

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



*Poços de Caldas/MG, 23 a 26 de Abril de 1986*

**SOCIEDADE BRASILEIRA DE FÍSICA**

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

**PROGRAMA**

**E**

**RESUMOS**

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

**Comissão Organizadora:-**

**Prof. Adalberto Fazzio - IFUSP (Coordenador)**

**Prof. Henrique G.P.Lins de Barros - CBPF**

**Prof. José Suassuna Filho - UNICAMP**

**Prof. Wido Schreiner - UFRGS**

**Fontes Patrocinadoras:-**

**FINEP - Financiadora de Estudos e Projetos**

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

**CNPq - Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico**

**Mangels Industrial S/A**

## ÍNDICE

I	-	Introdução.....	pág.	1
II	-	Mapas das Dependências Interiores do Hotel.....		3
III	-	Quadro de Participantes por Grupo de Trabalho.....		6
IV	-	Siglas dos Grupos de Trabalho.....		7
V	-	Programação das Atividades do IX ENFMC.....		9
		V.1 - Horário.....		11
		V.2 - Distribuição das Salas entre os Grupos de Trabalho.....		14
		V.3 - Conferência e Palestras Convidadas.....		15
VI	-	Resumos dos Trabalhos.....		17
		VI.1 - Materiais Amorfos.....		19
		VI.2 - Física Atômica e Molecular.....		27
		VI.3 - Biofísica.....		39
		VI.4 - Cristalografia.....		49
		VI.5 - Defeitos, Crescimento e Caracterização de Cristais.....		59
		VI.6 - Física Estatística e Fenômenos Críticos.....		71
		VI.7 - Instrumentação.....		89
		VI.8 - Cristais Líquidos.....		99
		VI.9 - Magnetismo.....		107
		VI.10 - Ciência dos Materiais/Propriedades Mecânicas.....		117
		VI.11 - Metais e Ligas.....		125
		VI.12 - Ótica.....		137
		VI.13 - Ressonância Magnética.....		163
		VI.14 - Semicondutores.....		173

## I - INTRODUÇÃO

"...no reino do pensamento, a imprudência é um método" (Le Surrealisme, G.Bachelard)

Nos últimos anos a Física brasileira vem sentindo o crescimento de grupos, tanto teóricos quanto experimentais, nas áreas de concentração ligadas ao estudo da matéria condensada. Parte do interesse neste assunto pode ter sido motivado pelo fato das técnicas experimentais (e teóricas) serem de relativo baixo custo, quando comparadas com as de outras áreas, permitindo que grupos diferentes se dediquem ao estudo de temas comuns. Esta adequação da pesquisa aos recursos disponíveis traz, como decorrência, um intenso intercâmbio e motiva o crescimento de grupos, tanto em regiões privilegiadas quanto em centros menores. O desenvolvimento de diversos laboratórios, junto ao interesse próprio dos problemas abordados, possibilita a pesquisa em assuntos que podem ter uma aplicação ao nível tecnológico, aumentando ainda mais a procura, por parte de pessoal recém-formado, destes grupos.

A contribuição dos centros de matéria condensada para a formação de pessoal altamente qualificado é inquestionável e em praticamente todas as regiões do país existem pesquisadores experimentais e teóricos trabalhando ativamente nesta área, permitindo, assim, o crescimento dos cursos de pós-graduação.

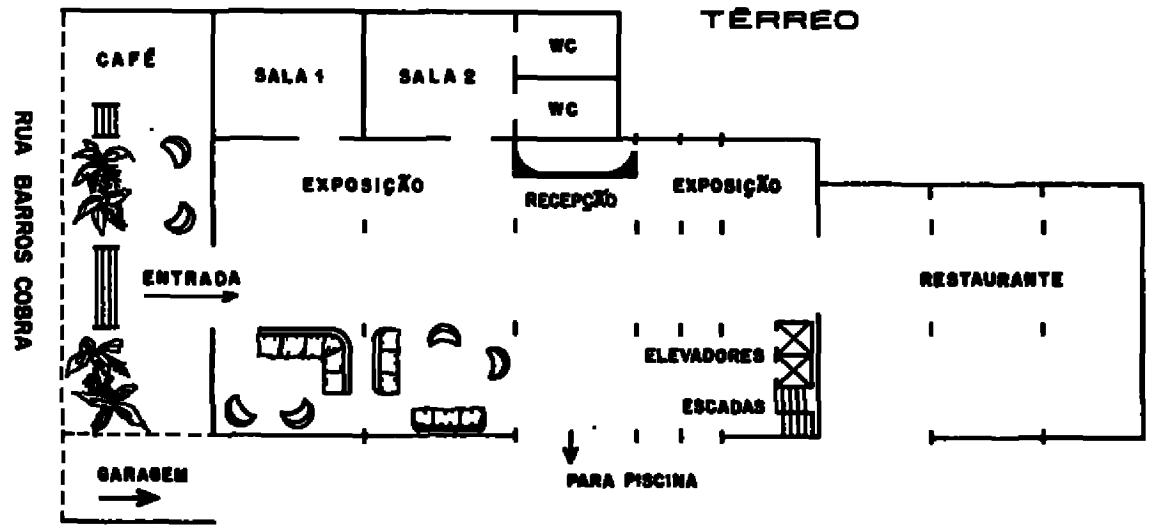
A possível aplicação dos métodos utilizados em estudos da matéria condensada em outras áreas encoraja, continuamente, pesquisadores a trabalhar em temas multidisciplinares. A multidisciplinaridade, em ciência, é um fenômeno dos últimos anos. O forte intercâmbio gerado por esta prática faz com que haja uma integração maior de áreas de conhecimento afins e acaba por dar uma visão mais abrangente dos problemas tratados.

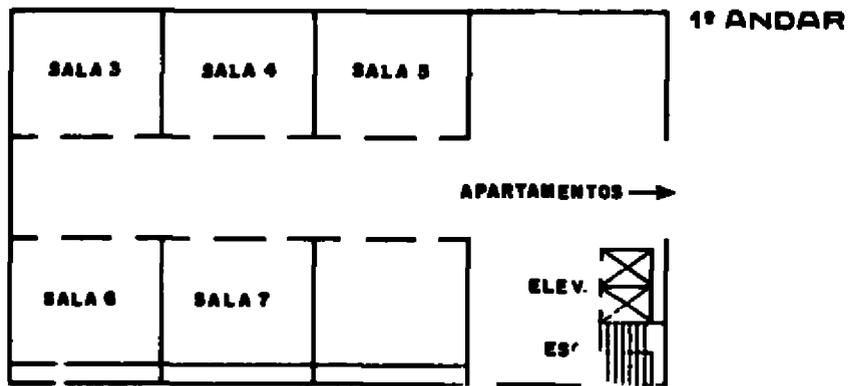
O IX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada está organizado de forma a permitir o intercâmbio de idéias dentro de um clima informal. É claro que, dada as suas dimensões, o IX ENFMC apresenta uma agenda cheia. Uma das preocupações da Comissão Organizadora foi a de permitir que um participante, entre os cerca de seiscentos inscritos, possa encontrar um local apropriado para discutir, aprofundar ou trocar idéias. A participação de pesquisadores em níveis diferentes de maturidade científica, a nosso ver, permitirá um intercâmbio desejável dos diversos assuntos discutidos.

