... 193 |
| Mariz, A. M.         | 11  | 4       | ..... | 81        | Mattoso, L. H. C.     | 12  | 1       | 7     | ..... 331 |
| Marmolejo, E. M.     | 12  | 4       | ..... | 201       | Mattoso, L. H. C.     | 12  | 4       | ..... | 333       |
| Marques, A. L. F.    | 13  | 4       | ..... | 207       | Mattoso, L. H. C.     | 12  | 4       | ..... | 333       |
| Marques, F. das C.   | 12  | 3       | 6     | ..... 383 | Mattoso, L. H. C.     | 13  | 1       | 7     | ..... 336 |
| Marques, F. das C.   | 11  | 3       | 1     | ..... 191 | Mattoso, L. H. C.     | 13  | 3       | 9     | ..... 292 |
| Marques, F. das C.   | 11  | 4       | ..... | 186       | Mattoso, L. H. C.     | 13  | 4       | ..... | 315       |
| Marques, F. das C.   | 11  | 4       | ..... | 401       | Mattoso, L. H. C.     | 13  | 4       | ..... | 315       |
| Marques, G. A.       | 13  | 4       | ..... | 419       | Mattoso, L. H. C.     | 13  | 4       | ..... | 316       |
| Marques, G. A.       | 13  | 4       | ..... | 419       | Mattoso, L. H. C.     | 13  | 4       | ..... | 317       |
| Marques, G. E.       | 11  | 3       | 9     | ..... 275 | Mattoso, N.           | 11  | 4       | ..... | 399       |
| Marques, P. M. A.    | 11  | 1       | 3     | ..... 11  | Mattoso, N.           | 11  | 1       | 6     | ..... 395 |
| Marques, P. V. S.    | 11  | 3       | 10    | ..... 421 | Mattoso, N.           | 11  | 4       | ..... | 400       |
| Martinelli, M.       | 12  | 1       | 10    | ..... 405 | Mattoso, N.           | 12  | 1       | 6     | ..... 390 |
| Martinelli, M.       | 12  | 4       | ..... | 407       | Mattoso, N.           | 13  | 4       | ..... | 180       |
| Martinez, G.         | 12  | 3       | 7     | ..... 319 | Mattoso, N. P.        | 13  | 1       | 6     | ..... 372 |
| Martinez, G.         | 11  | 4       | ..... | 147       | Matuo, C. Y.          | 13  | 1       | 7     | ..... 335 |
| Martinez, L. G.      | 13  | 4       | ..... | 219       | Matzdorf, R.          | 12  | 1       | 6     | ..... 389 |
| Martinez, L. G.      | 11  | 4       | ..... | 353       | Maude, D. K.          | 13  | 4       | ..... | 269       |
| Martinez, L. G.      | 13  | 4       | ..... | 211       | Mauricio, M. H. de P. | 13  | 4       | ..... | 217       |
| Martinez, L. G.      | 11  | 4       | ..... | 354       | Mauro, E.             | 11  | 4       | ..... | 242       |
| Martini, J. C.       | 13  | 1       | 6     | ..... 371 | Mazzali, C.           | 11  | 3       | 10    | ..... 422 |
| Martin, R. M.        | 11  | 3       | 9     | ..... 274 | Mazzaro, I.           | 11  | 4       | ..... | 399       |
| Martins-Filho, J. F. | 11  | 3       | 10    | ..... 421 | Mazzaro, I.           | 13  | 1       | 6     | ..... 372 |
| Martins-Filho, J. F. | 12  | 4       | ..... | 406       | Mazzaro, I.           | 12  | 1       | 6     | ..... 390 |
| Martins, A. de M.    | 12  | 4       | ..... | 117       | Mazzoni, M. S. C.     | 13  | 1       | 4     | ..... 57  |
| Martins, C. S.       | 13  | 4       | ..... | 179       | Mazzoni, M. S. C.     | 13  | 1       | 9     | ..... 289 |
| Martins, E.          | 11  | 4       | ..... | 423       | Mcalexander, W. I.    | 12  | 3       | 4     | ..... 54  |
| Martins, G. R.       | 13  | 4       | ..... | 208       | McLaughlin, A. J.     | 11  | 3       | 10    | ..... 421 |
| Martins, J. A.       | 13  | 4       | ..... | 33        | Medeiros Neto, J. A.  | 12  | 1       | 1     | ..... 246 |
| Martins, J. A.       | 13  | 4       | ..... | 34        | Medeiros Neto, J. A.  | 11  | 4       | ..... | 184       |

| Autor              | Dia | Período | Sala  | Pág.  | Autor                    | Dia                  | Período | Sala  | Pág.  |       |     |
|--------------------|-----|---------|-------|-------|--------------------------|----------------------|---------|-------|-------|-------|-----|
| Medeiros, D.       | 12  | 4       | ..... | 255   | Mendes, K. C.            | 13                   | 4       | ..... | 209   |       |     |
| Medeiros, G. A. de | 11  | 1       | 7     | ..... | 110                      | Mendes, K. C.        | 13      | 3     | 2     | ..... | 156 |
| Medeiros, J. A.    | 12  | 4       | ..... | 430   | Mendes, L. G.            | 11                   | 4       | ..... | 237   |       |     |
| Medeiros, J. P. de | 12  | 4       | ..... | 203   | Mendes, R. dos S.        | 12                   | 4       | ..... | 114   |       |     |
| Medeiros, R.       | 11  | 4       | ..... | 42    | Mendes, R. dos S.        | 12                   | 4       | ..... | 115   |       |     |
| Medeiros, S. M. de | 13  | 4       | ..... | 267   | Mendez, C.               | 13                   | 4       | ..... | 271   |       |     |
| Medina, A.         | 11  | 4       | ..... | 128   | Mendonca, C. R.          | 12                   | 1       | 10    | ..... | 403   |     |
| Medina, A. N.      | 11  | 4       | ..... | 132   | Mendonca, C. R.          | 12                   | 4       | ..... | 407   |       |     |
| Medina, A. N.      | 11  | 4       | ..... | 133   | Mendonca, J. P. R. F. de | 11                   | 4       | ..... | 424   |       |     |
| Megulhao, S.       | 12  | 4       | ..... | 257   | Mendonca, J. P. R. F. de | 11                   | 4       | ..... | 424   |       |     |
| Megulhao, S.       | 12  | 4       | ..... | 259   | Mendonca, W. C.          | 11                   | 4       | ..... | 294   |       |     |
| Mei, P. R.         | 13  | 1       | 1     | ..... | 234                      | Meneses-Pacheco, E.  | 12      | 1     | 10    | ..... | 405 |
| Mello Junior, V.   | 12  | 1       | 1     | ..... | 244                      | Meneses, E. A.       | 13      | 4     | ..... | 271   |     |
| Mello, D. F. de    | 12  | 4       | ..... | 108   | Menezes, F. S. de        | 11                   | 1       | 7     | ..... | 112   |     |
| Mello, F.          | 13  | 4       | ..... | 169   | Menezes, M. A. de        | 12                   | 4       | ..... | 158   |       |     |
| Mello, F. L. de    | 12  | 4       | ..... | 152   | Menezes, M. A. F. de     | 12                   | 4       | ..... | 118   |       |     |
| Mello, N. C.       | 11  | 4       | ..... | 239   | Menezes, R. P.           | 11                   | 4       | ..... | 436   |       |     |
| Mello, S. V.       | 12  | 1       | 7     | ..... | 330                      | Menezes, R. P.       | 13      | 4     | ..... | 373   |     |
| Mello, V. D. de    | 13  | 4       | ..... | 174   | Mensio, O.               | 12                   | 4       | ..... | 328   |       |     |
| Melo, C. P. de     | 12  | 1       | 7     | ..... | 322                      | Mergulhao Junior, C. | 11      | 4     | ..... | 79    |     |
| Melo, C. P. de     | 11  | 1       | 7     | ..... | 306                      | Mergulhao, S.        | 11      | 1     | 9     | ..... | 277 |
| Melo, C. P. de     | 12  | 1       | 10    | ..... | 403                      | Mergulhao, S.        | 13      | 3     | 7     | ..... | 307 |
| Melo, C. P. de     | 12  | 4       | ..... | 331   | Merschmann, L. H. C.     | 12                   | 4       | ..... | 342   |       |     |
| Melo, C. P. de     | 12  | 4       | ..... | 332   | Messaddeq, Y.            | 12                   | 1       | 10    | ..... | 405   |     |
| Melo, C. P. de     | 13  | 3       | 7     | ..... | 308                      | Messaddeq, Y.        | 12      | 4     | ..... | 406   |     |
| Melo, C. P. de     | 13  | 4       | ..... | 314   | Messaddeq, Y.            | 12                   | 1       | 10    | ..... | 405   |     |
| Melo, C. P. de     | 13  | 4       | ..... | 316   | Messaddeq, Y.            | 12                   | 4       | ..... | 406   |       |     |
| Melo, F. E. de A.  | 12  | 3       | 1     | ..... | 194                      | Messaddeq, Y.        | 12      | 1     | 10    | ..... | 403 |
| Melo, F. E. de A.  | 11  | 1       | 1     | ..... | 222                      | Messaddeq, Y.        | 12      | 4     | ..... | 231   |     |
| Melo, F. E. de A.  | 11  | 1       | 1     | ..... | 223                      | Messaddeq, Y.        | 11      | 4     | ..... | 188   |     |
| Melo, F. E. de A.  | 12  | 4       | ..... | 228   | Messaddeq, Y.            | 12                   | 4       | ..... | 202   |       |     |
| Melo, F. E. de A.  | 11  | 1       | 1     | ..... | 223                      | Messaddeq, Y.        | 11      | 4     | ..... | 241   |     |
| Melo, F. E. de A.  | 13  | 4       | ..... | 206   | Messaddeq, Y.            | 11                   | 4       | ..... | 241   |       |     |
| Melo, L. G.        | 11  | 4       | ..... | 147   | Messias, L. G. de O.     | 13                   | 4       | ..... | 266   |       |     |
| Melo, M. A. C. de  | 12  | 1       | 2     | ..... | 171                      | Messias, L. G. de O. | 13      | 4     | ..... | 266   |     |
| Melo, M. A. C. de  | 13  | 1       | 5     | ..... | 356                      | Meyer, E.            | 11      | 4     | ..... | 181   |     |
| Melo, M. A. C. de  | 11  | 4       | ..... | 130   | Meyerhof, W.             | 13                   | 1       | 4     | ..... | 58    |     |
| Melo, M. T. de     | 13  | 1       | 5     | ..... | 355                      | Meyerhof, W.         | 13      | 1     | 4     | ..... | 58  |
| Melo, M. T. de     | 13  | 1       | 5     | ..... | 356                      | Meyerhof, W.         | 13      | 1     | 4     | ..... | 57  |
| Melo, M. T. de     | 13  | 1       | 5     | ..... | 355                      | Meyering, W. I.      | 12      | 4     | ..... | 13    |     |
| Melo, M. T. de     | 13  | 3       | 5     | ..... | 358                      | Meyering, W. I.      | 12      | 4     | ..... | 14    |     |
| Melo, P. L. de     | 12  | 4       | ..... | 28    | Micklitz, H.             | 11                   | 4       | ..... | 131   |       |     |
| Melo, W. de S.     | 11  | 4       | ..... | 40    | Milman, P.               | 13                   | 4       | ..... | 419   |       |     |
| Melo, W. de S.     | 13  | 1       | 4     | ..... | 58                       | Milori, D. M. B. P.  | 11      | 4     | ..... | 44    |     |
| Melo, W. de S.     | 13  | 1       | 4     | ..... | 57                       | Milori, D. M. B. P.  | 12      | 4     | ..... | 49    |     |
| Melo, W. L. de B.  | 13  | 3       | 7     | ..... | 309                      | Miola, E. J.         | 13      | 4     | ..... | 374   |     |
| Melo, W. L. de B.  | 13  | 4       | ..... | 317   | Miranda, A. D.           | 13                   | 4       | ..... | 215   |       |     |
| Melo, W. S.        | 13  | 1       | 4     | ..... | 58                       | Miranda, J. R. de A. | 12      | 4     | ..... | 26    |     |
| Mendes Filho, J.   | 11  | 3       | 7     | ..... | 339                      | Miranda, J. R. de A. | 12      | 4     | ..... | 26    |     |
| Mendes Filho, J.   | 12  | 3       | 1     | ..... | 194                      | Miranda, J. R. de A. | 12      | 4     | ..... | 27    |     |
| Mendes Filho, J.   | 11  | 1       | 1     | ..... | 222                      | Miranda, L. C.       | 13      | 1     | 3     | ..... | 30  |
| Mendes Filho, J.   | 11  | 1       | 1     | ..... | 223                      | Miranda, L. C.       | 13      | 1     | 3     | ..... | 31  |
| Mendes Filho, J.   | 11  | 4       | ..... | 299   | Miranda, L. C.           | 13                   | 1       | 3     | ..... | 31    |     |
| Mendes Filho, J.   | 11  | 1       | 1     | ..... | 223                      | Miranda, M. G. M.    | 11      | 3     | 2     | ..... | 165 |
| Mendes Filho, J.   | 13  | 4       | ..... | 206   | Miranda, M. G. M.        | 13                   | 3       | 2     | ..... | 157   |     |
| Mendes, D. Q.      | 12  | 4       | ..... | 344   | Misoguti, L.             | 12                   | 4       | ..... | 198   |       |     |

| Autor                  | Dia | Período | Sala  | Pág.  | Autor                  | Dia               | Período | Sala  | Pág.  |       |     |
|------------------------|-----|---------|-------|-------|------------------------|-------------------|---------|-------|-------|-------|-----|
| Misoguti, L.           | 12  | 4       | ..... | 407   | Morais, P. C.          | 11                | 4       | ..... | 294   |       |     |
| Misoguti, L.           | 11  | 4       | ..... | 184   | Morais, P. C.          | 11                | 4       | ..... | 295   |       |     |
| Missel, F. P.          | 13  | 4       | ..... | 176   | Morais, P. C.          | 11                | 4       | ..... | 295   |       |     |
| Missell, F. P.         | 13  | 1       | 2     | ..... | 139                    | Morais, P. C.     | 11      | 4     | ..... | 296   |     |
| Missell, F. P.         | 11  | 4       | ..... | 130   | Morais, P. C.          | 13                | 1       | 7     | ..... | 334   |     |
| Missell, F. P.         | 13  | 4       | ..... | 179   | Morais, P. C.          | 11                | 4       | ..... | 296   |       |     |
| Missell, F. P.         | 13  | 1       | 2     | ..... | 142                    | Morais, P. C.     | 11      | 4     | ..... | 297   |     |
| Missell, F. P.         | 12  | 1       | 2     | ..... | 172                    | Morais, P. C.     | 11      | 4     | ..... | 297   |     |
| Mittani, J. C. R.      | 11  | 4       | ..... | 184   | Morais, P. C.          | 11                | 4       | ..... | 297   |       |     |
| Miyazaki, S.           | 12  | 4       | ..... | 254   | Morais, P. C.          | 11                | 1       | 9     | ..... | 277   |     |
| Mizrahi, S.            | 13  | 4       | ..... | 415   | Morais, P. C.          | 11                | 4       | ..... | 283   |       |     |
| Mizrahi, S. S.         | 13  | 3       | 10    | ..... | 413                    | Morais, P. C.     | 11      | 4     | ..... | 298   |     |
| Mizrahi, S. S.         | 12  | 4       | ..... | 105   | Morais, P. C.          | 13                | 1       | 7     | ..... | 334   |     |
| Mizukami, A.           | 13  | 1       | 10    | ..... | 440                    | Morais, P. C.     | 11      | 4     | ..... | 300   |     |
| Mocellin, A.           | 12  | 4       | ..... | 393   | Morais, P. C.          | 11                | 4       | ..... | 300   |       |     |
| Mohallem, J. R.        | 12  | 3       | 4     | ..... | 55                     | Moral, F.         | 12      | 1     | 3     | ..... | 2   |
| Mokross, B. J.         | 11  | 4       | ..... | 188   | Morato, S. P.          | 12                | 4       | ..... | 198   |       |     |
| Molho, P.              | 12  | 4       | ..... | 152   | Morato, S. P.          | 12                | 3       | 10    | ..... | 429   |     |
| Molinari, E.           | 13  | 1       | 7     | ..... | 336                    | Morato, S. P.     | 12      | 4     | ..... | 230   |     |
| Mondragon, J. C.       | 12  | 1       | 2     | ..... | 171                    | Morato, S. P.     | 12      | 4     | ..... | 202   |     |
| Mondragon, J. C. T.    | 11  | 4       | ..... | 128   | Moreira, A. R.         | 13                | 1       | 7     | ..... | 335   |     |
| Mondragon, J. C. T.    | 11  | 4       | ..... | 131   | Moreira, E. C.         | 13                | 4       | ..... | 375   |       |     |
| Monken, C.             | 11  | 1       | 10    | ..... | 410                    | Moreira, E. N.    | 12      | 3     | 1     | ..... | 196 |
| Monken, C. H.          | 11  | 1       | 10    | ..... | 410                    | Moreira, F. G. B. | 11      | 4     | ..... | 86    |     |
| Monken, C. H.          | 13  | 4       | ..... | 417   | Moreira, I. de C.      | 13                | 4       | ..... | 71    |       |     |
| Monte, A. F. G.        | 11  | 1       | 9     | ..... | 278                    | Moreira, I. de C. | 11      | 3     | 7     | ..... | 64  |
| Monteiro, D. W. de L.  | 12  | 4       | ..... | 152   | Moreira, I. de C.      | 13                | 4       | ..... | 72    |       |     |
| Monteiro, E. C.        | 13  | 1       | 3     | ..... | 30                     | Moreira, I. de C. | 13      | 4     | ..... | 72    |     |
| Monteiro, E. C.        | 13  | 1       | 3     | ..... | 31                     | Moreira, J. E. C. | 11      | 3     | 7     | ..... | 339 |
| Monteiro, E. C.        | 13  | 1       | 3     | ..... | 31                     | Moreira, J. G.    | 12      | 4     | ..... | 103   |     |
| Monteiro, P. S.        | 11  | 4       | ..... | 424   | Moreira, L. F.         | 11                | 4       | ..... | 146   |       |     |
| Montenegro, E. C.      | 11  | 4       | ..... | 40    | Moreira, M. V. B.      | 11                | 1       | 9     | ..... | 277   |     |
| Montenegro, E. C.      | 13  | 1       | 4     | ..... | 58                     | Moreira, M. V. B. | 11      | 4     | ..... | 285   |     |
| Montenegro, E. C.      | 13  | 1       | 4     | ..... | 58                     | Moreira, M. V. B. | 13      | 4     | ..... | 267   |     |
| Montenegro, E. C.      | 13  | 1       | 4     | ..... | 57                     | Moreira, R. L.    | 13      | 1     | 1     | ..... | 233 |
| Montenegro, F. C.      | 12  | 1       | 2     | ..... | 171                    | Moreira, R. L.    | 12      | 3     | 1     | ..... | 196 |
| Moraes, A. M.          | 13  | 4       | ..... | 416   | Moreira, R. L.         | 13                | 1       | 1     | ..... | 233   |     |
| Moraes, E. de          | 11  | 4       | ..... | 127   | Moreira, R. L.         | 12                | 4       | ..... | 230   |       |     |
| Moraes, E. de          | 12  | 4       | ..... | 153   | Moreira, S. G. C.      | 12                | 4       | ..... | 228   |       |     |
| Moraes, E. R.          | 12  | 4       | ..... | 26    | Moreira, S. G. C.      | 13                | 4       | ..... | 209   |       |     |
| Moraes, F. J. S.       | 12  | 4       | ..... | 327   | Morelhao, S.           | 11                | 4       | ..... | 436   |       |     |
| Moraes, J. C. S.       | 12  | 4       | ..... | 430   | Morelhao, S. L.        | 13                | 1       | 6     | ..... | 371   |     |
| Moraes, J. C. S.       | 13  | 1       | 4     | ..... | 56                     | Morelhao, S. L.   | 12      | 1     | 9     | ..... | 250 |
| Moraes, J. E. V. de    | 13  | 4       | ..... | 206   | Moreno, A. J. de D.    | 13                | 3       | 1     | ..... | 248   |     |
| Moraes, L. B. A. O.    | 12  | 4       | ..... | 200   | Moreno, A. J. de D.    | 13                | 4       | ..... | 212   |       |     |
| Moraes, L. B. O. A. de | 12  | 4       | ..... | 198   | Moreno, M. da P. do N. | 12                | 4       | ..... | 200   |       |     |
| Moraes, L. B. O. A. de | 11  | 4       | ..... | 184   | Moreno, N. O.          | 11                | 4       | ..... | 135   |       |     |
| Moraes, M. A. B. D.    | 13  | 4       | ..... | 372   | Moret, M.              | 12                | 4       | ..... | 114   |       |     |
| Moraes, M. A. B. de    | 11  | 1       | 6     | ..... | 396                    | Moret, M.         | 12      | 1     | 3     | ..... | 4   |
| Moraes, M. A. B. de    | 11  | 4       | ..... | 400   | Moret, M.              | 13                | 4       | ..... | 6     |       |     |
| Moraes, M. B. de       | 12  | 4       | ..... | 204   | Moro, J. R.            | 12                | 3       | 6     | ..... | 383   |     |
| Moraes, R.             | 12  | 4       | ..... | 26    | Mosca, D. H.           | 11                | 4       | ..... | 399   |       |     |
| Morais, E. de          | 11  | 4       | ..... | 133   | Mosca, D. H.           | 11                | 4       | ..... | 399   |       |     |
| Morais, E. de          | 12  | 4       | ..... | 154   | Mosca, D. H.           | 11                | 1       | 6     | ..... | 395   |     |
| Morais, P. C.          | 11  | 1       | 9     | ..... | 278                    | Mosca, D. H.      | 11      | 4     | ..... | 400   |     |
| Morais, P. C.          | 11  | 4       | ..... | 294   | Mosca, D. H.           | 13                | 1       | 6     | ..... | 372   |     |

| Autor                | Dia | Período | Sala | Pág. | Autor               | Dia | Período | Sala | Pág. |
|----------------------|-----|---------|------|------|---------------------|-----|---------|------|------|
| Mosca, D. H.         | 12  | 1       | 6    | 390  | Nascente, P. A. P.  | 12  | 1       | 6    | 389  |
| Mosca, D. H.         | 13  | 4       |      | 180  | Nascente, P. A. P.  | 12  | 1       | 1    | 245  |
| Mostepanenko, V.     | 12  | 3       | 7    | 98   | Nascimento, F. C.   | 13  | 4       |      | 215  |
| Mota, R.             | 12  | 4       |      | 256  | Nascimento, O. R.   | 11  | 4       |      | 17   |
| Motisque, P.         | 11  | 1       | 9    | 279  | Nascimento, V. B.   | 12  | 1       | 6    | 390  |
| Motta, A. T.         | 13  | 1       | 6    | 370  | Natalense, A. P. P. | 11  | 1       | 4    | 38   |
| Moukarzel, C.        | 11  | 1       | 7    | 110  | Natalense, A. P. P. | 11  | 4       |      | 42   |
| Moura, A. G. da C.   | 12  | 4       |      | 118  | Natalense, A. P. P. | 11  | 1       | 4    | 37   |
| Moura, C.            | 11  | 4       |      | 148  | Nazareno, H. N.     | 13  | 4       |      | 269  |
| Moura, C. S.         | 11  | 1       | 2    | 125  | Nemes, M. C.        | 13  | 4       |      | 73   |
| Moura, M. A. G. de   | 13  | 4       |      | 71   | Nemes, M. C.        | 13  | 4       |      | 73   |
| Moura, W. A.         | 13  | 3       | 7    | 307  | Nemoto, C. T.       | 13  | 4       |      | 312  |
| Moussa, M. H. Y.     | 13  | 4       |      | 414  | Nemov, S. A.        | 13  | 1       | 5    | 355  |
| Moussa, M. H. Y.     | 11  | 1       | 10   | 412  | Neri, J. W.         | 13  | 3       | 10   | 433  |
| Moya-Cessa, H.       | 13  | 4       |      | 416  | Nero, J. D.         | 12  | 4       |      | 332  |
| Mucciolo, E. R.      | 12  | 3       | 9    | 253  | Netto, P. R. de S.  | 11  | 4       |      | 129  |
| Mucciolo, E. R.      | 12  | 3       | 9    | 253  | Netto, T. G.        | 12  | 4       |      | 15   |
| Mucciolo, E. R.      | 12  | 3       | 9    | 253  | Neves, J. N.        | 11  | 4       |      | 21   |
| Mukai, H.            | 12  | 4       |      | 325  | Nicodemi, M.        | 12  | 1       | 7    | 87   |
| Mullen, S. S.        | 12  | 4       |      | 13   | Nicodemi, M.        | 11  | 4       |      | 74   |
| Mundim, K. C.        | 11  | 3       | 3    | 1    | Nicolsky, R.        | 12  | 4       |      | 368  |
| Mundim, K. C.        | 12  | 1       | 3    | 4    | Nieva, G.           | 11  | 1       | 5    | 347  |
| Mune, P.             | 11  | 4       |      | 350  | Nishida, Y.         | 11  | 4       |      | 353  |
| Munhoz, A. L. J.     | 13  | 3       | 7    | 308  | Nishida, Y.         | 11  | 4       |      | 354  |
| Munin, E.            | 11  | 4       |      | 436  | Noack, F.           | 12  | 4       |      | 328  |
| Munin, E.            | 12  | 1       | 3    | 3    | Nobel, M.           | 13  | 4       |      | 177  |
| Munin, E.            | 11  | 1       | 3    | 10   | Nobre, E. F.        | 11  | 3       | 2    | 166  |
| Munin, E.            | 12  | 4       |      | 430  | Nobre, F. D.        | 11  | 4       |      | 78   |
| Muniz, B.            | 13  | 1       | 3    | 30   | Nobre, F. D.        | 11  | 4       |      | 83   |
| Muniz, R. B.         | 13  | 4       |      | 172  | Nobre, F. D.        | 11  | 4       |      | 84   |
| Muniz, R. B.         | 13  | 4       |      | 168  | Nobre, F. D.        | 11  | 4       |      | 84   |
| Muniz, R. B.         | 13  | 4       |      | 178  | Nogaret, A.         | 13  | 4       |      | 268  |
| Muniz, R. B.         | 11  | 3       | 2    | 164  | Nogueira Jr, E.     | 11  | 4       |      | 78   |
| Muniz, S. R.         | 11  | 3       | 4    | 60   | Nogueira, F.        | 12  | 4       |      | 158  |
| Muniz, S. R.         | 11  | 3       | 4    | 61   | Nogueira, L. N.     | 13  | 4       |      | 374  |
| Muniz, S. R.         | 11  | 3       | 4    | 61   | Nogueira, R. N.     | 13  | 4       |      | 216  |
| Muniz, S. R.         | 12  | 4       |      | 48   | Nogueira, T. de O.  | 11  | 1       | 3    | 10   |
| Munte, C. E.         | 11  | 4       |      | 19   | Novak, M. A.        | 12  | 4       |      | 151  |
| Murakami, R. K.      | 11  | 4       |      | 130  | Novak, M. A.        | 11  | 1       | 2    | 126  |
| Murakami, R. K.      | 11  | 4       |      | 135  | Novak, M. A.        | 13  | 4       |      | 177  |
| Muramatsu, M.        | 12  | 1       | 10   | 404  | Novelli, M.         | 11  | 1       | 3    | 10   |
| Muramatsu, M.        | 12  | 3       | 7    | 320  | Nubiato, E. L.      | 13  | 4       |      | 313  |
| Muramatsu, M.        | 13  | 1       | 10   | 435  | Nubile, P.          | 12  | 4       |      | 262  |
| Muramatsu, M.        | 13  | 1       | 10   | 440  | Nunes, F. D.        | 11  | 4       |      | 423  |
| Musa, J.             | 12  | 4       |      | 366  | Nunes, F. D.        | 12  | 4       |      | 198  |
| Musa, J.             | 11  | 4       |      | 350  | Nunes, F. D.        | 12  | 4       |      | 407  |
| Nabet, B.            | 12  | 1       | 9    | 249  | Nunes, F. D.        | 12  | 4       |      | 200  |
| Na, C. Y.            | 12  | 1       | 9    | 251  | Nunes, L. A.        | 12  | 4       |      | 257  |
| Nagashima, H. N.     | 12  | 4       |      | 343  | Nunes, L. A. D. O.  | 11  | 4       |      | 188  |
| Nakagaito, A. N.     | 11  | 4       |      | 184  | Nunes, L. A. de O.  | 12  | 4       |      | 200  |
| Nakamura, O.         | 12  | 1       | 9    | 251  | Nunes, L. A. de O.  | 13  | 1       | 9    | 289  |
| Napolitano, R.       | 11  | 3       | 4    | 61   | Nunes, N.           | 12  | 4       |      | 388  |
| Napolitano, R. de J. | 11  | 3       | 4    | 61   | Nunes, R. A.        | 13  | 4       |      | 217  |
| Nart, F. C.          | 13  | 4       |      | 311  | Nunes, R. de A.     | 11  | 4       |      | 437  |
| Narvaez, G.          | 11  | 4       |      | 284  | Nunes, R. de A.     | 11  | 4       |      | 438  |
| Narvaez, G. A.       | 11  | 4       |      | 283  | Nunes, R. de A.     | 11  | 4       |      | 438  |