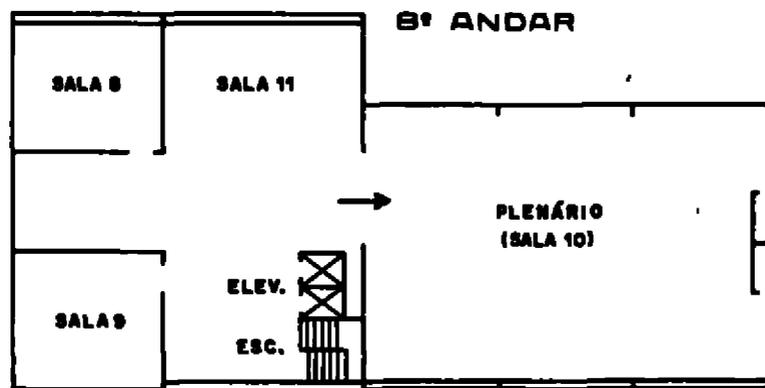
A Comissão Organizadora espera que o IX ENFMC dê continuidade à proposta fundamental dos Encontros anteriores, onde a discussão nos grupos de trabalho ocorreram informalmente e se puderam ser formuladas abordagens novas para questões antigas, que foram desenvolvidas posteriormente.

Comissão Organizadora

II - MAPAS DAS DEPENDENCIAS INTERIORES DO HOTEL







III - QUADRO DE PARTICIPANTES POR GRUPO DE TRABALHO

GRUPO	1 BIOFÍSICA	2 DEFEITOS	3 FÍS. ATOM. MOLECULAR	4 FÍS. ESTATÍSTICA	5 INSTRU- MENTAÇÃO	6 MATERIAIS AMORFOS	7 METAS E LIGAS	8 ÓTICA	9 CIÊNCIA DOS MATERIAIS	10 RESONÂNCIA	11 SEMICON- DUTORES	12 MAGNETISMO	13 CRISTAIS LÍQUIDOS	14 Cristalo- grafia	TOTAL
COORDENADOR	PAULO BIRCH (ICBPF)	ALFREDO OLIVEIRA (UFMG)	SYLVIO CARUTO (UFPE)	MARIO JOSÉ DE OLIVEIRA (UFUSP)	YAN SLAETS (IFQSC)	MARIO BAISCH (UFRRJ)	JOSÉ OLIVEIRA E CASTRO (UFF)	MICHEL AESERTER (IFQSC)	JOSÉ MANOEL MARTINS (UFURJ)	ALBERTO PASSOS GOMARAZ (ICBPF)	NELSON STUDART (UFPE)	CARLOS DECERRA (UFUSP)	ANTONIO FEREIREDO (UFUSP)	LIA AMARAL (UFURJ)	
Nº ESTIMATIVO DE INSCRITOS	33	40	47	76	26	22	52	88	20	38	88	24	13	25	592
Nº DE RESUMOS	16	25	23	48	21	15	25	68	13	23	56	22	14	21	390
DOCTORES	16	16	21	42	8	9	25	40	9	17	39	16	10	13	281
DOCTORANDOS	15	14	14	27	11	8	18	32	10	15	36	3	4	7	214
MESTRANDOS	2	10	11	7	7	5	9	16	1	6	12	4	-	5	95
OUTROS			1								1				2

**IV - SIGLAS DOS GRUPOS DE TRABALHO**

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

**V PROGRAMAÇÃO DAS ATIVIDADES  
DO IX ENFMC**

## V.1 - HORÁRIO

QUINTA - FEIRA (24/04/86)

		TRABALHOS DOS GRUPOS: ATO, EST, INS, SEM	8:00
8:30	TRABALHOS DOS GRUPOS: DEF, OTI, MAT, RES, MAG, CRI		
		CAFÉ	10:00
10:30	CAFÉ	TRABALHOS DOS GRUPOS: ATO, EST, INS, SEM	10:15
10:45	TRABALHOS DOS GRUPOS: MET, DEF, OTI, MAT, RES, MAG, CRIS		
		ALMOÇO	12:15
12:45	ALMOÇO		

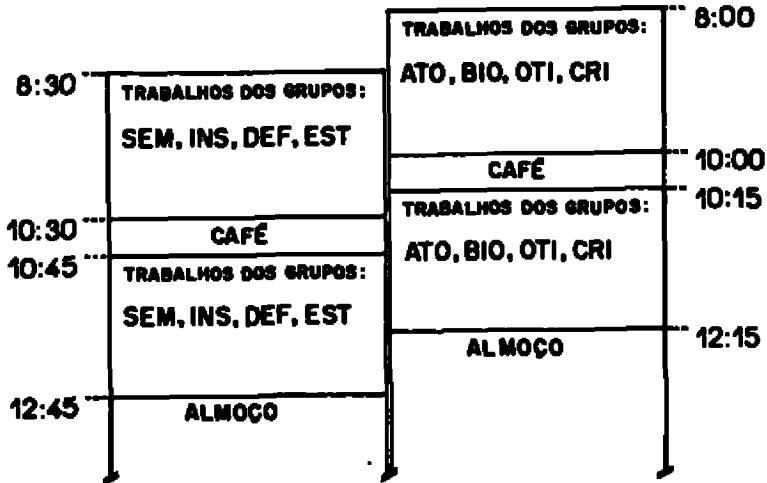
14:30	PALESTRAS CONVIDADAS	PALESTRAS CONVIDADAS
15:45	CAFÉ	CAFÉ
16:00	PALESTRAS CONVIDADAS	PALESTRAS CONVIDADAS
17:15	INTERVALO	INTERVALO
17:30	TRABALHOS DOS GRUPOS	TRABALHOS DOS GRUPOS
18:15	JANTAR	
20:30	CONFERÊNCIA Prof. ROSEÍRIO C. CERQUEIRA LEITE "HISTÓRIA DA FÍSICA DE SEMICONDUTORES NO BRASIL"	

## SEXTA-FEIRA (25/04/86)

		TRABALHOS DOS GRUPOS: BIO, AMO, OTI, CRI, LIQ	8:00
8:30	TRABALHOS DOS GRUPOS: EST, MET, SEM		
		CAFÉ	10:00
10:30	CAFÉ	TRABALHOS DOS GRUPOS: BIO, AMO, OTI, CRI, LIQ	10:15
10:45	TRABALHOS DOS GRUPOS: EST, MET, SEM		
		ALMOÇO	12:15
12:45	ALMOÇO		

14:30	PALESTRAS CONVIDADAS	PALESTRAS CONVIDADAS
15:45	CAFÉ	CAFÉ
16:00	PALESTRAS CONVIDADAS	PALESTRAS CONVIDADAS
17:15	INTERVALO	INTERVALO
17:30	TRABALHOS DOS GRUPOS	TRABALHOS DOS GRUPOS
18:15	JANTAR	
20:30	ASSEMBLÉIA RELATÓRIO DOS GRUPOS	

## SÁBADO (26/04/86)



**IMPORTANTE:-** Devido ao grande número de participantes do IX ENFMC é importante que cada Grupo de Trabalho (e cada participante) respeite o horário de almoço estabelecido no programa. Caso contrário, a cozinha do hotel não está pronta para prestar um serviço adequado e o atraso gerado acarretará um comprometimento da programação da tarde.