| Autor                  | Dia | Período | Sala | Pág. | Autor                 | Dia | Período | Sala | Pág. |
|------------------------|-----|---------|------|------|-----------------------|-----|---------|------|------|
| Nunes, V. B.           | 13  | 4       |      | 373  | Oliveira, I. S.       | 11  | 4       |      | 127  |
| Nunes, W. D. C.        | 12  | 4       |      | 151  | Oliveira, I. S.       | 12  | 4       |      | 159  |
| Nunes, W. de C.        | 11  | 1       | 2    | 126  | Oliveira, J. B. B. de | 13  | 4       |      | 271  |
| Nunes, W. de C.        | 13  | 4       |      | 177  | Oliveira, L. de       | 12  | 4       |      | 232  |
| Nunez, J. J. R.        | 12  | 4       |      | 158  | Oliveira, L. N. de    | 12  | 3       | 2    | 138  |
| Nunez, J. J. R.        | 12  | 4       |      | 158  | Oliveira, L. N. de    | 12  | 3       | 2    | 137  |
| Nussenzveig, P.        | 11  | 3       | 4    | 60   | Oliveira, L. N. de    | 12  | 4       |      | 161  |
| Obradors, X.           | 13  | 1       | 5    | 357  | Oliveira, L. N. de    | 12  | 4       |      | 161  |
| Obradors, X.           | 11  | 4       |      | 351  | Oliveira, L. N. de    | 12  | 4       |      | 161  |
| Obradors, X.           | 11  | 4       |      | 130  | Oliveira, L. S. de    | 11  | 4       |      | 398  |
| Odo, G. Y.             | 11  | 4       |      | 399  | Oliveira, M. A. S.    | 12  | 3       | 1    | 196  |
| Odo, G. Y.             | 13  | 4       |      | 374  | Oliveira, M. A. S. de | 12  | 4       |      | 230  |
| Ogata, K.              | 11  | 4       |      | 401  | Oliveira, M. C. de    | 12  | 4       |      | 50   |
| Ohrn, Y.               | 11  | 2       | B    | 39   | Oliveira, M. G. de    | 11  | 4       |      | 17   |
| Oiwa, N. N.            | 13  | 4       |      | 66   | Oliveira, M. J. de    | 11  | 4       |      | 74   |
| Okuno, E.              | 12  | 4       |      | 225  | Oliveira, M. J. de    | 13  | 4       |      | 95   |
| Oliva, G.              | 13  | 4       |      | 206  | Oliveira, M. J. de    | 12  | 1       | 7    | 88   |
| Oliveira Jr., O. N. de | 12  | 1       | 7    | 330  | Oliveira, M. J. de    | 13  | 3       | 7    | 91   |
| Oliveira Jr, N. F.     | 13  | 4       |      | 269  | Oliveira, N. A. de    | 11  | 4       |      | 144  |
| Oliveira Jr, N. F.     | 12  | 1       | 2    | 172  | Oliveira, N. A. de    | 11  | 4       |      | 144  |
| Oliveira Jr, N. F.     | 13  | 4       |      | 170  | Oliveira, N. A. de    | 12  | 3       | 2    | 139  |
| Oliveira Jr, O. N.     | 12  | 1       | 7    | 322  | Oliveira, N. A. de    | 13  | 4       |      | 167  |
| Oliveira Jr, O. N.     | 11  | 4       |      | 18   | Oliveira, N. A. de    | 11  | 1       | 2    | 124  |
| Oliveira Jr, O. N.     | 12  | 4       |      | 333  | Oliveira, P. G.       | 11  | 4       |      | 183  |
| Oliveira Jr, O. N.     | 12  | 4       |      | 333  | Oliveira, P. M. C. de | 11  | 1       | 7    | 110  |
| Oliveira Jr, O. N. de  | 12  | 1       | 7    | 331  | Oliveira, P. M. C. de | 12  | 4       |      | 101  |
| Oliveira Jr, O. N. de  | 12  | 1       | 7    | 331  | Oliveira, P. M. C. de | 12  | 4       |      | 101  |
| Oliveira Jr, O. N. de  | 12  | 1       | 7    | 330  | Oliveira, P. M. C. de | 12  | 4       |      | 102  |
| Oliveira Jr, O. N. de  | 12  | 1       | 7    | 329  | Oliveira, P. M. C. de | 13  | 4       |      | 68   |
| Oliveira Jr, O. N. de  | 12  | 1       | 3    | 3    | Oliveira, P. M. de C. | 13  | 1       | 7    | 119  |
| Oliveira, A. G.        | 13  | 4       |      | 271  | Oliveira, R. B. de    | 12  | 4       |      | 26   |
| Oliveira, A. G. de     | 11  | 4       |      | 285  | Oliveira, R. B. de    | 12  | 4       |      | 26   |
| Oliveira, A. G. de     | 13  | 4       |      | 267  | Oliveira, R. de C.    | 11  | 4       |      | 424  |
| Oliveira, A. G. de     | 13  | 4       |      | 268  | Oliveira, R. e S. de  | 12  | 3       | 1    | 195  |
| Oliveira, A. G. de     | 13  | 1       | 9    | 289  | Oliveira, S. M. de    | 11  | 1       | 7    | 110  |
| Oliveira, A. J. A. de  | 13  | 1       | 2    | 140  | Oliveira, W. da C. de | 12  | 3       | 2    | 137  |
| Oliveira, A. J. A. de  | 12  | 4       |      | 151  | Olivera, E. A. de     | 12  | 1       | 7    | 324  |
| Oliveira, A. J. A. de  | 13  | 4       |      | 180  | Olivera, E. A. de     | 12  | 3       | 7    | 320  |
| Oliveira, A. J. S.     | 11  | 4       |      | 42   | Olivieri, J. R.       | 11  | 4       |      | 21   |
| Oliveira, A. L. de     | 12  | 3       | 2    | 139  | Onmori, R. K.         | 13  | 1       | 7    | 336  |
| Oliveira, A. L. de     | 13  | 4       |      | 167  | Onmori, R. K.         | 13  | 3       | 9    | 292  |
| Oliveira, A. L. de     | 11  | 4       |      | 242  | Onody, R. N.          | 13  | 4       |      | 94   |
| Oliveira, A. L. de     | 11  | 1       | 7    | 305  | Onody, R. N.          | 13  | 4       |      | 95   |
| Oliveira, A. L. de     | 13  | 1       | 7    | 335  | Onody, R. N.          | 12  | 4       |      | 343  |
| Oliveira, C. R. de     | 11  | 3       | 7    | 65   | Oppenheim, I. C.      | 13  | 4       |      | 176  |
| Oliveira, E. A. de     | 12  | 1       | 7    | 323  | Oppenheim, I. C.      | 13  | 4       |      | 176  |
| Oliveira, E. A. de     | 12  | 4       |      | 327  | Oppenheim, I. F. C.   | 12  | 4       |      | 155  |
| Oliveira, E. N. de     | 11  | 4       |      | 236  | Orellana, P.          | 13  | 1       | 9    | 290  |
| Oliveira, F. A.        | 13  | 4       |      | 92   | Oria, M.              | 13  | 1       | 4    | 57   |
| Oliveira, I. G. de     | 12  | 4       |      | 159  | Oria, M.              | 12  | 4       |      | 432  |
| Oliveira, I. N. S.     | 11  | 1       | 3    | 11   | Orlando, M. T.        | 13  | 1       | 5    | 357  |
| Oliveira, I. S.        | 12  | 3       | 4    | 55   | Orlando, M. T.        | 11  | 4       |      | 351  |
| Oliveira, I. S.        | 12  | 4       |      | 149  | Orlando, M. T. de A.  | 13  | 4       |      | 219  |
| Oliveira, I. S.        | 12  | 4       |      | 46   | Orlando, M. T. de A.  | 11  | 4       |      | 353  |
| Oliveira, I. S.        | 11  | 4       |      | 41   | Orlando, M. T. de A.  | 11  | 4       |      | 353  |
| Oliveira, I. S.        | 11  | 4       |      | 127  | Orlando, M. T. de A.  | 11  | 4       |      | 354  |

| Autor              | Dia | Período | Sala | Pág. | Autor                | Dia | Período | Sala | Pág. |
|--------------------|-----|---------|------|------|----------------------|-----|---------|------|------|
| Orszag, M.         | 11  | 1       | 10   | 411  | Parage, F.           | 12  | 1       | 5    | 361  |
| Ortega, N. R. S.   | 12  | 1       | 7    | 88   | Parfeniev, R. V.     | 13  | 1       | 5    | 355  |
| Ortega, N. R. S.   | 11  | 4       |      | 77   | Parkin, S.           | 13  | 4       |      | 178  |
| Ortega, N. R. S.   | 13  | 4       |      | 34   | Parkin, S.           | 11  | 3       | 2    | 164  |
| Ortiz, J. F. S.    | 13  | 3       | 1    | 247  | Partiti, C. S. de M. | 12  | 4       |      | 227  |
| Ortiz, J. F. S.    | 13  | 3       | 1    | 247  | Pasa, A. A.          | 11  | 4       |      | 398  |
| Ortiz, W. A.       | 13  | 1       | 2    | 140  | Pasa, A. A.          | 11  | 4       |      | 398  |
| Ortiz, W. A.       | 12  | 3       | 5    | 365  | Pascual, M. F.       | 13  | 4       |      | 67   |
| Ortiz, W. A.       | 12  | 4       |      | 367  | Pascual, M. F.       | 13  | 4       |      | 68   |
| Ortiz, W. A.       | 12  | 4       |      | 153  | Pascutti, P.         | 13  | 4       |      | 6    |
| Ortiz, W. A.       | 11  | 1       | 5    | 346  | Pascutti, P. G.      | 12  | 1       | 3    | 4    |
| Ortiz, W. A.       | 13  | 4       |      | 180  | Pascutti, P. G.      | 11  | 3       | 3    | 1    |
| Ortmans, I.        | 11  | 3       | 3    | 1    | Pasotti, R. M. R.    | 13  | 4       |      | 211  |
| Osan, T.           | 11  | 4       |      | 242  | Passamani, E. C.     | 11  | 4       |      | 131  |
| Oseroff, S.        | 13  | 4       |      | 210  | Passamani, E. C.     | 13  | 4       |      | 169  |
| Oseroff, S. B.     | 11  | 4       |      | 126  | Passos, E. F.        | 11  | 4       |      | 424  |
| Osorio, F. A. P.   | 11  | 4       |      | 286  | Passos, W. de A. C.  | 12  | 4       |      | 153  |
| Osowski, M. L.     | 12  | 4       |      | 263  | Pastore, H. O.       | 11  | 4       |      | 182  |
| Otubo, J.          | 13  | 1       | 1    | 234  | Patricia Nicolucci,  | 12  | 4       |      | 15   |
| Pacheco, M. T. T.  | 12  | 1       | 3    | 2    | Paula, A. M. de      | 11  | 3       | 9    | 275  |
| Pacheco, M. T. T.  | 12  | 1       | 3    | 3    | Paula, A. M. de      | 11  | 3       | 9    | 274  |
| Pacheco, M. T. T.  | 11  | 1       | 3    | 10   | Paula, C. A. de      | 12  | 4       |      | 161  |
| Pacheco, M. T. T.  | 11  | 1       | 3    | 10   | Paula, G. L. de S.   | 13  | 4       |      | 35   |
| Pacheco, M. T. T.  | 13  | 1       | 3    | 29   | Paula, H. A. de      | 11  | 4       |      | 401  |
| Pacheco, M. T. T.  | 13  | 1       | 3    | 28   | Paula, H. M. de      | 11  | 4       |      | 280  |
| Pacheco, M. T. T.  | 13  | 1       | 3    | 30   | Paula, W. K. de      | 13  | 4       |      | 35   |
| Padilla, E. P.     | 11  | 4       |      | 132  | Pedroso, C. B.       | 11  | 4       |      | 436  |
| Padilla, E. P. R.  | 11  | 4       |      | 128  | Pedroso, C. B.       | 12  | 4       |      | 430  |
| Paduani, C.        | 12  | 4       |      | 160  | Peeters, F. M.       | 12  | 4       |      | 365  |
| Paduani, C.        | 13  | 4       |      | 215  | Peeters, F. M.       | 13  | 4       |      | 266  |
| Paduani, C.        | 11  | 4       |      | 130  | Peeters, F. M.       | 11  | 4       |      | 281  |
| Paduani, C.        | 13  | 4       |      | 177  | Peixoto, L.          | 12  | 4       |      | 199  |
| Padua, S. de       | 11  | 1       | 10   | 410  | Pela, C. A.          | 12  | 4       |      | 14   |
| Padua, S. de       | 11  | 1       | 10   | 410  | Pela, C. A.          | 12  | 4       |      | 15   |
| Paesano Jr, A.     | 13  | 1       | 6    | 370  | Pela, C. A.          | 12  | 4       |      | 27   |
| Pagliuso, P. G.    | 12  | 4       |      | 257  | Pela, C. A.          | 12  | 4       |      | 28   |
| Pagliuso, P. G.    | 11  | 4       |      | 187  | Pelegri, F.          | 11  | 4       |      | 294  |
| Pagliuso, P. J. G. | 11  | 4       |      | 126  | Pelegri, F.          | 11  | 4       |      | 297  |
| Paiva, J. A. C. de | 11  | 4       |      | 187  | Pelegri, F.          | 11  | 4       |      | 300  |
| Paiva, J. A. C. de | 11  | 4       |      | 240  | Pelegri, F.          | 13  | 4       |      | 179  |
| Paiva, J. A. C. de | 12  | 3       | 1    | 195  | Pelegri, F.          | 13  | 4       |      | 179  |
| Paiva, T. C. de L. | 11  | 1       | 2    | 125  | Pelegri, F.          | 12  | 4       |      | 262  |
| Palangana, A. J.   | 12  | 4       |      | 326  | Pelegri, F.          | 11  | 4       |      | 301  |
| Palangana, A. J.   | 12  | 4       |      | 327  | Pelegri, F.          | 11  | 4       |      | 301  |
| Palfy-Muhoray, P.  | 12  | 2       | B    | 304  | Pelegri, F.          | 13  | 4       |      | 170  |
| Palladino, F. H.   | 13  | 4       |      | 70   | Pelizzola, A.        | 13  | 4       |      | 93   |
| Pallini, M.        | 12  | 4       |      | 388  | Pelzl, J.            | 12  | 4       |      | 202  |
| Panepucci, H.      | 12  | 4       |      | 14   | Pena, M. I.          | 11  | 4       |      | 135  |
| Panepucci, H.      | 11  | 4       |      | 236  | Penna, T. J. P.      | 12  | 4       |      | 101  |
| Panepucci, H.      | 13  | 1       | 3    | 30   | Penna, T. J. P.      | 12  | 4       |      | 102  |
| Panepucci, H.      | 11  | 1       | 3    | 11   | Penna, T. J. P.      | 13  | 4       |      | 68   |
| Panepucci, H.      | 11  | 4       |      | 239  | Penna, T. J. P.      | 13  | 4       |      | 35   |
| Panepucci, R. R.   | 13  | 3       | 9    | 292  | Pepe, I.             | 12  | 1       | 9    | 250  |
| Panepucci, R. R.   | 12  | 4       |      | 263  | Pepe, I.             | 12  | 1       | 9    | 251  |
| Paniago, R.        | 12  | 1       | 6    | 389  | Pepe, I. M.          | 13  | 4       |      | 212  |
| Paniago, R. M.     | 12  | 1       | 6    | 390  | Pepino, R. T.        | 13  | 4       |      | 379  |