## V.2 - DISTRIBUIÇÃO DE SALAS ENTRE OS GRUPOS DE TRABALHO

Sala	5ª Feira	6ª Feira	Sábado
01	Magnetismo	-	-
02	Defeitos	-	-
03	Fis.Estatística	Fis.Estatística	Fis.Estatística
04	Metais e Ligas	Metais e Ligas	Cristalografia
05	Semicondutores	Semicondutores	Semicondutores
06	Fis.Atom.Molecular	Biofísica	Fis.Atom.Molecular
07	Ressonância	Cristais Líquidos	Defeitos
08	Cristalografia	-	Biofísica
09	C.dos Materiais	Mat.Amorfos	Instrumentação
10	Ótica	Ótica	Ótica
11	Instrumentação	-	-

### V.3 - CONFERÊNCIA E PALESTRAS CONVIDADAS

#### CONFERÊNCIA GERAL

1. "História da Física dos Semicondutores no Brasil"  
Prof. Rogério Cesar de Cerqueira Leite (CPFL)  
5ª feira, 24 de abril, às 20:30 horas - Sala 10

#### PALESTRAS CONVIDADAS

1. "Micelas e Vesículas como Modelos de Membranas Biológicas"  
Prof. Herman Chaimovich (IQUSP)  
5ª feira, 24 de abril, às 14:30 horas - Sala 3
2. "Sistemas de Férmions Pesados"  
Prof. Luiz Nunes de Oliveira (IFQSC São Carlos)  
5ª feira, 24 de abril, às 14:30 horas - Sala 4
3. "Bi-estabilidade Ótica em Laser"  
Prof. José Roberto Rios Leite (UFPE)  
5ª feira, 24 de abril, às 14:30 horas - Sala 5
4. "Reentrant Spin Glasses - Systems with Competing Magnetic Interactions"  
Prof. E.F. Wassermann (Univ. Duisburg - RFA)  
5ª feira, 24 de abril, às 14:30 horas - Sala 6
5. "A Física dos Cristais Líquidos no Brasil: História e Perspectivas"  
Prof. John Dale Gault (UFSC)  
5ª feira, 24 de abril, às 14:30 horas - Sala 7
6. "Gás de Elétrons em Super-Redes Semicondutoras"  
Prof. Alair Silvério Chaves (UFMG, USP)  
5ª feira, 24 de abril, às 14:30 horas - Sala 10
7. "Opções de Trabalho para o Físico na Microeletrônica"  
Prof. Frederico Dias Nunes (Elebra S/A)  
5ª feira, 24 de abril, às 16:00 horas - Sala 3
8. "Transferência de Elétrons em Sistemas Moleculares"  
Prof. Alfredo Arnóbio S. da Gama (UFPE)  
5ª feira, 24 de abril, às 16:00 horas - Sala 4
9. "Comportamento Mecânico de Materiais Metálicos em Temperaturas Elevadas"  
Prof. Paulo Iris Ferreira (IPEN)  
5ª feira, 24 de abril, às 16:00 horas - Sala 5
10. "Magnetização e Magneto Resistência em Semicondutores - Semimagnéticos: Transição Metal-Isolante"  
Prof. Ney Fernandes de Oliveira Jr. (IFUSP)  
5ª feira, 24 de abril, às 16:00 horas - Sala 6

11. "Solução do Problema da Fase: Idéias Originais de Karle e Hauptman e Desenvolvidos Posteriores"  
Prof. Eduardo Ernesto Castellano (IFQSCo Carlos)  
5ª feira, 24 de abril, às 16:00 horas - Sala 7
12. "Vidros de Spin Amorfo"  
Prof. Nuccio Continentino (UFF)  
5ª feira, 24 de abril, 16:00 horas - Sala 10
13. "Uso de Técnicas de Espalhamento da Luz para o Estudo da Dinâmica de Interface de Cristais em Crescimento"  
Prof. Oscar Nassif de Mesquita (UFMG)  
6ª feira, 25 de abril, às 14:30 horas - Sala 1
14. "Magneto-Cardiografia: Um Projeto Interdisciplinar"  
Prof. Paulo Costa Ribeiro (PUC/RJ)  
6ª feira, 25 de abril, às 14:30 horas - Sala 3
15. "Caos em Unionas Josephson"  
Prof. Miguel Octávio (IVIC - Venezuela)  
6ª feira, 25 de abril, às 14:30 horas - Sala 4
16. "Localização Eletrônica em Sistemas Desordenados por Implantação Iônica"  
Prof. Lívio Amaral (UFRGS)  
6ª feira, 25 de abril, às 14:30 horas - Sala 5
17. "Fractais: Estudo por SAXS"  
Prof. Aldo Craievich (CBPF)  
6ª feira, 25 de abril, às 14:30 horas - Sala 10
18. "Buried Silicon Oxide Technology"  
Prof. Peter Hemment (Univ.Surrey - Inglaterra)  
6ª feira, 25 de abril, às 14:30 horas - Sala 10
19. "Modelos de Interface e Simulações em Computador"  
Prof. Bernard J.Mokross (IFQSCo Carlos)  
6ª feira, 25 de abril, às 16:00 horas - Sala 3
20. "Dinâmica de Sistemas Magnéticos Unidimensionais"  
Prof. Antonio Sérgio Teixeira Piras (UFMG)  
6ª feira, 25 de abril, às 16:00 horas - Sala 4
21. "Aplicações Tecnológicas do Magnetismo"  
Prof. Sérgio M.Rezende (UFPE)  
6ª feira, 25 de abril, às 16:00 horas - Sala 5
22. "Cristais Líquidos Colestéricos"  
Prof. José Atilio Vanin (IQUSP)  
6ª feira, 25 de abril, às 16:00 horas - Sala 6
23. "Espectroscopia de Fonons Acústicos"  
Prof. Hailor C.Basso (IFQSCo Carlos)  
6ª feira, 25 de abril, às 16:00 horas - Sala 10