| Autor                    | Dia | Período | Sala | Pág. | Autor                 | Dia | Período | Sala | Pág. |
|--------------------------|-----|---------|------|------|-----------------------|-----|---------|------|------|
| Pereira Neto, J. R.      | 12  | 4       |      | 328  | Pinto Neto, A.        | 12  | 4       |      | 264  |
| Pereira, A. R.           | 11  | 4       |      | 297  | Pinto, A. L.          | 13  | 4       |      | 314  |
| Pereira, D.              | 12  | 4       |      | 47   | Pinto, R. D.          | 12  | 4       |      | 101  |
| Pereira, D.              | 12  | 4       |      | 48   | Pinto, R. D.          | 13  | 4       |      | 67   |
| Pereira, D.              | 12  | 4       |      | 430  | Pinto, R. D.          | 13  | 4       |      | 68   |
| Pereira, J. A. M.        | 13  | 3       | 6    | 378  | Pinto, R. D.          | 13  | 4       |      | 69   |
| Pereira, J. A. M.        | 13  | 3       | 6    | 378  | Pinto, R. D.          | 13  | 4       |      | 69   |
| Pereira, J. A. M.        | 12  | 1       | 6    | 391  | Pinto, R. L.          | 12  | 4       |      | 344  |
| Pereira, J. A. M.        | 11  | 3       | 4    | 62   | Pinto, S. S. F.       | 11  | 1       | 3    | 10   |
| Pereira, J. A. M.        | 13  | 4       |      | 217  | Piquini, P. C.        | 12  | 4       |      | 256  |
| Pereira, J. A. M.        | 13  | 4       |      | 382  | Piquini, P. C.        | 13  | 1       | 4    | 56   |
| Pereira, J. R. D.        | 12  | 4       |      | 326  | Pires, A. S. T.       | 11  | 4       |      | 145  |
| Pereira, L. A. A.        | 12  | 4       |      | 368  | Pires, A. S. T.       | 12  | 1       | 2    | 136  |
| Pereira, L. G.           | 13  | 3       | 2    | 155  | Pires, A. S. T.       | 12  | 1       | 2    | 136  |
| Pereira, M. B.           | 11  | 3       | 10   | 422  | Pires, M. A.          | 11  | 4       |      | 236  |
| Pereira, M. T.           | 12  | 4       |      | 13   | Pires, M. A.          | 11  | 4       |      | 240  |
| Peres, P. D.             | 12  | 4       |      | 408  | Pires, M. A.          | 11  | 4       |      | 240  |
| Pereyra, I.              | 12  | 4       |      | 262  | Pirota, K. R.         | 13  | 3       | 2    | 156  |
| Perez-Merchancano, S. T. | 11  | 4       |      | 287  | Pizani, P. S.         | 12  | 4       |      | 258  |
| Perez, O. A. G.          | 13  | 4       |      | 210  | Plascak, J. A.        | 11  | 4       |      | 75   |
| Perez, R. A.             | 13  | 4       |      | 373  | Plascak, J. A.        | 11  | 4       |      | 145  |
| Pernaut, J. M.           | 11  | 4       |      | 242  | Plascak, J. A.        | 11  | 4       |      | 85   |
| Pernaut, J. M.           | 13  | 1       | 7    | 335  | Plentz Filho, F. O.   | 11  | 4       |      | 288  |
| Perottoni, C. A.         | 11  | 1       | 1    | 222  | Politi, M. J.         | 12  | 3       | 3    | 23   |
| Pershin, S.              | 11  | 4       |      | 437  | Ponciano, C. R.       | 12  | 4       |      | 49   |
| Pershin, S.              | 11  | 4       |      | 438  | Ponte, E. T. D.       | 12  | 4       |      | 225  |
| Pershin, S.              | 11  | 4       |      | 438  | Pontes, R. S.         | 12  | 4       |      | 333  |
| Persiano, A. I. C.       | 11  | 4       |      | 132  | Pontuschka, W. M.     | 12  | 1       | 9    | 251  |
| Persiano, A. I. C.       | 12  | 4       |      | 163  | Pontuschka, W. M.     | 12  | 4       |      | 227  |
| Persiano, A. I. C.       | 12  | 4       |      | 154  | Popov, D. I.          | 13  | 1       | 5    | 355  |
| Pessoa, S. F.            | 12  | 4       |      | 162  | Porrás-Montenegro, N. | 11  | 4       |      | 281  |
| Peterlevitz, A. C.       | 12  | 4       |      | 388  | Portal, J. C.         | 13  | 4       |      | 269  |
| Petiptrez, E.            | 12  | 4       |      | 258  | Portella Filho, L. F. | 11  | 4       |      | 85   |
| Petrick, S.              | 11  | 4       |      | 238  | Porto, A. de O.       | 13  | 4       |      | 314  |
| Petrilli, H. M.          | 13  | 4       |      | 216  | Possagno, R.          | 12  | 4       |      | 332  |
| Petrilli, H. M.          | 13  | 4       |      | 216  | Poulain, M.           | 12  | 1       | 1    | 246  |
| Petrilli, H. M.          | 12  | 4       |      | 162  | Poulain, M.           | 12  | 4       |      | 231  |
| Pfannes, H. -D.          | 12  | 1       | 6    | 390  | Poupeau, G.           | 11  | 4       |      | 238  |
| Pfeiffer, L. N.          | 11  | 4       |      | 288  | Povoa, J. M.          | 12  | 4       |      | 203  |
| Piamonteze, C.           | 13  | 4       |      | 207  | Pozzo, L.             | 12  | 4       |      | 14   |
| Pichard, J. L.           | 12  | 3       | 9    | 253  | Prado, F. M.          | 12  | 4       |      | 151  |
| Pimenta, M. A.           | 13  | 3       | 7    | 91   | Prado, L.             | 12  | 4       |      | 230  |
| Pimenta, M. A.           | 11  | 1       | 1    | 223  | Prado, R. J.          | 12  | 4       |      | 262  |
| Pimenta, M. A.           | 13  | 4       |      | 313  | Prevost, M.           | 11  | 3       | 3    | 1    |
| Pimenta, M. A.           | 13  | 1       | 1    | 233  | Prieto, P.            | 11  | 1       | 5    | 347  |
| Pimenta, M. A.           | 11  | 1       | 7    | 306  | Prioli, R.            | 11  | 4       |      | 398  |
| Pimentel, R. B.          | 12  | 4       |      | 385  | Protsenko, I.         | 11  | 1       | 10   | 412  |
| Pinczuk, A.              | 11  | 4       |      | 288  | Pureaur, P.           | 11  | 4       |      | 352  |
| Pinheiro, C. B.          | 11  | 1       | 1    | 223  | Pureur, P.            | 11  | 4       |      | 144  |
| Pinho, R. R.             | 13  | 4       |      | 381  | Pureur, P.            | 11  | 1       | 5    | 347  |
| Pinho, R. R.             | 12  | 4       |      | 49   | Pureur, P.            | 13  | 1       | 5    | 357  |
| Pinho, S. T. R.          | 12  | 1       | 7    | 88   | Pureur, P.            | 11  | 1       | 5    | 347  |
| Pinho, S. T. R. de       | 13  | 1       | 7    | 120  | Pureur, P.            | 11  | 4       |      | 350  |
| Pino Jr, A. D.           | 12  | 1       | 3    | 3    | Pusep, Y. A.          | 11  | 1       | 9    | 277  |
| Pino Junior, A. D.       | 11  | 4       |      | 45   | Pusiol, D.            | 12  | 4       |      | 204  |
| Pintao, C. A. F.         | 11  | 4       |      | 43   | Pusiol, D.            | 12  | 4       |      | 205  |

| Autor                 | Dia | Período | Sala | Pág. | Autor                    | Dia | Período | Sala | Pág. |
|-----------------------|-----|---------|------|------|--------------------------|-----|---------|------|------|
| Pusiol, D.            | 12  | 4       |      | 205  | Rettori, C.              | 11  | 4       |      | 240  |
| Pusiol, D. J.         | 11  | 4       |      | 302  | Rettori, C.              | 13  | 4       |      | 210  |
| Pusiol, D. J.         | 12  | 1       | 7    | 324  | Reuter, E.               | 12  | 4       |      | 263  |
| Pusiol, D. J.         | 12  | 4       |      | 328  | Rey-Gonzalez, R.         | 11  | 4       |      | 284  |
| Pusiol, D. J.         | 11  | 4       |      | 302  | Rezende, E.              | 12  | 4       |      | 24   |
| Pusiol, D. J.         | 11  | 4       |      | 303  | Rezende, M. C.           | 12  | 4       |      | 226  |
| Pusiol, D. J.         | 11  | 4       |      | 303  | Rezende, M. de F. S.     | 12  | 4       |      | 163  |
| Queiroz, J. R. de O.  | 13  | 4       |      | 418  | Rezende, S. M.           | 13  | 4       |      | 178  |
| Qu, F.                | 11  | 4       |      | 283  | Rezende, S. M.           | 11  | 3       | 2    | 165  |
| Quillfeldt, J. A.     | 13  | 4       |      | 33   | Rezende, S. M.           | 11  | 3       | 2    | 164  |
| Quivy, A. A.          | 12  | 4       |      | 257  | Ribeiro Filho, G. S.     | 13  | 4       |      | 36   |
| Quivy, A. A.          | 12  | 4       |      | 258  | Ribeiro Filho, J.        | 11  | 3       | 9    | 274  |
| Quivy, A. A.          | 11  | 4       |      | 286  | Ribeiro Junior, P. E. M. | 12  | 4       |      | 25   |
| Quivy, A. A.          | 12  | 4       |      | 260  | Ribeiro Junior, P. E. M. | 12  | 4       |      | 25   |
| Quivy, A. A.          | 13  | 4       |      | 272  | Ribeiro, C.              | 12  | 4       |      | 153  |
| Rabelo, J. N. T.      | 13  | 3       | 1    | 247  | Ribeiro, C. A.           | 11  | 4       |      | 127  |
| Rabelo, J. N. T.      | 13  | 3       | 1    | 247  | Ribeiro, C. A.           | 11  | 4       |      | 133  |
| Rabelo, J. N. T.      | 13  | 4       |      | 381  | Ribeiro, C. A. de L.     | 13  | 4       |      | 71   |
| Ramirez, J. V.        | 12  | 4       |      | 14   | Ribeiro, C. T. M.        | 12  | 4       |      | 200  |
| Ramirez, R.           | 13  | 3       | 6    | 377  | Ribeiro, F. de M. M.     | 11  | 4       |      | 439  |
| Ramos, A. C. A.       | 12  | 4       |      | 109  | Ribeiro, G. C.           | 12  | 4       |      | 51   |
| Ramos, A. S.          | 11  | 4       |      | 81   | Ribeiro, P. A.           | 13  | 4       |      | 312  |
| Ramos, L. R.          | 12  | 4       |      | 103  | Ribeiro, P. C.           | 13  | 1       | 3    | 30   |
| Rangel, E. C.         | 13  | 4       |      | 372  | Ribeiro, P. C.           | 13  | 1       | 3    | 31   |
| Rangel, E. C.         | 11  | 1       | 6    | 396  | Ribeiro, P. C.           | 13  | 1       | 3    | 31   |
| Rangel, E. C.         | 11  | 4       |      | 400  | Ribeiro, P. H. S.        | 13  | 4       |      | 414  |
| Ranieri, I. M.        | 12  | 3       | 10   | 429  | Ribeiro, P. H. S.        | 11  | 1       | 10   | 410  |
| Ranke, P. J. V.       | 11  | 4       |      | 144  | Ribeiro, R. A.           | 11  | 4       |      | 349  |
| Ranke, P. J. V.       | 11  | 4       |      | 144  | Ribeiro, R. A.           | 11  | 1       | 5    | 346  |
| Rao, D.               | 11  | 4       |      | 126  | Ribeiro, R. M.           | 13  | 4       |      | 217  |
| Raposo, M.            | 12  | 4       |      | 333  | Ribeiro, S.              | 12  | 4       |      | 202  |
| Raposo, M.            | 12  | 4       |      | 333  | Richard, V. L.           | 11  | 3       | 9    | 275  |
| Rappl, P. H. de O.    | 12  | 1       | 9    | 251  | Riedi, P. C.             | 11  | 4       |      | 127  |
| Rappl, P. H. de O.    | 11  | 1       | 9    | 279  | Riedtman, R. W. W.       | 11  | 4       |      | 399  |
| Rappoport, T. G.      | 13  | 4       |      | 169  | Righi, A.                | 13  | 1       | 1    | 233  |
| Ravaioli, U.          | 13  | 3       | 9    | 292  | Ringhofer, K. H.         | 12  | 4       |      | 408  |
| Rechenberg, H. R.     | 11  | 4       |      | 145  | Rino, J. P.              | 12  | 4       |      | 100  |
| Rechenberg, H. R.     | 11  | 4       |      | 146  | Rino, J. P.              | 12  | 4       |      | 102  |
| Rechenberg, H. R.     | 13  | 1       | 2    | 141  | Riske, K. A.             | 12  | 3       | 3    | 23   |
| Rechenberg, H. R.     | 12  | 4       |      | 150  | Riul Jr, A.              | 12  | 1       | 7    | 331  |
| Rech, P. C.           | 13  | 4       |      | 71   | Riul Jr, A.              | 12  | 1       | 7    | 331  |
| Redigolo, M. L.       | 11  | 3       | 9    | 274  | Riul Jr, A.              | 12  | 1       | 7    | 329  |
| Redinz, J. A.         | 12  | 4       |      | 116  | Riva, R.                 | 13  | 3       | 10   | 433  |
| Reed, W. F.           | 12  | 3       | 3    | 23   | Riva, R.                 | 12  | 3       | 10   | 429  |
| Regehr, H.            | 12  | 4       |      | 433  | Riva, R.                 | 12  | 4       |      | 430  |
| Region, D. - M.       | 11  | 3       | 5    | 361  | Rivas, A. G. A.          | 12  | 4       |      | 113  |
| Rego, H. H. A.        | 12  | 1       | 7    | 89   | Rizzo, P.                | 12  | 4       |      | 263  |
| Rego, H. H. A.        | 12  | 4       |      | 344  | Roa-Rojas, J.            | 11  | 1       | 5    | 347  |
| Rego, H. H. A.        | 11  | 3       | 7    | 338  | Roa-Rojas, J.            | 11  | 4       |      | 352  |
| Reigada, D. C.        | 11  | 4       |      | 436  | Robert, H.               | 12  | 4       |      | 204  |
| Reinecke, T. L.       | 11  | 1       | 9    | 278  | Robert, H.               | 12  | 4       |      | 205  |
| Reis Junior, M. de S. | 12  | 4       |      | 149  | Robert, H.               | 12  | 4       |      | 205  |
| Reis, F. D. A. A.     | 13  | 4       |      | 93   | Robert, H. R.            | 11  | 4       |      | 302  |
| Reis, F. D. A. A.     | 13  | 1       | 7    | 120  | Roberty, H. M. B.        | 11  | 4       |      | 43   |
| Rettori, C.           | 11  | 4       |      | 126  | Roblez, F. P.            | 11  | 4       |      | 182  |
| Rettori, C.           | 12  | 4       |      | 257  | Rocco, M. L. M.          | 11  | 4       |      | 43   |

| Autor                | Dia | Período | Sala | Pág. | Autor                  | Dia | Período | Sala | Pág. |
|----------------------|-----|---------|------|------|------------------------|-----|---------|------|------|
| Rocha, G. P.         | 11  | 4       |      | 187  | Sachs, A. de C.        | 13  | 3       | 9    | 292  |
| Rocha, M.            | 12  | 4       |      | 393  | Sackett, C. A.         | 13  | 2       | A    | 409  |
| Rocha, M.            | 12  | 1       | 1    | 244  | Saeki, M. J.           | 11  | 4       |      | 188  |
| Rocha, R. F. da      | 11  | 1       | 3    | 10   | Saeki, M. J.           | 11  | 4       |      | 242  |
| Rodella, C. B.       | 11  | 4       |      | 188  | Saenger, J. F.         | 11  | 4       |      | 297  |
| Rodella, C. B.       | 11  | 4       |      | 242  | Saikawa, T.            | 12  | 1       | 5    | 363  |
| Rodrigues Jr, J. J.  | 12  | 4       |      | 198  | Saiki, M.              | 11  | 4       |      | 237  |
| Rodrigues Jr, J. J.  | 12  | 4       |      | 407  | Saint-Gregoire, P.     | 13  | 1       | 1    | 232  |
| Rodrigues Jr, J. J.  | 12  | 4       |      | 200  | Saito, M.              | 13  | 4       |      | 273  |
| Rodrigues Junior, D. | 11  | 4       |      | 351  | Saitovitch, E. B.      | 11  | 4       |      | 131  |
| Rodrigues-Filho, U.  | 12  | 4       |      | 392  | Saitovitch, H.         | 13  | 1       | 2    | 141  |
| Rodrigues, A. R.     | 13  | 4       |      | 209  | Sakamoto, W. K.        | 13  | 4       |      | 316  |
| Rodrigues, A. R.     | 13  | 3       | 2    | 156  | Sakamoto, W. K.        | 13  | 4       |      | 317  |
| Rodrigues, C. G.     | 13  | 4       |      | 67   | Salem-Sugui Jr, S.     | 11  | 1       | 5    | 346  |
| Rodrigues, C. G.     | 13  | 4       |      | 68   | Sales, F. H. S.        | 12  | 4       |      | 197  |
| Rodrigues, C. W.     | 13  | 4       |      | 273  | Sales, T. R. de M.     | 11  | 4       |      | 78   |
| Rodrigues, E. S.     | 13  | 4       |      | 269  | Salgado, E. G. C.      | 12  | 4       |      | 255  |
| Rodrigues, L. E.     | 13  | 4       |      | 216  | Salinas, S. R.         | 11  | 4       |      | 78   |
| Rodrigues, M. G.     | 11  | 4       |      | 185  | Salinas, S. R. A.      | 12  | 1       | 7    | 88   |
| Rodrigues, N. A. S.  | 13  | 3       | 10   | 433  | Salvadori, M. C.       | 12  | 4       |      | 385  |
| Rodrigues, N. A. S.  | 12  | 3       | 10   | 429  | Salvadori, M. C.       | 12  | 4       |      | 385  |
| Rodrigues, N. A. S.  | 12  | 4       |      | 430  | Salvadori, M. C.       | 12  | 4       |      | 386  |
| Rodrigues, R.        | 12  | 4       |      | 259  | Salvadori, M. C.       | 12  | 4       |      | 387  |
| Rodrigues, S. G.     | 12  | 4       |      | 258  | Salvadori, M. C. B. S. | 12  | 1       | 7    | 322  |
| Rodrigues, S. G.     | 12  | 4       |      | 262  | Sa, M. W. F. de        | 12  | 4       |      | 255  |
| Rodrigues, V.        | 12  | 4       |      | 201  | Samad, R. E.           | 12  | 4       |      | 198  |
| Rodriguez, C. R.     | 11  | 4       |      | 302  | Sampaio, J. A.         | 12  | 4       |      | 200  |
| Rodriguez, G. J. B.  | 11  | 3       | 2    | 165  | Sampaio, J. A.         | 11  | 4       |      | 189  |
| Rodriguez, G. J. B.  | 13  | 3       | 2    | 157  | Sampaio, J. A.         | 12  | 4       |      | 203  |
| Rodriguez, R.        | 11  | 4       |      | 303  | Sampaio, J. A.         | 12  | 3       | 10   | 428  |
| Rodriguez, R.        | 11  | 4       |      | 303  | Sampaio, J. F.         | 13  | 4       |      | 267  |
| Rodriguez, V. P.     | 13  | 4       |      | 169  | Sampaio, L. C.         | 12  | 4       |      | 149  |
| Rojas, R. C.         | 12  | 4       |      | 201  | Sampaio, L. C.         | 13  | 4       |      | 169  |
| Rojo, T.             | 11  | 4       |      | 135  | Sampaio, L. C.         | 11  | 1       | 7    | 112  |
| Romano, J. A.        | 13  | 4       |      | 177  | Sampaio, L. C.         | 12  | 4       |      | 152  |
| Romero, J. G.        | 11  | 4       |      | 132  | Sampaio, L. C.         | 12  | 1       | 1    | 245  |
| Romero, M. A.        | 13  | 4       |      | 272  | Sanchez, D.            | 13  | 1       | 5    | 356  |
| Romero, S. A.        | 11  | 4       |      | 130  | Sanchez, D. R.         | 12  | 1       | 2    | 171  |
| Rosario, A. V. do    | 13  | 4       |      | 312  | Sanchez, G.            | 13  | 4       |      | 372  |
| Rossi, A. M.         | 11  | 4       |      | 238  | Sanchez, G.            | 13  | 4       |      | 375  |
| Rossi, A. M.         | 11  | 4       |      | 238  | Sandim, M. J. R.       | 12  | 4       |      | 366  |
| Rossi, A. M.         | 11  | 4       |      | 242  | Sanjurjo, J. A.        | 11  | 4       |      | 126  |
| Rossi, F.            | 13  | 1       | 7    | 336  | Sanjurjo, J. A.        | 13  | 4       |      | 210  |
| Rossi, J. C.         | 13  | 4       |      | 269  | Sano, W.               | 12  | 4       |      | 225  |
| Rossi, J. C.         | 13  | 4       |      | 272  | Sant'Anna, M. M.       | 13  | 1       | 4    | 58   |
| Roversi, J. A.       | 13  | 4       |      | 416  | Sant'Anna, M. M.       | 13  | 1       | 4    | 58   |
| Roversi, J. A.       | 13  | 4       |      | 417  | Sant'Anna, M. M.       | 13  | 1       | 4    | 57   |
| Roversi, J. A.       | 13  | 4       |      | 418  | Santaella, R. C.       | 12  | 4       |      | 260  |
| Rubinger, R. M.      | 13  | 4       |      | 268  | Santana, D. R.         | 13  | 4       |      | 179  |
| Ruggiero, J. R.      | 13  | 4       |      | 8    | Santana, U. J.         | 12  | 4       |      | 24   |
| Ruggiero, J. R.      | 13  | 4       |      | 8    | Santiago, R. B.        | 11  | 4       |      | 279  |
| Ryan, E. A.          | 13  | 1       | 6    | 370  | Santi, C. E.           | 12  | 4       |      | 152  |
| S. Neto, K.          | 11  | 4       |      | 300  | Santin Filho, O.       | 12  | 3       | 7    | 320  |
| Saavedra, N.         | 11  | 4       |      | 41   | Santo, L. L. do E.     | 12  | 1       | 3    | 5    |
| Sabag, M. M. de S.   | 13  | 4       |      | 95   | Santos, A.             | 12  | 4       |      | 154  |
| Sabino, J. R.        | 12  | 4       |      | 263  | Santos, A. C. F. dos   | 11  | 4       |      | 40   |

| Autor                | Dia | Período | Sala | Pág. | Autor              | Dia | Período | Sala | Pág. |
|----------------------|-----|---------|------|------|--------------------|-----|---------|------|------|
| Santos, A. C. F. dos | 13  | 1       | 4    | 58   | Sartorelli, J. C.  | 13  | 4       |      | 68   |
| Santos, A. C. F. dos | 13  | 1       | 4    | 58   | Sartorelli, J. C.  | 13  | 4       |      | 69   |
| Santos, A. C. F. dos | 13  | 1       | 4    | 57   | Sartorelli, J. C.  | 13  | 4       |      | 69   |
| Santos, A. D. dos    | 12  | 4       |      | 150  | Sartorelli, M. L.  | 13  | 3       | 2    | 156  |
| Santos, A. D. dos    | 12  | 4       |      | 152  | Sasaki, J. M.      | 13  | 4       |      | 206  |
| Santos, A. D. dos    | 11  | 4       |      | 147  | Sasaki, J. M.      | 11  | 1       | 1    | 222  |
| Santos, A. D. dos    | 12  | 4       |      | 155  | Sasaki, J. M.      | 13  | 1       | 6    | 371  |
| Santos, A. dos       | 11  | 4       |      | 83   | Satulovsky, J. E.  | 11  | 4       |      | 74   |
| Santos, A. J. de J.  | 12  | 4       |      | 231  | Sauerwein, R. A.   | 12  | 4       |      | 106  |
| Santos, A. S. dos    | 12  | 4       |      | 47   | Saul, C. K.        | 13  | 3       | 9    | 293  |
| Santos, C. A. dos    | 11  | 1       | 2    | 125  | Saul, C. K.        | 13  | 4       |      | 175  |
| Santos, C. A. dos    | 11  | 1       | 1    | 221  | Sawada, L.         | 12  | 4       |      | 202  |
| Santos, C. A. dos    | 11  | 4       |      | 148  | Sawada, L.         | 12  | 4       |      | 202  |
| Santos, C. B. dos    | 12  | 4       |      | 109  | Scala Jr, N. L.    | 13  | 4       |      | 269  |
| Santos, C. G. dos    | 12  | 4       |      | 331  | Scalabrin, A.      | 12  | 4       |      | 47   |
| Santos, C. G. dos    | 12  | 4       |      | 332  | Scalabrin, A.      | 12  | 4       |      | 48   |
| Santos, D. R. dos    | 11  | 4       |      | 399  | Scalabrin, A.      | 12  | 4       |      | 430  |
| Santos, F. C.        | 11  | 3       | 7    | 64   | Scalvi, R. M. F.   | 12  | 4       |      | 232  |
| Santos, F. C.        | 13  | 4       |      | 72   | Scarpato, M. A. F. | 13  | 3       | 7    | 308  |
| Santos, F. L. dos    | 13  | 3       | 7    | 308  | Schaf, J.          | 11  | 4       |      | 144  |
| Santos, F. L. dos    | 13  | 4       |      | 316  | Schaf, J.          | 11  | 4       |      | 350  |
| Santos, G. C. dos    | 11  | 4       |      | 21   | Schaf, J.          | 12  | 4       |      | 160  |
| Santos, I. A. dos    | 11  | 4       |      | 127  | Schaf, J.          | 13  | 4       |      | 215  |
| Santos, I. D.        | 13  | 1       | 7    | 334  | Schaf, J.          | 11  | 4       |      | 130  |
| Santos, J. G. dos    | 12  | 1       | 9    | 251  | Scheid, V. H. B.   | 13  | 3       | 10   | 433  |
| Santos, L. F.        | 13  | 3       | 7    | 307  | Scheid, V. H. B.   | 12  | 4       |      | 46   |
| Santos, L. F.        | 12  | 4       |      | 345  | Schelp, L. F.      | 13  | 4       |      | 179  |
| Santos, M.           | 11  | 4       |      | 76   | Schelp, L. F.      | 13  | 4       |      | 179  |
| Santos, M.           | 11  | 4       |      | 77   | Schelp, L. F.      | 13  | 4       |      | 170  |
| Santos, M. B. L.     | 12  | 1       | 7    | 323  | Schiabel, H.       | 11  | 1       | 3    | 11   |
| Santos, M. B. L.     | 13  | 4       |      | 66   | Schilling, O. F.   | 11  | 1       | 5    | 346  |
| Santos, M. S.        | 11  | 3       | 4    | 60   | Schilling, P. J.   | 11  | 1       | 6    | 397  |
| Santos, P. A. M. dos | 13  | 4       |      | 217  | Schilling, P. J.   | 13  | 4       |      | 175  |
| Santos, R. J. V. dos | 11  | 4       |      | 147  | Schmidt, J. E.     | 13  | 4       |      | 175  |
| Santos, R. M. Z. dos | 12  | 4       |      | 113  | Schmidt, J. E.     | 13  | 4       |      | 173  |
| Santos, R. M. Z. dos | 13  | 3       | 3    | 32   | Schmidt, J. E.     | 13  | 4       |      | 177  |
| Santos, R. M. Z. dos | 12  | 4       |      | 118  | Schmidt, J. E.     | 13  | 4       |      | 179  |
| Santos, R. M. Z. dos | 11  | 1       | 7    | 110  | Schmidt, J. E.     | 13  | 4       |      | 179  |
| Santos, R. R. dos    | 11  | 1       | 2    | 125  | Schmidt, J. E.     | 13  | 4       |      | 170  |
| Santos, R. R. dos    | 12  | 4       |      | 103  | Schneider, J.      | 11  | 4       |      | 240  |
| Santos, S. G. dos    | 11  | 4       |      | 398  | Schneider, J.      | 11  | 4       |      | 242  |
| Santos, S. L. dos    | 12  | 1       | 6    | 389  | Schoenmaker, J.    | 13  | 3       | 2    | 156  |
| Santos, S. M. A. dos | 13  | 4       |      | 35   | Schramm, D. U.     | 11  | 4       |      | 238  |
| Santos, S. M. dos    | 12  | 4       |      | 342  | Schreiner, W. H.   | 11  | 4       |      | 399  |
| Santos, S. M. dos    | 12  | 4       |      | 108  | Schreiner, W. H.   | 11  | 1       | 6    | 395  |
| Santos, V. C. dos    | 13  | 4       |      | 174  | Schreiner, W. H.   | 11  | 4       |      | 400  |
| Santos, V. C. dos    | 13  | 4       |      | 174  | Schreiner, W. H.   | 13  | 1       | 6    | 372  |
| Santos, V. H. F. dos | 11  | 3       | 1    | 191  | Schreiner, W. H.   | 12  | 1       | 6    | 390  |
| Santos, V. H. F. dos | 13  | 4       |      | 213  | Schreiner, W. H.   | 13  | 4       |      | 180  |
| Santos, W. M. S.     | 12  | 4       |      | 263  | Schriener, C.      | 12  | 4       |      | 325  |
| Saraceno, M.         | 13  | 4       |      | 66   | Schulz, P. A.      | 13  | 1       | 9    | 291  |
| Sardella, E.         | 12  | 1       | 5    | 363  | Schulz, P. A.      | 11  | 4       |      | 284  |
| Sarrao, J.           | 11  | 4       |      | 126  | Schurrer, C.       | 11  | 4       |      | 240  |
| Sartorelli, J. C.    | 12  | 4       |      | 101  | Schurrer, C.       | 11  | 4       |      | 242  |
| Sartorelli, J. C.    | 13  | 4       |      | 67   | Schwab, C.         | 13  | 3       | 10   | 433  |
| Sartorelli, J. C.    | 11  | 3       | 7    | 63   | Schwab, C.         | 12  | 3       | 10   | 429  |