**VI RESUMOS  
DOS  
TRABALHOS**

## **VI.1 - MATERIAIS AMORFOS**

**Coord.:- Prof. Mário N.Balbach (UFRGS)**

AMO - 01 ESTUDO DA INFLUÊNCIA DE ORDENAMENTO QUÍMICO SOBRE A DENSIDADE DE ESTADOS EM Co-ZrNi. Jaime Duarte Jr. e Sonia Prota-Pessoa (Instituto de Física da USP)

Nosso interesse é calcular densidade de estados em ligas amorfas envolvendo metais de transição. Para isso, utilizamos o método de recorrência aliado a uma hamiltoniana LCAO parametrizada. Cálculos recentes para ZrFe e resultados anteriormente obtidos para ZrCu e ZrNi apresentaram boa concordância com os resultados experimentais, excetuando-se os cálculos da densidade de estados no nível de Fermi para a liga de ZrNi na composição rica em Ni que apresentaram um valor acima do resultado experimental. Artigos experimentais sugeriram um possível ordenamento químico para algumas ligas de Zr. Partindo de sugestões de formas de ordenamento encontradas na literatura, construímos "clusters" ordenados de ZrNi e calculamos a densidade de estados nesses "clusters" a fim de verificarmos se a ordem química pode ser responsável pela discrepância encontrada na densidade de estados no nível de Fermi para o ZrNi. (PAFESP, FINEP, CNPq)

AMO - 02

Condutividade em sistemas desordenados

A.Latgé e E.Anda - Universidade Federal Fluminense

Neste trabalho estudamos a condutividade elétrica de sistemas desordenados utilizando técnicas de renormalização no espaço real que são apropriadas para o tratamento de redes hierárquicas. O objetivo é a determinação das bordas de mobilidade em função do grau de desordem e da lei de potência da condutividade quando o nível de Fermi aproxima-se da borda de mobilidade. Será estudada também a forma como a condutividade se escala com as dimensões da rede. O cálculo está sendo feito para o caso de uma cadeia linear desordenada, com a ideia de estendê-lo para uma rede de Bethe.

AMO - 03

AFTEREFFECTS DA PERMEABILIDADE MAGNÉTICA EM LIGAS AMORFAS RICAS EM Co DE MAGNETOSTRIÇÃO PRÓXIMA A ZERO. Absair Todorov de Rezende e Reiko Sato Turtelli. Departamento de Física do Estado Sólido e Ciência dos Materiais, Instituto de Física da UNICAMP.

Recentemente foi verificado que mesmo em ligas ferromagnéticas amorfas de magnetostrição aproximadamente igual a zero pode ser observado o fenômeno de aftereffect magnético. Foram medidas aftereffect da permeabilidade magnética em várias amostras de ligas amorfas ricas em Co com magnetostrição  $\lambda_s$  variando de  $-3,9 \times 10^{-6}$  e  $\lambda_s \leq 1,0 \times 10^{-6}$ , a temperatura ambiente, usando técnica impulsiva. A magnetostrição foi medida usando técnicas de rotação por pequenos ângulos. Os resultados mostram que existe uma estrita ligação entre aftereffect magnético e a desordem estrutural.

AMO - 04

AFTEREFFECT DA PERMEABILIDADE MAGNÉTICA DAS LIGAS METÁLICAS AMORFAS RICAS EM FERRO. Abmair Teodoro de Resende e Reiko Sato Turtelli - UNICAMP.

A origem do aftereffect segundo o modelo de Allia e Vinal está na interação magnética restritiva dos defeitos estruturais com a direção da magnetização. Os cálculos indicam uma dependência quadrática (2) do aftereffect ( $\Delta\mu/\mu$ ) com a magnetostricção de saturação ( $\lambda_s$ ). Medidas experimentais confirmam essa dependência para as ligas ricas em ferro à temperatura ambiente. Obtivemos em medidas recentes que essa dependência tem uma potência maior do que 2 na temperatura do Nitrogênio líquido para essas mesmas ligas.

AMO - 05

ANISOTROPIA E MAGNETOSTRICÇÃO NA LIGA AMORFA  $\text{Co}_{75}\text{Si}_{15}\text{B}_{10}$ . Antonio Domingues dos Santos, Aginaldo Medici Severino e Frank P. Missell (Instituto de Física da Universidade de São Paulo).

Apresentaremos um modelo para fitas amorfas ferromagnéticas de ligas com magnetostricção negativa, o qual relaciona a estrutura de domínios às propriedades magnéticas da liga. A partir dos dados experimentais da energia de anisotropia efetiva  $K_{\text{eff}}$ , susceptibilidade inicial  $\chi_i$ , campo coercivo  $H_c$  e remanência reduzida  $m_r$  em função da tensão mecânica aplicada, determinamos os valores dos parâmetros do modelo, que são: constante de magnetostricção de saturação  $\lambda_s$ , tensão compressiva residual média  $\bar{\sigma}_c$ , energia de anisotropia independente da tensão  $K_0$  e a remanência reduzida a altas tensões aplicadas  $m_r(\infty)$ .

Foram produzidas em nosso "Melt-Spinner" fitas amorfas de composição  $\text{Co}_{75}\text{Si}_{15}\text{B}_{10}$ . Através de um forno acoplável ao Magnetômetro de Amostra Vibrante determinamos os valores da magnetização de saturação  $M_s$  e da temperatura de Curie  $T_c$ .

Determinamos os valores dos parâmetros do modelo, para o mesmo ponto de uma fita desta liga, antes e depois dela ter sido submetida a um tratamento térmico de relaxação das tensões internas. Esses resultados serão discutidos em detalhes.

Este modelo foi apresentado por Vázquez, Fernengel e Kronmüller, que o aplicaram à liga  $\text{Co}_{58}\text{Fe}_{23}\text{Ni}_{10}\text{Si}_{11}\text{B}_{16}$ . Uma vez que nossa liga possui  $\lambda_s$  - 20 vezes maior que o valor daquela liga, houve a necessidade de acrescentarmos alguns termos às expressões teóricas do modelo. (CNPq, FAPESP, FINEP)

AMO - 06

LIGAS AMORFAS MAGNÉTICAS COM BAIXA MAGNETOSTRICÇÃO - COMPORTAMENTO SOB TENSÃO E TRATAMENTO TÉRMICO. Aginaldo M. Severino, Antonio D. Santos e Frank P. Missell, Instituto de Física - USP.

Usando um modelo desenvolvido por Kronmüller et al, relacionamos os parâmetros magnéticos macroscópicos: magnetostricção de saturação  $\lambda_s$ , energia de anisotropia independente da tensão  $K_0$ , tensão compressiva média  $\bar{\sigma}_c$  e remanência reduzida da para altas tensões  $m_r(\infty)$ , as tensões internas e estruturas de domínio de uma amostra.