| Autor                     | Dia | Período | Sala  | Pág. | Autor                       | Dia | Período | Sala  | Pág. |
|---------------------------|-----|---------|-------|------|-----------------------------|-----|---------|-------|------|
| Schwab, C.                | 12  | 4       | ..... | 430  | Silva Jr, E. F. da          | 13  | 4       | ..... | 270  |
| Schwarzacher, W.          | 11  | 4       | ..... | 398  | Silva Jr, R. da             | 11  | 4       | ..... | 82   |
| Schwob, C.                | 11  | 1       | 10    | 410  | Silva Junior, E. F. da      | 11  | 1       | 9     | 279  |
| Scolfaro, L. M. R.        | 11  | 1       | 9     | 277  | Silva, A. C. R. da          | 12  | 1       | 3     | 2    |
| Scolfaro, L. S. M. R.     | 13  | 4       | ..... | 265  | Silva, A. F. da             | 12  | 1       | 9     | 250  |
| Scorzelli, R. B.          | 11  | 4       | ..... | 238  | Silva, A. L. C. da          | 13  | 4       | ..... | 381  |
| Seitter, R. O.            | 11  | 4       | ..... | 302  | Silva, A. M. L. da          | 12  | 4       | ..... | 150  |
| Seitter, R. O.            | 11  | 4       | ..... | 303  | Silva, A. P. da             | 11  | 1       | 1     | 223  |
| Seitter, R. O.            | 11  | 4       | ..... | 303  | Silva, A. V. B. da          | 12  | 1       | 9     | 250  |
| Seligman, L.              | 11  | 4       | ..... | 398  | Silva, B. L. da             | 12  | 3       | 1     | 194  |
| Seligman, L.              | 11  | 4       | ..... | 398  | Silva, C. R. M.             | 12  | 4       | ..... | 387  |
| Sellitto, M.              | 12  | 1       | 7     | 87   | Silva, C. R. M. da          | 12  | 4       | ..... | 255  |
| Sellitto, M.              | 11  | 4       | ..... | 74   | Silva, E. . C. da           | 11  | 4       | ..... | 182  |
| Sengupta, D.              | 11  | 4       | ..... | 184  | Silva, E. A. de A. e        | 11  | 1       | 9     | 279  |
| Sengupta, D.              | 13  | 4       | ..... | 208  | Silva, E. C.                | 12  | 4       | ..... | 159  |
| Senna, L. F. de           | 13  | 4       | ..... | 374  | Silva, E. C. da             | 11  | 4       | ..... | 182  |
| Senna, L. F. de           | 13  | 4       | ..... | 375  | Silva, E. C. da             | 13  | 4       | ..... | 177  |
| Senoussi, S.              | 13  | 1       | 5     | 357  | Silva, E. C. F. da          | 12  | 4       | ..... | 260  |
| Sercheli, M. S.           | 12  | 4       | ..... | 257  | Silva, E. C. F. da          | 13  | 4       | ..... | 271  |
| Sergeenkov, S. A.         | 11  | 3       | 5     | 361  | Silva, E. F. da             | 12  | 4       | ..... | 261  |
| Sergio, M. A. B. de A. A. | 12  | 3       | 1     | 195  | Silva, E. P. da             | 11  | 1       | 4     | 37   |
| Serrano, A.               | 11  | 4       | ..... | 45   | Silva, E. P. da             | 11  | 1       | 4     | 39   |
| Serra, R. M.              | 11  | 4       | ..... | 282  | Silva, E. T. da             | 11  | 1       | 3     | 12   |
| Shah, M. B.               | 13  | 1       | 4     | 58   | Silva, E. T. da             | 11  | 1       | 3     | 12   |
| Shah, M. B.               | 13  | 1       | 4     | 58   | Silva, F. C. S. da          | 13  | 4       | ..... | 173  |
| Shah, M. B.               | 13  | 1       | 4     | 57   | Silva, F. C. S. da          | 13  | 4       | ..... | 176  |
| Shanshur, D. V.           | 13  | 1       | 5     | 355  | Silva, F. L. B. da          | 12  | 4       | ..... | 106  |
| Shaoping, B.              | 12  | 4       | ..... | 407  | Silva, F. M. H. S. P. da    | 13  | 4       | ..... | 6    |
| Sharipov, F.              | 11  | 4       | ..... | 44   | Silva, G. G.                | 13  | 4       | ..... | 313  |
| Sheng, Y.                 | 13  | 1       | 10    | 435  | Silva, G. G.                | 11  | 1       | 7     | 306  |
| Shibli, S. M.             | 11  | 4       | ..... | 295  | Silva, G. J. da             | 13  | 1       | 7     | 334  |
| Shibli, S. M.             | 11  | 4       | ..... | 298  | Silva, G. J. da             | 11  | 4       | ..... | 296  |
| Shida, C. S.              | 13  | 4       | ..... | 7    | Silva, G. J. F. T. da       | 11  | 3       | 7     | 63   |
| Shigue, C. Y.             | 13  | 4       | ..... | 210  | Silva, J. B. da             | 12  | 3       | 2     | 137  |
| Shi, J.                   | 11  | 3       | 9     | 274  | Silva, J. de A. F. e        | 13  | 4       | ..... | 206  |
| Shi, J. M.                | 13  | 4       | ..... | 266  | Silva, J. de A. F. e        | 11  | 1       | 1     | 222  |
| Shi, J. M.                | 11  | 4       | ..... | 281  | Silva, J. G.                | 11  | 4       | ..... | 239  |
| Shi, J. M.                | 11  | 4       | ..... | 281  | Silva, J. I. da             | 13  | 1       | 10    | 426  |
| Shukla, M. M.             | 13  | 4       | ..... | 213  | Silva, L. da                | 13  | 4       | ..... | 7    |
| Shukla, M. M.             | 13  | 4       | ..... | 219  | Silva, L. G. G. de V. D. da | 11  | 3       | 7     | 64   |
| Sias, U. S.               | 13  | 4       | ..... | 372  | Silva, L. R. D. da          | 13  | 4       | ..... | 206  |
| Sidaoui, H.               | 12  | 1       | 3     | 3    | Silva, L. R. da             | 12  | 1       | 7     | 89   |
| Sidaoui, H.               | 13  | 1       | 3     | 28   | Silva, L. R. da             | 11  | 3       | 7     | 338  |
| Siervo, A. de             | 12  | 4       | ..... | 392  | Silva, M. A. A.             | 11  | 1       | 1     | 223  |
| Siervo, A. de             | 12  | 1       | 6     | 391  | Silva, M. A. A.             | 12  | 4       | ..... | 228  |
| Siervo, A. de             | 12  | 1       | 6     | 391  | Silva, M. A. A.             | 12  | 3       | 1     | 194  |
| Sigaud, G. M.             | 11  | 4       | ..... | 40   | Silva, M. A. A. da          | 12  | 4       | ..... | 101  |
| Sigaud, G. M.             | 13  | 1       | 4     | 58   | Silva, M. A. A. da          | 12  | 4       | ..... | 341  |
| Sigaud, G. M.             | 13  | 1       | 4     | 58   | Silva, M. A. A. da          | 12  | 4       | ..... | 343  |
| Sigaud, G. M.             | 13  | 1       | 4     | 57   | Silva, M. A. B. da          | 12  | 1       | 2     | 172  |
| Sike, X.                  | 13  | 1       | 2     | 141  | Silva, M. A. B. da          | 13  | 4       | ..... | 170  |
| Silva Filho, A. C.        | 11  | 4       | ..... | 79   | Silva, M. F. da             | 12  | 4       | ..... | 161  |
| Silva Filho, A. C. da     | 13  | 4       | ..... | 6    | Silva, M. G. da             | 11  | 3       | 10    | 422  |
| Silva Filho, A. C. R. da  | 13  | 4       | ..... | 35   | Silva, M. G. da             | 13  | 4       | ..... | 381  |
| Silva Filho, D. A. da     | 11  | 1       | 7     | 306  | Silva, P. R.                | 12  | 4       | ..... | 367  |
| Silva Filho, H. F. da     | 11  | 4       | ..... | 423  | Silva, P. R.                | 12  | 4       | ..... | 368  |

| Autor                   | Dia | Período | Sala  | Pág.      | Autor                  | Dia | Período | Sala | Pág.      |
|-------------------------|-----|---------|-------|-----------|------------------------|-----|---------|------|-----------|
| Silva, P. R.            | 11  | 4       | ..... | 85        | Soares, L. L.          | 13  | 1       | 10   | ..... 439 |
| Silva, P. R.            | 11  | 1       | 7     | ..... 305 | Soares, M. R.          | 11  | 4       |      | ..... 129 |
| Silva, P. R. da         | 12  | 4       | ..... | 255       | Soares, M. R.          | 11  | 4       |      | ..... 129 |
| Silva, P. R. de J.      | 13  | 1       | 2     | ..... 141 | Soares, M. R. F.       | 13  | 4       |      | ..... 373 |
| Silva, R.               | 12  | 1       | 3     | ..... 2   | Sobol, W. T.           | 12  | 4       |      | ..... 16  |
| Silva, R. A. da         | 13  | 1       | 7     | ..... 334 | Soga, D.               | 13  | 1       | 10   | ..... 440 |
| Silva, R. A. da         | 12  | 4       | ..... | 341       | Sokolov, S. S.         | 12  | 4       |      | ..... 100 |
| Silva, R. A. da         | 13  | 4       | ..... | 313       | Sokolov, S. S.         | 12  | 4       |      | ..... 102 |
| Silva, R. A. da         | 11  | 4       | ..... | 300       | Sokolov, S. S.         | 12  | 3       | 7    | ..... 98  |
| Silva, R. C. da         | 11  | 4       | ..... | 399       | Sokolov, S. S.         | 12  | 4       |      | ..... 109 |
| Silva, R. C. da         | 11  | 1       | 6     | ..... 395 | Sombra, A. S. B.       | 11  | 4       |      | ..... 187 |
| Silva, R. C. da         | 11  | 4       | ..... | 400       | Sombra, A. S. B.       | 13  | 1       | 10   | ..... 426 |
| Silva, S.               | 12  | 4       | ..... | 385       | Sombra, A. S. B.       | 11  | 3       | 10   | ..... 422 |
| Silva, T. J. da         | 12  | 4       | ..... | 107       | Sombra, A. S. B.       | 11  | 4       |      | ..... 240 |
| Silva, T. S.            | 12  | 1       | 9     | ..... 251 | Sommer, R.             | 11  | 4       |      | ..... 144 |
| Silva, V. A.            | 12  | 4       | ..... | 387       | Sommer, R. L.          | 13  | 1       | 2    | ..... 140 |
| Silva, X. A. da         | 12  | 3       | 4     | ..... 55  | Sommer, R. L.          | 11  | 3       | 2    | ..... 165 |
| Silva, X. A. da         | 11  | 4       | ..... | 41        | Sommer, R. L.          | 11  | 4       |      | ..... 134 |
| Silva, X. A. da         | 12  | 4       | ..... | 159       | Sorensen, J. N.        | 13  | 4       |      | ..... 66  |
| Silveira Jr, L.         | 13  | 1       | 3     | ..... 29  | Souche, Y.             | 12  | 4       |      | ..... 150 |
| Silveira Junior, L.     | 12  | 1       | 3     | ..... 2   | Sousa Jr, D. F. de     | 13  | 4       |      | ..... 70  |
| Silveira, C. A. B. da   | 13  | 3       | 10    | ..... 433 | Sousa, A. de O.        | 11  | 3       | 7    | ..... 338 |
| Silveira, D. de M.      | 11  | 4       | ..... | 182       | Sousa, D. F. de        | 13  | 1       | 9    | ..... 289 |
| Silveira, E. F. da      | 13  | 4       | ..... | 379       | Sousa, J. J. F. de     | 11  | 4       |      | ..... 239 |
| Silveira, E. F. da      | 13  | 4       | ..... | 379       | Sousa, J. R. de        | 13  | 4       |      | ..... 92  |
| Silveira, E. F. da      | 12  | 1       | 6     | ..... 391 | Sousa, J. R. de        | 11  | 4       |      | ..... 145 |
| Silveira, E. F. da      | 11  | 3       | 4     | ..... 62  | Sousa, J. S. de        | 11  | 1       | 9    | ..... 279 |
| Silveira, E. F. da      | 13  | 4       | ..... | 381       | Sousa, K. M. O. de     | 13  | 4       |      | ..... 34  |
| Silveira, E. F. da      | 12  | 4       | ..... | 49        | Sousa, M. H.           | 11  | 4       |      | ..... 295 |
| Silveira, E. F. da      | 13  | 4       | ..... | 217       | Sousa, M. H.           | 11  | 4       |      | ..... 298 |
| Silveira, E. F. da      | 13  | 4       | ..... | 382       | Sousa, M. H.           | 11  | 4       |      | ..... 300 |
| Silveira, M. A. G.      | 12  | 4       | ..... | 387       | Sousa, P. L. de        | 11  | 1       | 3    | ..... 10  |
| Simao, A. G.            | 11  | 4       | ..... | 424       | Sousa, R. C. de        | 11  | 3       | 1    | ..... 192 |
| Simao, R. A.            | 13  | 3       | 6     | ..... 378 | Sousa, S. J. de F. e   | 13  | 1       | 3    | ..... 29  |
| Simao, R. A.            | 13  | 3       | 6     | ..... 377 | Sousa, S. J. de F. e   | 12  | 4       |      | ..... 24  |
| Simoës, A. S. da R.     | 12  | 4       | ..... | 163       | Sousa, S. J. de F. e   | 12  | 4       |      | ..... 25  |
| Simoës, C. S.           | 13  | 4       | ..... | 94        | Sousa, S. J. de F. e   | 12  | 4       |      | ..... 25  |
| Simoës, M.              | 12  | 4       | ..... | 327       | Sousa, S. J. de F. e   | 12  | 4       |      | ..... 26  |
| Simonetti, R.           | 11  | 4       | ..... | 122       | Souto, S.              | 13  | 3       | 1    | ..... 248 |
| Simonin, J.             | 13  | 4       | ..... | 271       | Souto, S.              | 13  | 4       |      | ..... 214 |
| Singh, M. A.            | 13  | 3       | 7     | ..... 309 | Souza Filho, A. G. de  | 12  | 3       | 1    | ..... 195 |
| Singh, M. A.            | 12  | 1       | 1     | ..... 244 | Souza Junior, E. A. de | 11  | 3       | 1    | ..... 191 |
| Sinnecker, J. P.        | 13  | 3       | 2     | ..... 156 | Souza Neto, A. L. de   | 11  | 4       |      | ..... 353 |
| Siqueira, A. F.         | 11  | 3       | 7     | ..... 338 | Souza Neto, A. L. de   | 11  | 4       |      | ..... 354 |
| Siqueira, J. R. R.      | 13  | 4       | ..... | 212       | Souza-Barros, F. de    | 11  | 4       |      | ..... 20  |
| Skeff Neto, C. B. T. K. | 11  | 4       | ..... | 295       | Souza, A. C. C. de     | 11  | 4       |      | ..... 401 |
| Skeff Neto, C. B. T. K. | 11  | 4       | ..... | 300       | Souza, A. R. de        | 12  | 4       |      | ..... 106 |
| Slanic, Z.              | 12  | 1       | 2     | ..... 171 | Souza, C. P. de        | 11  | 4       |      | ..... 134 |
| Soares Junior, P. C.    | 12  | 1       | 1     | ..... 245 | Souza, G. G. B. de     | 11  | 4       |      | ..... 43  |
| Soares, C.              | 11  | 4       | ..... | 436       | Souza, I. C. L. de     | 11  | 4       |      | ..... 237 |
| Soares, D. M.           | 13  | 1       | 7     | ..... 334 | Souza, J. B. de        | 12  | 1       | 10   | ..... 405 |
| Soares, J. A. N. de T.  | 12  | 4       | ..... | 257       | Souza, J. R.           | 11  | 4       |      | ..... 425 |
| Soares, J. A. N. de T.  | 11  | 4       | ..... | 288       | Souza, M. B. de        | 13  | 4       |      | ..... 212 |
| Soares, J. A. N. de T.  | 13  | 4       | ..... | 270       | Souza, M. O. D. de     | 13  | 4       |      | ..... 374 |
| Soares, L. L.           | 11  | 4       | ..... | 437       | Souza, P. L. de        | 13  | 4       |      | ..... 269 |
| Soares, L. L.           | 13  | 1       | 10    | ..... 440 | Souza, P. L. de        | 12  | 4       |      | ..... 27  |