Foram fabricadas amostras das ligas  $\text{Co}_{75-x}\text{Fe}_x\text{Si}_{15}\text{B}_{10}$  ( $x=2,4,6$ ) e  $\text{Co}_{75}\text{Si}_{10}\text{B}_{20}$ . Através do resfriamento rápido que se obtém num "Melt-Spinner", conseguimos fitas destas amostras na fase amorfa. Seguindo o modelo, medidas da susceptibilidade inicial  $\chi_i^1$ , do campo coercivo  $H_c$ , da remanência reduzida  $m_r$  e da energia de anisotropia efetiva  $K_{\text{eff}}$ , são feitas em função de tensões mecânicas aplicadas na direção do eixo da fita.

Uma maneira de verificar a auto-consistência deste modelo é comparar o valor da energia de anisotropia efetiva na ausência de tensões aplicadas  $K_{\text{eff}}(0)$ , com o valor desta energia derivado dos parâmetros calculados  $K_{\text{cal}}$ . Os resultados obtidos para  $K_{\text{eff}}(0)$  e  $K_{\text{cal}}$  das amostras estudadas, indicam que esta metodologia é significativa.

Tratamentos térmicos para relaxar as tensões internas (acima da temperatura de Curie), foram feitos sucessivamente numa mesma amostra e os resultados obtidos apresentam boa concordância com o modelo.

Resultados para magnetostricção  $\lambda_s$ , obtidos através de outro método (desenvolvido por Narita et al), serão apresentados. (FAPESP, CNPq, FINEP).

AMD - 07

**ANÁLISE MICROESTRUTURAL DE LIGAS AMORFAS E CRISTALINAS SOLIDIFICADAS RAPIDAMENTE.** Waldemar Alfredo Monteiro, Departamento de Metalurgia Nuclear - IPEN-CHEN/SP; George Bazer ra, Instituto de Física da USP.

Análises de raios-X tem mostrado que ligas metálicas solidificadas rapidamente apresentam uma aparente falta de cristalinidade, o que às vezes é real. Este mesmo material, quando observado por meio de microscopia eletrônica de transmissão, apresenta uma microcristalinidade que nem sempre a análise cristalográfica por raios-X consegue detectar.

O intuito deste trabalho é apresentar uma técnica de metalografia eletrônica que possa contribuir para uma melhor definição e entendimento da cristalinidade ou não das ligas solidificadas rapidamente. Além disso, o estudo microestrutural e a análise de difração eletrônica complementam os estudos de cristalização de ligas amorfas, objetivando o desenvolvimento destas ligas para utilização prática (melhor controle do tamanho do grão, minimização de segregações com correspondente aumento da solubilidade sólida da liga).

AMD - 08

**PRODUÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE LIGAS AMORFAS  $\text{Sn}_{1-x}\text{Mn}_x$ ,  $0.10 \leq x \leq 0.90$ . (\*)**

Ligas amorfas de  $\text{Sn}_{1-x}\text{Mn}_x$  para x de 0.10 a 0.90 são produzidas pela primeira vez, por condensação simultânea do vapor dos dois elementos sobre um substrato (safira, quartzo ou kapton), mantido à temperatura do hélio líquido. O controle da composição da liga formada, é feita durante toda a deposição por cristais osciladores de quartzo. O vácuo durante a condensação é melhor do que  $4 \times 10^{-8}$  mbar. A espessura dos filmes formados varia de  $3000 \text{ \AA}$  a  $10.000 \text{ \AA}$  e depende da concentração de Sn. As ligas são estudadas "in situ" pela técnica de Efeito Mössbauer  $^{119}\text{Sn}$ (EM), resistividade elétrica (RE) e a posteriori por Difração de Raios-X (DRX). Cuidados especiais são tomados para garantir a homogeneidade microscópica das ligas, sendo necessário trabalhar com taxas de condensação de 1 a  $2 \text{ \AA}^0/\text{s}$ . A caracterização do estado amorfo é feita por diversos parâmetros: a) variações marcadas e irreversíveis da RE com a temperatura; b) evolução da RE e das formas de linha EM com o tempo; c) linhas ME extremamente alargadas e seu estreitamento por efeito de recozimento; d) o desdobramento quadrupolar virtualmente desaparece na fase magnética; e) a cristalização das amostras é acompanhada por RE, EM e DRX. As amostras para  $x \leq 0.30$  cristalizam abaixo de  $300^\circ\text{K}$  com a formação de  $\beta$ -Sn e  $\alpha$ -Mn. Ao aumentarmos a concentração de Mn, elas vão se tornando mais estáveis cristalizando-se lentamente a temperatura ambiente, podendo levar alguns dias ( $x \sim 0.40$ ) até 1 ano ( $x \sim 0.80$ ) para ocorrer a cristalização de mais de 50% do material. Na fase concentrada em Mn o processo de cristalização passa por um composto intermediário cujos parâmetros de EM e DRX não coincidem com nenhum dos três intermetálicos conhecidos.

(\*) VALDERES DRAGO-Dep. Fís.-Univ. Sta Catarina - ELISA B. SAITOVITCH - CBPF

AMD - 09

**ESTUDO MÖSSBAUER DE LIGAS AMORFAS  $\text{Sn}_{1-x}\text{Mn}_x$  I: FASE PARAMAGNÉTICA. (\*)**

Ligas amorfas de Sn com Mn são obtidas por condensação do vapor sobre um substrato frio (ver nossa comunicação neste encontro) e estudadas "in situ" por Espectroscópio Mössbauer (EM)  $^{119}\text{Sn}$  na faixa de concentração de 10% a 90% atômico Mn. Na fase paramagnética (acima de  $700^\circ\text{K}$ ) os espectros ME apresentam-se na forma de um dublete alargado e assimétrico que não varia com a orientação ou temperatura, mantendo a relação de áreas próxima de um. Eles são ajustados expandindo-se a distribuição de desdobramentos quadrupolares em uma série de FOURIER com coeficientes a ajustar e admitindo uma correlação linear entre o desdobramento quadrupolar ( $\Delta E_Q$ ) e o deslocamento isomérico ( $\delta$ )  $\delta = a (\Delta E_Q - \Delta E_{Q_{\text{min}}}) + b$ . Acreditamos que esta correlação, e portanto a assimetria do dublete, que também aparece em alguns sistemas desordenados, só se evidencia quando juntamente com a desordem estrutural, exista um certo grau de covalência entre os átomos da liga. Em 60% atômico Mn ocorre uma nítida inversão na assimetria do dublete o que nos indica que deva estar ocorrendo significativas mudanças a nível de primeiros vizinhos. Discute-se com base nas larguras das distribuições  $P(\Delta E_Q)$ , a conformidade dos dados com os modelos Estéreo Químico ou de Empacotamento Denso e Aleatório.