| Autor               | Dia | Período | Sala | Pág. | Autor                 | Dia | Período | Sala | Pág. |
|---------------------|-----|---------|------|------|-----------------------|-----|---------|------|------|
| Souza, P. M. de     | 13  | 4       |      | 215  | Tamarit, F. A.        | 11  | 1       | 7    | 111  |
| Souza, P. P. de     | 11  | 1       | 7    | 306  | Tambelli, C. C.       | 11  | 4       |      | 241  |
| Souza, R. E. de     | 11  | 4       |      | 237  | Tambelli, C. E. C.    | 11  | 4       |      | 237  |
| Souza, R. E. de     | 11  | 1       | 3    | 10   | Tambourgi, E. B.      | 12  | 4       |      | 154  |
| Souza, R. F. de     | 13  | 3       | 3    | 32   | Tamura, E.            | 12  | 1       | 1    | 244  |
| Souza, S. D. de     | 13  | 4       |      | 374  | Taparo, M.            | 13  | 4       |      | 8    |
| Souza, S. M. de     | 12  | 4       |      | 159  | Tatumi, S. H.         | 11  | 4       |      | 183  |
| Souza, T. M. de     | 12  | 4       |      | 386  | Tatumi, S. H.         | 11  | 4       |      | 184  |
| Sperandio, A. L.    | 12  | 4       |      | 257  | Tatumi, S. H.         | 11  | 4       |      | 187  |
| Sperandio, A. L.    | 12  | 4       |      | 258  | Tatumi, S. H.         | 13  | 4       |      | 208  |
| Sperandio, A. L.    | 12  | 4       |      | 260  | Tatumi, S. H.         | 13  | 4       |      | 208  |
| Speziali, N. L.     | 11  | 1       | 1    | 223  | Teixeira, A. V.       | 13  | 1       | 7    | 120  |
| Spinelli, D.        | 13  | 4       |      | 374  | Teixeira, A. V.       | 12  | 4       |      | 342  |
| Stauffer, D.        | 11  | 1       | 7    | 110  | Teixeira, C. V.       | 13  | 1       | 7    | 336  |
| Stephens, P. W.     | 11  | 1       | 1    | 221  | Teixeira, P. C. N.    | 11  | 4       |      | 20   |
| Stilck, J. F.       | 13  | 4       |      | 92   | Teixeira, S. R.       | 13  | 1       | 6    | 370  |
| Stilck, J. F.       | 13  | 4       |      | 92   | Teixeira, S. R.       | 13  | 4       |      | 175  |
| Stoppiglia, L. F.   | 13  | 4       |      | 211  | Teixeira, S. R.       | 11  | 1       | 6    | 397  |
| Stovski'c, B. D. S. | 11  | 4       |      | 82   | Teixeira, S. R.       | 13  | 4       |      | 175  |
| Stovski'c, B. D. S. | 12  | 4       |      | 261  | Teixeira, S. R.       | 11  | 4       |      | 399  |
| Stovski'c, T. S.    | 11  | 4       |      | 82   | Teixeira, S. R.       | 11  | 1       | 6    | 395  |
| Strigazzi, A.       | 12  | 1       | 7    | 322  | Teixeira, S. R.       | 11  | 4       |      | 400  |
| Studart, N.         | 12  | 4       |      | 100  | Teixeira, S. R.       | 13  | 1       | 6    | 372  |
| Studart, N.         | 12  | 4       |      | 102  | Teixeira, S. R.       | 12  | 1       | 6    | 390  |
| Studart, N.         | 12  | 3       | 7    | 98   | Teixeira, S. R.       | 13  | 3       | 2    | 156  |
| Studart, N.         | 12  | 4       |      | 109  | Teixeira, S. R.       | 13  | 4       |      | 180  |
| Stumpf, H. O.       | 11  | 1       | 2    | 125  | Telles, E. M.         | 12  | 3       | 10   | 428  |
| Stutzmann, M.       | 13  | 4       |      | 310  | Telles, G. D.         | 11  | 3       | 4    | 60   |
| Suguo, K.           | 13  | 4       |      | 208  | Telles, G. D.         | 11  | 3       | 4    | 61   |
| Sunta, C. M.        | 12  | 4       |      | 197  | Telles, G. D.         | 11  | 3       | 4    | 61   |
| Surdutovich, G.     | 12  | 1       | 4    | 53   | Tellez, D. A. L.      | 13  | 3       | 5    | 358  |
| Surdutovich, G.     | 12  | 4       |      | 388  | Tellez, D. A. L.      | 13  | 1       | 5    | 355  |
| Surdutovich, G.     | 11  | 1       | 6    | 395  | Tellez, D. L.         | 13  | 1       | 5    | 355  |
| Suzuki, P. A.       | 13  | 1       | 5    | 354  | Tellez, D. L.         | 12  | 4       |      | 369  |
| Syrkin, E. S.       | 12  | 4       |      | 160  | Temkin, H.            | 13  | 4       |      | 267  |
| T. Neto, A.         | 13  | 4       |      | 270  | Tenan, M. A.          | 13  | 1       | 7    | 334  |
| Tabak, M.           | 11  | 4       |      | 18   | Tenan, M. A.          | 12  | 4       |      | 116  |
| Tabares, R. H.      | 11  | 4       |      | 437  | Tenorio, A. C.        | 12  | 4       |      | 331  |
| Tabares, R. H.      | 11  | 4       |      | 438  | Tenorio, A. C.        | 12  | 4       |      | 332  |
| Tabares, R. H.      | 11  | 4       |      | 438  | Tenorio, A. C.        | 13  | 3       | 7    | 308  |
| Tabata, A.          | 11  | 4       |      | 287  | Teschke, O.           | 12  | 4       |      | 15   |
| Tabosa, J. W. R.    | 12  | 4       |      | 432  | Teso, A.              | 13  | 4       |      | 8    |
| Tabosa, J. W. R.    | 12  | 4       |      | 432  | Tessler, L. R.        | 13  | 4       |      | 207  |
| Tabosa, J. W. R.    | 13  | 3       | 10   | 433  | Tessler, L. R.        | 13  | 4       |      | 211  |
| Tabosa, J. W. R.    | 12  | 4       |      | 433  | Thaumaturgo, C.       | 13  | 4       |      | 314  |
| Taillefer, L.       | 13  | 1       | 5    | 357  | Theoretical, B. L. O. | 11  | 3       | 5    | 361  |
| Takahashi, E. K.    | 13  | 4       |      | 272  | Theumann, A.          | 12  | 1       | 7    | 87   |
| Takahashi, E. K.    | 13  | 4       |      | 273  | Theumann, A.          | 11  | 4       |      | 82   |
| Takeuchi, A.        | 12  | 1       | 1    | 245  | Theumann, W. K.       | 12  | 3       | 7    | 99   |
| Takeuchi, A. Y.     | 12  | 4       |      | 46   | Theumann, W. K.       | 12  | 3       | 7    | 99   |
| Takeuchi, A. Y.     | 12  | 4       |      | 149  | Theumann, W. K.       | 13  | 4       |      | 33   |
| Takeuchi, A. Y.     | 11  | 4       |      | 129  | Theumann, W. K.       | 13  | 4       |      | 34   |
| Takeuchi, A. Y.     | 11  | 4       |      | 129  | Theumann, W. K.       | 11  | 4       |      | 122  |
| Takeuchi, A. Y.     | 13  | 1       | 2    | 141  | Thieghi, L. T.        | 11  | 4       |      | 295  |
| Takeuchi, A. Y.     | 11  | 4       |      | 132  | Thomaz, M. T.         | 12  | 4       |      | 159  |
| Tamarit, F. A.      | 11  | 4       |      | 76   | Tiera, M. J.          | 11  | 4       |      | 21   |