(\*) VALDERES DRAGO- Dep. Fís. - Univ. Sta Catarina - Elisa B. Saitovitch - CBPF

AMO - 10

ESTUDO MÖSSBAUER DE LIGAS AMORFAS  $Sn_{1-x}Mn_x$ -II: FASE MAGNÉTICA. (\*)

Ligas amorfas de  $Sn_{1-x}Mn_x$  para  $0.10 \leq x \leq 0.90$  são produzidas e estudadas "in situ" por Espectroscopia Mössbauer ( $^{57}Fe$ )  $^{119}Sn$  e os resultados das fases magnéticas, abaixo de  $700K$ , são aqui apresentados. Recentes medidas de susceptibilidade a.c. "in situ" na fase amorfa (Henger L. and Korn D.; J.Mag.Mat. 45 (1984),182) mostraram que para  $x = 0.08$  o sistema se ordena como vidro de spin, com temperatura de vidro de  $10^3K$ . Os mesmos autores afirmam que esta fase permanece até pelo menos  $x=0.36$ . Os nossos espectros ME mostram para  $x=0.10$  uma linha única um pouco alargada. Aumentando-se a concentração de Mn, começam a surgir "ombros" que se estendem a medida que x cresce, até que em  $x=0.30$  ocorre o desdobramento em um duplete magnético simétrico e muito alargado cuja separação aumenta com a concentração de Mn. Os espectros são ajustados pelo método de Window e também pelo de Histograma obtendo-se as distribuições de campo hiperfino transferido e dos seus desvios padrão. As medidas em função crescente da temperatura mostram que a distribuição de campos hiperfinos vai diminuindo gradativamente, processo que ocorre em largo intervalo de temperatura, sem a separação de uma fase paramagnética, o que nos indica que o descongelamento dos spins deve se dar coletivamente. Determina-se a temperatura de ordem Mössbauer pelo método de varredura térmica em velocidade constante. As curvas  $H_c(T) \times T$  mostram-se muito "achatadas" como consequência da distribuição da interação de troca introduzida pela desordem. A aplicação de campo magnéticos externos nos mostra que para  $x < 0.30$  há uma resposta apenas parcial ao campo externo (descarta-se efeitos de desmagnetização), sendo que para  $x > 0.40$  se forma uma fase completamente "dura" para campos de até  $41 K0$ . (considere-se que o Sn é bem mais sensível a campo magnético do que o Fe). Considerando conjuntamente o seu comportamento térmico, vamos atribuir a esta fase "dura" um ordenamento spinomagnético. É proposto o seguinte regime de ordenamento magnético em função de concentração de Mn: vidro de spin "cluster glass" spinomagnético. (\*) VALDERES DRAGO-Dep.Fís.-Univ.Fed.Sta Catarina - ELISA B.SAITOVITCH-CBPF

AMO - 11

ESTABILIDADE TÉRMICA DE LIGAS AMORFAS DO TIPO  $(Fe_{1-x}Ni_x)_{80}B_{20}$ 

M.A.Z. Vasconcellos, R.P. Livi e M.N. Baibich - Instituto de Física - UFRGS

Foi medida a resistividade elétrica em função da temperatura para as amostras amorfas do tipo  $(Fe_{1-x}Ni_x)_{80}B_{20}$ . Destas medidas determinamos a temperatura de cristalização ( $T_c$ ) para cada uma das taxas de aquecimento ( $\phi$ ) utilizadas. A partir do conhecimento de  $\phi$  e  $T_c$  e usando o método de Kissinger determinamos a energia de ativação para o processo de cristalização.

A estabilidade térmica contra a cristalização foi elevada com base no comportamento composicional da temperatura de cristalização e da energia de ativação. Discute-se ainda a possibilidade de uma contribuição eletrônica para esta estabilidade.

AMO - 12

ESTUDO DA CRISTALIZAÇÃO EM LIGAS AMORFAS DO TIPO  $(Fe_{1-x}Ni_x)_{80}B_{20}$ 

M.A.Z. Vasconcellos, R.P. Livi e M.N. Baibich - Instituto de Física - UFRGS

A cinética da cristalização de fitas metálicas amorfas do tipo  $(Fe_{1-x}Ni_x)_{80}B_{20}$ , obtidas neste laboratório foi estudada observando o comportamento da resistência elétrica em função do tempo (medidas isotérmicas) e da temperatura (medidas isocronicas).

Os parâmetros cinéticos obtidos em cada um dos métodos são comparados e a partir da suposição de transferibilidade dos parâmetros cinéticos, estabelecemos o método mais adequado ao estudo da transição de fase amorfo-cristal por métodos não isotérmicos.

AMD - 13

**INFLUÊNCIA DA ATMOSFERA DE TRATAMENTO SOBRE A CRISTALIZAÇÃO DO VIDRO METÁLICO METGLAS 2826.** Ronaldo S. de Biasi e Antonio A.R. Fernandes (Seção de Engenharia e Ciência dos Materiais, Instituto Militar de Engenharia).

Amostras do vidro metálico Metglas 2826 foram tratadas por diferentes tempos e em diferentes temperaturas em atmosfera de argônio, nitrogênio e oxigênio. As larguras de linha de ressonância magnética nessas amostras foram comparadas com as medidas em amostras preparadas em atmosfera ambiente. Os resultados sugerem que a influência da atmosfera de tratamento sobre a cinética de cristalização é muito pequena.

AMD - 14

**APROXIMAÇÕES NUMÉRICAS EM NUCLEAÇÃO ADIABÁTICA**

Máximo F. da Silveira e Erich Meyer - Instituto de Física da Universidade Federal do Rio de Janeiro.

O modelo de nucleação adiabática proposto por Meyer (1), baseado na extensão do diagrama de Mollier (entalpia-entropia) e na flutuação estatística da temperatura, prevê, em bom acordo com os dados experimentais, as temperaturas de super-resfriamento máximo. Estes resultados foram obtidos a partir de uma simplificação no cálculo do calor específico das fases líquida e sólida, que é considerado constante e igual ao valor médio na temperatura de fusão.

Neste trabalho introduzimos a dependência com a temperatura do calor específico para ambas as fases, através de duas aproximações numéricas baseadas nos valores tabelados de calor específico dos mesmos materiais. Os resultados obtidos mostram uma discrepância média de 5% em relação aos valores experimentais, que é da mesma ordem da aproximação que considerava o calor específico constante. Isto vem demonstrar que esta aproximação é bastante realista. (CNPq, FINEP e CEPG).

(1) E. Meyer, J. Crystal Growth (1986, in press)

**VI.2 - FÍSICA ATÔMICA E MOLECULAR**  
**Coord.:- Prof. Sylvio Canuto (UFPE)**

ATO - 01

## ESPECTRO DA MOLÉCULA DE HIDROGÊNIO

Márcia Fontenele e Jason A.C. Gallas  
(Departamento de Física da UFSC - Florianópolis)

Apresentamos resultados de um cálculo à la James e Coolidge da energia dos estados eletrônicos mais baixos da molécula de hidrogênio. O presente trabalho tem como objetivos básicos:

- i) produzir software que permita investigar o espectro da molécula de hidrogênio com precisão comparável aos melhores cálculos existentes na literatura;
- ii) investigar em detalhes a importância da correlação na ligação molecular;
- iii) desenvolver modelo para o estudo do efeito Zeeman quadrático (diamagnetismo) em moléculas diatômicas.

Estas questões são de interesse no estudo do espectro de quasi-Landau resultante de recombinação [Gallas et al., Phys. Rev. Lett. 50, 324 (1983)], bem como na física de estados de Rydberg moleculares [Gallas et al., Advances in Atomic and Molecular Physics, vol. 20, 1985].

(Parcialmente financiado pelo CNPq)

ATO - 02

## DIAMAGNETISMO EM ÁTOMOS HIDROGENÓIDES

Paulo C. Rech (Departamento de Física da UFSC - Florianópolis),  
Márcia R. Gallas (Instituto de Física da UFRGS - Porto Alegre) e  
Jason A.C. Gallas (Departamento de Física da UFSC - Florianópolis).

Como é sabido, o cálculo do efeito Zeeman em átomos de hidrogênio com inclusão do termo quadrático no campo magnético é um problema extremamente difícil e ainda não resolvido (é o "último" problema da física atômica). Seu estudo é importante devido a aplicações em física atômica, do estado sólido e astrofísica. Utilizando uma base proposta recentemente [J.A.C. Gallas, J. Phys. B 18, 2199 (1985)], apresentaremos uma expressão (contendo oito parâmetros variacionais) para a energia do estado fundamental, que produz os melhores resultados já obtidos para o efeito Zeeman quadrático. A expressão é válida para qualquer valor do campo magnético. A simplicidade do nosso cálculo será contrastada com cálculos recentes bastante sofisticados e que possuem raio de convergência limitado, como por exemplo, o resultado de Le Guillou e Zirm-Justin [Ann. Phys. 147, 57 (1983)] envolvendo teoria de perturbação de ordem 62.

(Parcialmente financiado pelo CNPq)

ATO - 03

SOBRE O MÉTODO DE PARTIÇÃO E O EFEITO STARK COMPLETO EM ÁTOMO DE HIDROGÊNIO - F. G. Logrado e J. D. M. Vianna - Departamento de Física - Universidade de Brasília - 70910 - Brasília - DF - Brasil: Usando-se o método de partição modificado obtêm-se um sistema de equações algébricas não lineares. Mostra-se que obter as soluções desse sistema equivale a resolver a equação de Schrödinger. Aplica-se esse método no estudo do efeito Stark completo em átomo de hidrogênio. Considera-se o estado fundamental e o parâmetro  $\lambda$  ( $H - H_0 = \lambda r \cos \theta$ ) variando no intervalo (0,05; 0,1). Os resultados obtidos estão ótimos quando comparados com os valores disponíveis na literatura.

ATO - 04

## APLICAÇÃO DO MÉTODO DA COORDENADA GERADORA DUPLAMENTE DISCRETIZA-

DO AO PROBLEMA DE UM ÁTOMO DE HIDROGÊNIO EM CAMPO DE LASER SUPERINTENSO: José R. Mohallem (Departamento de Física, ICEx, UFMG) e Milan Trsic (Departamento de Química e Física Molecular, IFQSC, USP)

Estudamos um caso de aplicação do Método da Coordenada Geradora no qual os kernels não admitem solução analítica. Então, além da discretização usual no espaço dos rótulos, calculamos também tais integrais numericamente. O problema do átomo de Hidrogênio num campo superintenso de laser se mostra conveniente para os testes iniciais, ao se usar o modelo de Lima e Miranda <sup>(1)</sup>. Os primeiros resultados, usando um orbital Gaussiano como função geradora e uma técnica de integração por nós proposta para o espaço dos rótulos <sup>(2)</sup>, mostram que o método permite estudar o comportamento de um grande número de estados de mesma simetria que a função geradora, no caso, simetria esférica.

(1) C. A. S. Lima e L. C. M. Miranda, Phis. Rev. A23, 3335 (1981)

(2) J. R. Mohallem, submetido a Z. Phis. A

ATO - 05

## ESTUDO DA CORRELAÇÃO EM ÁTOMOS DE HÉLIO

Mércia R. Gallas (Instituto de Física da UFRGS - Porto Alegre),  
Leis F. Fava (Departamento de Física da UFSC - Florianópolis) e  
Jason A.C. Gallas (Departamento de Física da UFSC - Florianópolis).

Utilizando uma função de onda de Hylleraas, apresentamos resultados de uma investigação detalhada do efeito de termos de correlação no espectro do hélio. Esta investigação tem como finalidade descobrir-se uma base conveniente para o estudo do efeito Zeeman quadrático em hélio. Este estudo é importante para o conhecimento das propriedades de sistemas de partículas idênticas em presença de campos fortes. Em particular, estamos interessados em determinar exatamente para que valores do campo magnético ocorre inversão de simetria no estado fundamental de sistemas com vários elétrons. Esta questão é extremamente importante pois determina o aparecimento de um novo tipo de ligação química (i.e., uma nova química) em campos magnéticos intensos.

(Parcialmente financiado pelo CNPq)

ATO - 06

"RELAXAÇÃO E LARGURA DE LINHA VIBRACIONAL DECORRENTES DE IONIZAÇÃO MOLECULAR EM CAMADAS PROFUNDAS", Pedro S. Campos e Sylvio Canuto, Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco, 50.000 - Recife, PE.

O papel da relaxação eletrônica decorrente da ionização de elétrons em camadas profundas é analisado sistematicamente através de cálculos ab-initio em diatômicas leves. Um dos efeitos é uma considerável transferência de carga do ligante para o átomo ionizado com modificação do limite dissociativo da molécula e com consequências algumas vezes severas para a largura de linha vibracional. Estes estados decaem preferencialmente via processos Auger e discute-se então a possibilidade de fragmentação controlada.

(FINEP, CNPq)

ATO - 07

CÁLCULO DE ORBITAIS MOLECULARES DE COMPLEXOS DE COBALTO. Suely Reis Nogueira da Silva e Ney Vernon Vugman (IF-UFRJ) e Paulo Correa de Melo (IQ-PUC).