| Autor                   | Dia | Período | Sala | Pág. | Autor                   | Dia | Período | Sala | Pág. |
|-------------------------|-----|---------|------|------|-------------------------|-----|---------|------|------|
| Toginho Filho, D. de O. | 12  | 4       |      | 260  | Trippe, S. C.           | 12  | 4       |      | 155  |
| Toginho Filho, D. de O. | 12  | 4       |      | 260  | Triques, A. L. C.       | 13  | 1       | 9    | 291  |
| Toledano, P.            | 12  | 3       | 7    | 319  | Tronconi, A. L.         | 11  | 4       |      | 300  |
| Toledano, P.            | 11  | 4       |      | 295  | Tronconi, A. L.         | 11  | 4       |      | 301  |
| Toledano, P.            | 11  | 4       |      | 299  | Tronconi, A. L.         | 11  | 4       |      | 301  |
| Tolentino, H.           | 12  | 1       | 1    | 244  | Troper, A.              | 12  | 3       | 2    | 139  |
| Tolentino, H. C. N.     | 12  | 4       |      | 393  | Troper, A.              | 13  | 4       |      | 167  |
| Tomasi, D.              | 11  | 4       |      | 236  | Troper, A.              | 11  | 1       | 2    | 124  |
| Tomasi, D.              | 13  | 1       | 3    | 30   | Tsallis, C.             | 12  | 1       | 7    | 89   |
| Tomasi, D.              | 11  | 1       | 3    | 11   | Tsallis, C.             | 11  | 1       | 7    | 111  |
| Tomasi, D.              | 12  | 4       |      | 14   | Tsallis, C.             | 13  | 4       |      | 7    |
| Tome, T.                | 12  | 1       | 7    | 88   | Tsallis, C.             | 11  | 3       | 7    | 338  |
| Tome, T.                | 12  | 1       | 7    | 88   | Tsallis, C.             | 11  | 1       | 7    | 112  |
| Tonissi Jr, S. A.       | 11  | 4       |      | 44   | Tsuneto, N.             | 13  | 4       |      | 208  |
| Torres-Tapia, E. C.     | 11  | 4       |      | 146  | Tsuzuki, H.             | 12  | 1       | 9    | 251  |
| Torres, M. A. M.        | 13  | 4       |      | 169  | Tuboy, A. M.            | 11  | 4       |      | 44   |
| Torres, M. M.           | 11  | 4       |      | 131  | Tuboy, A. M.            | 12  | 4       |      | 49   |
| Torriani, I.            | 11  | 4       |      | 126  | Tuboy, A. M.            | 11  | 4       |      | 44   |
| Torriani, I. C. L.      | 11  | 4       |      | 284  | Tudury, G. E.           | 12  | 4       |      | 392  |
| Torriani, I. L.         | 11  | 4       |      | 399  | Tufaile, A.             | 11  | 3       | 7    | 63   |
| Torriani, I. L.         | 13  | 3       | 7    | 309  | Tufaile, A. P. B.       | 12  | 4       |      | 150  |
| Torriani, I. L.         | 12  | 4       |      | 151  | Turchiello, R. de F.    | 11  | 4       |      | 18   |
| Torriani, I. L.         | 12  | 1       | 1    | 244  | Ugarte, D. M.           | 12  | 4       |      | 201  |
| Torriani, I. L.         | 12  | 3       | 3    | 23   | Umbach, E.              | 13  | 4       |      | 381  |
| Toscano, F.             | 13  | 4       |      | 66   | Urahata, S.             | 11  | 4       |      | 43   |
| Tosin, G.               | 12  | 4       |      | 50   | Urbano, A.              | 12  | 4       |      | 153  |
| Tourinho, F. A.         | 11  | 4       |      | 294  | Urbanski, M.            | 12  | 4       |      | 199  |
| Tourinho, F. A.         | 11  | 4       |      | 294  | Valenciano, G. R.       | 13  | 4       |      | 315  |
| Tourinho, F. A.         | 11  | 4       |      | 295  | Valente, L. C. G.       | 11  | 3       | 10   | 421  |
| Tourinho, F. A.         | 11  | 4       |      | 295  | Valente, L. C. G.       | 13  | 1       | 10   | 426  |
| Tourinho, F. A.         | 11  | 4       |      | 296  | Valente, L. C. G.       | 11  | 3       | 10   | 421  |
| Tourinho, F. A.         | 13  | 1       | 7    | 334  | Valerio, M. E. G.       | 12  | 3       | 1    | 194  |
| Tourinho, F. A.         | 11  | 4       |      | 296  | Valerio, M. E. G.       | 12  | 4       |      | 230  |
| Tourinho, F. A.         | 11  | 4       |      | 297  | Valerio, M. E. G.       | 13  | 4       |      | 209  |
| Tourinho, F. A.         | 11  | 4       |      | 297  | Valerio, M. E. G.       | 12  | 4       |      | 230  |
| Tourinho, F. A.         | 11  | 4       |      | 298  | Valerio, M. E. G.       | 12  | 4       |      | 231  |
| Tourinho, F. A.         | 13  | 1       | 7    | 334  | Vallejos, R. O.         | 13  | 4       |      | 66   |
| Tourinho, F. A.         | 11  | 4       |      | 300  | Vallejos, R. O.         | 12  | 3       | 9    | 252  |
| Tourinho, F. A.         | 11  | 4       |      | 300  | Vallejos, R. O.         | 13  | 4       |      | 70   |
| Tourinho, F. A.         | 11  | 4       |      | 300  | Varela, A. T.           | 11  | 1       | 1    | 222  |
| Tourinho, F. A.         | 11  | 4       |      | 301  | Varela, A. T.           | 11  | 1       | 1    | 223  |
| Tourinho, F. A.         | 11  | 4       |      | 301  | Varella, M. T. do N.    | 11  | 1       | 4    | 38   |
| Tragtenberg, M. H. R.   | 11  | 4       |      | 83   | Vargas, E.              | 12  | 4       |      | 341  |
| Trallero-Giner, C.      | 11  | 3       | 9    | 275  | Vasconcelos Neto, L. C. | 12  | 4       |      | 226  |
| Trava-Airoldi, V. J.    | 12  | 3       | 6    | 384  | Vasconcelos, D. S. de   | 12  | 4       |      | 199  |
| Trava-Airoldi, V. J.    | 12  | 4       |      | 386  | Vasconcelos, D. S. de   | 13  | 3       | 1    | 248  |
| Trava-Airoldi, V. J.    | 12  | 4       |      | 386  | Vasconcelos, D. S. de   | 12  | 4       |      | 199  |
| Trava-Airoldi, V. J.    | 12  | 4       |      | 387  | Vasconcelos, E. A. de   | 13  | 4       |      | 270  |
| Trava-Airoldi, V. J.    | 12  | 3       | 6    | 383  | Vasconcelos, G. L.      | 11  | 1       | 7    | 112  |
| Traverse, A.            | 11  | 1       | 6    | 397  | Vasconcelos, I. F. de   | 12  | 4       |      | 229  |
| Traverse, A.            | 13  | 4       |      | 175  | Vasconcelos, M. S.      | 11  | 4       |      | 282  |
| Trentin, R.             | 12  | 4       |      | 257  | Vasconcelos, M. S.      | 11  | 4       |      | 283  |
| Trentin, R.             | 13  | 4       |      | 270  | Vasconcelos, S. S.      | 13  | 4       |      | 210  |
| Tretiakov, Nikolai P.   | 13  | 3       | 1    | 247  | Vasilevskiy, M. I.      | 13  | 4       |      | 265  |
| Tribollet, B.           | 11  | 3       | 1    | 193  | Vdovin, V.              | 13  | 4       |      | 270  |
| Triches, D. M.          | 11  | 3       | 1    | 191  | Vechi, S. M.            | 12  | 4       |      | 105  |

| Autor                | Dia | Período | Sala | Pág. | Autor               | Dia | Período | Sala | Pág. |
|----------------------|-----|---------|------|------|---------------------|-----|---------|------|------|
| Vega, M. L.          | 12  | 1       | 7    | 324  | Walf, H.            | 12  | 1       | 2    | 171  |
| Veissid, N.          | 12  | 1       | 9    | 251  | Walton, D.          | 11  | 4       |      | 298  |
| Veje, E.             | 12  | 1       | 9    | 250  | Wang, H.            | 13  | 1       | 9    | 290  |
| Venegas, P. A.       | 11  | 4       |      | 129  | Wang, J.            | 11  | 4       |      | 423  |
| Ventura, L.          | 13  | 1       | 3    | 29   | Wasle, S.           | 13  | 1       | 7    | 334  |
| Ventura, L.          | 12  | 4       |      | 24   | Watanabe, S.        | 12  | 4       |      | 197  |
| Ventura, L.          | 12  | 4       |      | 25   | Watanabe, S.        | 11  | 4       |      | 183  |
| Ventura, L.          | 12  | 4       |      | 26   | Watanabe, S.        | 11  | 4       |      | 184  |
| Ventura, L.          | 12  | 4       |      | 25   | Watanabe, S.        | 11  | 4       |      | 401  |
| Vermelho, M. V. D.   | 11  | 3       | 10   | 421  | Watanabe, S.        | 11  | 4       |      | 187  |
| Vermelho, M. V. D.   | 11  | 4       |      | 425  | Watanabe, S.        | 13  | 4       |      | 208  |
| Viana, J. D. M.      | 12  | 1       | 4    | 52   | Watanabe, S.        | 13  | 4       |      | 208  |
| Vianna, M.           | 12  | 1       | 1    | 245  | Watanuki, J.        | 12  | 4       |      | 430  |
| Vianna, S. S.        | 12  | 4       |      | 432  | Watanuki, J. T.     | 12  | 3       | 10   | 429  |
| Vianna, S. S.        | 12  | 4       |      | 432  | Weber, G.           | 11  | 4       |      | 280  |
| Vianna, S. S.        | 13  | 3       | 10   | 433  | Weber, G.           | 11  | 1       | 9    | 278  |
| Vianna, S. S.        | 12  | 4       |      | 433  | Weberszpil, J.      | 13  | 4       |      | 265  |
| Vicente, F. S. de    | 12  | 4       |      | 231  | Weiner, J.          | 11  | 3       | 4    | 61   |
| Vicentin, F. C.      | 12  | 4       |      | 393  | Weinschutz, S. M.   | 12  | 1       | 5    | 362  |
| Vicentini, E.        | 13  | 4       |      | 73   | Weissmuller, G.     | 13  | 4       |      | 34   |
| Vidoto, E. L.        | 11  | 4       |      | 236  | Weissmuller, G.     | 11  | 4       |      | 20   |
| Vidoto, E. L.        | 13  | 1       | 3    | 30   | Welling, M.         | 13  | 2       | A    | 409  |
| Vidoto, E. L.        | 11  | 1       | 3    | 11   | Werneck, M. M.      | 12  | 4       |      | 28   |
| Vidoto, E. L.        | 12  | 4       |      | 14   | West, K. W.         | 11  | 4       |      | 288  |
| Vieira Jr, N. D.     | 12  | 3       | 10   | 429  | Westphal, C. H.     | 11  | 4       |      | 146  |
| Vieira Junior, N. D. | 12  | 4       |      | 198  | Westphal, C. H.     | 12  | 4       |      | 227  |
| Vieira Junior, N. D. | 12  | 4       |      | 230  | Wetter, N. U.       | 12  | 3       | 10   | 429  |
| Vieira Junior, N. D. | 12  | 1       | 1    | 246  | Wien, K.            | 13  | 4       |      | 379  |
| Vieira Junior, N. D. | 12  | 4       |      | 231  | Wien, K.            | 11  | 3       | 4    | 62   |
| Vieira, A. de P.     | 11  | 4       |      | 80   | Wien, K.            | 13  | 4       |      | 382  |
| Vieira, A. de P.     | 12  | 4       |      | 107  | Wiesinger, G.       | 11  | 4       |      | 127  |
| Vieira, F. de M. C.  | 12  | 4       |      | 113  | Wisniewski, C.      | 13  | 3       | 7    | 307  |
| Vieira, F. de M. C.  | 12  | 4       |      | 114  | Wojcik, M.          | 11  | 4       |      | 127  |
| Vieira, M. M. F.     | 12  | 4       |      | 202  | Wolfenson, A.       | 11  | 4       |      | 242  |
| Vieira, M. M. F.     | 12  | 4       |      | 202  | Wolter, J. H.       | 13  | 4       |      | 266  |
| Vieira, S. R.        | 11  | 4       |      | 83   | Wysin, G. M.        | 12  | 1       | 2    | 136  |
| Vieira, V.           | 11  | 4       |      | 350  | Wysin, G. M.        | 12  | 1       | 2    | 136  |
| Vilcarromero, J.     | 11  | 3       | 1    | 191  | Xavier Jr, I. de M. | 13  | 4       |      | 7    |
| Vilela, M. J.        | 12  | 4       |      | 116  | Xavier Jr, I. de M. | 12  | 4       |      | 49   |
| Villas-Boas, V.      | 11  | 4       |      | 130  | Xia, S.             | 11  | 4       |      | 132  |
| Villas-Boas, V.      | 11  | 4       |      | 135  | Yada, D.            | 12  | 4       |      | 327  |
| Villaverde, A. B.    | 11  | 4       |      | 436  | Yadava, Y. P.       | 13  | 1       | 5    | 355  |
| Villaverde, A. B.    | 12  | 4       |      | 430  | Yadava, Y. P.       | 13  | 3       | 5    | 358  |
| Viscovini, R. C.     | 12  | 4       |      | 430  | Yadava, Y. P.       | 13  | 1       | 5    | 355  |
| Vitlina, R.          | 11  | 1       | 6    | 395  | Yanez-Limon, J. M.  | 11  | 4       |      | 182  |
| Viviani, W.          | 11  | 3       | 3    | 1    | Yanez-Limon, J. M.  | 11  | 4       |      | 182  |
| Vollet, D. R.        | 11  | 4       |      | 181  | Yavich, B.          | 13  | 4       |      | 269  |
| Voroviev, Y.         | 11  | 4       |      | 182  | Yelon, W. B.        | 11  | 2       | 10   | 181  |
| Voth, G. A.          | 12  | 4       |      | 49   | Ying, C. S.         | 12  | 4       |      | 108  |
| Vugman, N. V.        | 11  | 4       |      | 239  | Yokaichiya, F.      | 12  | 4       |      | 151  |
| Wagener, W.          | 12  | 1       | 2    | 171  | Yukihara, E. G.     | 12  | 4       |      | 225  |
| Wagner, P. R. S.     | 13  | 3       | 7    | 308  | Zacharias, C. R.    | 12  | 1       | 3    | 3    |
| Wajnberg, E.         | 12  | 4       |      | 24   | Zacharias, C. R.    | 11  | 4       |      | 45   |
| Wajnberg, E.         | 12  | 3       | 3    | 22   | Zahnan, R.          | 12  | 4       |      | 149  |
| Wajnberg, E.         | 11  | 4       |      | 19   | Zamar, R. C.        | 12  | 4       |      | 328  |
| Wajnberg, E.         | 11  | 4       |      | 20   | Zampieri, G.        | 12  | 1       | 6    | 389  |

| Autor                     | Dia | Período | Sala  | Pág.  | Autor        | Dia              | Período | Sala  | Pág.  |       |     |
|---------------------------|-----|---------|-------|-------|--------------|------------------|---------|-------|-------|-------|-----|
| Zanatta, R.               | 12  | 4       | ..... | 257   | Zilio, S. C. | 12               | 4       | ..... | 198   |       |     |
| Zanette, S.               | 11  | 4       | ..... | 398   | Zilio, S. C. | 12               | 4       | ..... | 407   |       |     |
| Zanette, S. I.            | 13  | 4       | ..... | 373   | Zilio, S. C. | 12               | 4       | ..... | 407   |       |     |
| Zanetti, S. M.            | 11  | 1       | 5     | ..... | 346          | Zilio, S. C.     | 11      | 3     | 4     | ..... | 61  |
| Zangaro, R. A.            | 12  | 1       | 3     | ..... | 3            | Zilio, S. C.     | 12      | 4     | ..... | 200   |     |
| Zangaro, R. A.            | 11  | 1       | 3     | ..... | 10           | Zilio, S. C.     | 11      | 3     | 4     | ..... | 60  |
| Zangaro, R. A.            | 13  | 1       | 3     | ..... | 29           | Zimmerman, R. L. | 11      | 4     | ..... | 185   |     |
| Zangaro, R. A.            | 13  | 1       | 3     | ..... | 30           | Zink, L. R.      | 12      | 3     | 10    | ..... | 428 |
| Zanon, R. A. de S.        | 11  | 3       | 4     | ..... | 61           | Zorzi, J. E.     | 11      | 1     | 1     | ..... | 222 |
| Zanon, R. A. De S.        | 12  | 4       | ..... | 47    | Zubov, I. V. | 13               | 3       | 1     | ..... | 247   |     |
| Zanotto, E. D.            | 12  | 1       | 1     | ..... | 246          | Zubov, V. I.     | 13      | 3     | 1     | ..... | 247 |
| Zanotto, E. D.            | 12  | 1       | 1     | ..... | 245          | Zubov, V. I.     | 13      | 3     | 1     | ..... | 247 |
| Zara, R. A.               | 13  | 4       | ..... | 94    | Zubov, V. I. | 13               | 4       | ..... | 67    |       |     |
| Zeballos-Velasquez, E. L. | 13  | 4       | ..... | 218   | Zubov, V. I. | 13               | 4       | ..... | 68    |       |     |
| Zemba, G.                 | 13  | 4       | ..... | 271   | Zubov, V. I. | 13               | 4       | ..... | 96    |       |     |
| Zemel, J. N.              | 13  | 3       | 9     | ..... | 293          | Zubov, V. I.     | 13      | 4     | ..... | 381   |     |
| Zerner, M. C.             | 12  | 1       | 4     | ..... | 53           | Zvezdin, A. K.   | 12      | 1     | 7     | ..... | 323 |
| Zhang, R.                 | 12  | 3       | 3     | ..... | 22           |                  |         |       |       |       |     |
| Zhao, X.                  | 13  | 1       | 9     | ..... | 290          |                  |         |       |       |       |     |
| Zilio, S. C.              | 12  | 1       | 10    | ..... | 403          |                  |         |       |       |       |     |