Cálculos de orbitais moleculares para as espécies paramagnéticas  $[\text{Co}^{2+}(\text{CN})_6]$ ,  $[\text{Co}^{2+}(\text{CN})_5]$ ,  $[\text{Co}^{2+}(\text{CN})_5\text{Cl}]$  e  $[\text{Co}^{2+}(\text{CN})_4\text{Cl}_2]$ , variando as distâncias metal-ligante e a geometria molecular, foram feitos dentro do formalismo LCAO - SCF - UHF ("Unrestricted Hartree - Fock") utilizando o método semiempírico INDO ("Intermediate Neglect of Differential Overlap").<sup>7</sup>

As espécies acima são complexos  $3d$  "low spin" com simetria  $D_{4h}$  ou  $C_{4v}$ , com um elétron não emparelhado ocupando um orbital antibonding  $d_{z^2}$  (com figuração fundamental  $^2A_1$ ), e têm sido obtidas por irradiação com raios-X ou elétrons de 2 Mev em complexos covalentes de metais de transição do tipo  $\text{Co}^{3+}(\text{CN})_6$  inserido em redes de halogenetos alcalinos.

As densidades eletrônicas não emparelhadas nos orbitais do metal e dos ligantes, obtidas a partir dos cálculos acima, são comparadas com os dados experimentais obtidos por Ressonância Paramagnética Eletrônica.

ATO - 08

INTENSIDADES DAS TRANSIÇÕES NO  $\text{YAlO}_3:\text{Pr}^{3+}$

E.A.Gouveia\*, G.F. de Sá e O.L.Malta \*UFAL

Universidade Federal de Pernambuco

Modelos teóricos para descreverem o potencial do campo cristalino (PCC) e os parâmetros de intensidade ( $\Omega_\lambda$ ), bem como a identificação dos níveis de energia são os principais requisitos para se fazer um tratamento sobre as intensidades das transições nos Ions Lantanídios em compostos. No caso de Ion  $\text{Pr}^{3+}$  os níveis na região 15.000-25.000  $\text{cm}^{-1}$  estão muito próximos e em consequência disso a incorreta atribuição dos níveis compromete os parâmetros de intensidade fenomenológicos.

A partir de espectros polarizados as temperaturas de 6,77 e 300K foram determinados 75 níveis de energia, as forças de oscilador das transições no visível e os  $\Omega_\lambda$  para o Ion  $\text{Pr}^{3+}$  em  $\text{YAlO}_3$ . Depois foram utilizados o tratamento padrão para cálculo de intensidades (teoria de Judd-Ofelt) e o modelo PCEM para o PCC. Também foram investigados dois outros modelos: um relativo ao cálculo de intensidades ("Denominador de Energia Média") e o outro a respeito do PCC e é baseado no "overlap" orbital entre os ligantes e o Ion Lantanídio. Esses dois novos modelos foram os que originaram resultados mais próximos dos obtidos experimentalmente.

ATO - 09

LONG-RANGE BEHAVIOUR OF EXTENDED KOOPMANS' THEOREM ORBITALS. Orville Wayne Day Junior, Instituto Tecnológico de Aeronáutica.

Theoretical treatments of physical processes involving interacting systems (such as intermolecular forces in a gas) need wavefunctions accurate at large distances.

Handy, Marron and Silverstone [Phys. Rev. 180, 45 (1969)] studied the long-range behavior of Hartree-Fock (HF) orbitals, showing that, with the exception of the case of an atomic configuration having only s-type orbitals, all HF orbitals have identical exponential decay at large distances determined by the smallest eigenvalue of the Hartree-Fock operator  $\phi_i^{\text{HF}} \sim \exp\{-2\epsilon_{\text{smallest}}^{1/2} r\}$ . This result, important for accurate numerical or analytic calculation of Hartree-Fock orbitals, is a consequence of the exchange interaction.

That analysis of Hartree-Fock orbitals was followed up by the study of the long-range behaviour of the Natural Spin Orbitals (NSOs), eigen functions of the one-particle density matrix, by Morrel, Parr and Levy [J. Chem. Phys. 62, 549 (1975)]. They demonstrated that all NSOs (and consequently, the electronic density) have long-range behaviour given by  $\phi_i \sim \exp\{-(-2\epsilon)^{1/2} r\}$ , where  $\epsilon$  is the smallest eigenvalue of the generalized Hartree-Fock potential [Day, Smith and Garrod, Int. J. Quant. Chem. Symp. 8, 301 (1974) and Morrel, Parr and Levy op. cit.].

We demonstrate here, the long-range behavior of the eigenfunctions (orbitals) of the Extended Koopmans' Theorem Fock operator [Matos and Day, Int. J. Quant. Chem. to be published (1986)] and of the electronic one-particle density matrix by expanding the same in terms of these orbitals, for nearly exact or exact wavefunctions.

ATO - 10

AS SEQUÊNCIAS DE  $O_h^*$  E SUAS REPRESENTAÇÕES IRREDUZÍVEIS ADAPTADAS EM SIMETRIA. S.R.A. Nogueira, A.O. Caride e S.I. Zanette - Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CNPq -

A solubilidade do grupo  $O_h$  é usada para derivar sua rede de subgrupos em função de 4 geradores  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\delta$ , e  $i$  tais que  $\alpha^3 = \beta^2 = \delta^2 = (\alpha\beta)^2 = (\beta\delta)^4 = (\alpha\delta)^3 = 1$  e  $i$  é o operador inversão. O conjunto das sequências de  $O_h$  é reduzido cortando-as em seus máximos grupos cíclicos ou no produto de grupos cíclicos pelo grupo da inversão. Outra drástica redução destas sequências é feita usando o grupo dos Automorfismos de  $O_h$ . A obtenção das sequências de  $O_h^*$  a partir das de  $O_h$  é direta usando o resultado derivado por A.O. Caride e S.I. Zanette ( J. "ol. "hys., 56 (1), 71 (1985) ). Mostra-se que são necessários somente seis conjuntos de matrizes para descrever as representações irreduzíveis orientadas segundo todas as sequências de  $O_h^*$ .

ATO - 11

O TEOREMA DE OPECHOWSKI E OS GRUPOS DERIVADOS . A.O.Caride e S.I. Zanette - Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CNPq -

Mostramos que a aplicação do Teorema de Opechowski para os grupos duplos de subgrupos próprios do grupo  $O(3)$  está diretamente relacionada às estruturas de seus correspondentes grupos derivados. Também são discutidas algumas características da estrutura de classes dos grupos duplos. Aplicam-se os resultados obtidos a subgrupos impróprios de  $O(3)$  que contenham ou não a inversão explicitamente. Finalmente, são dadas as regras de utilização do teorema para os grupos pontuais cristalograficos.

ATO - 12

FORMAÇÃO DE CAMADAS DE SOLVATAÇÃO EM TORNO DE IONS. EFEITO DA PRESENÇA DE ISÔMEROS DE CLUSTERS IÔNICOS. Carlos V. Speller (Departamento de Física-UFPE), Michael Root-Nar (NBS-Gaithersburg) e Carol A. Deakins (College of the Holy Cross, MA-USA).

Camadas de solvatação podem ser formadas pelo ataque sucessivo de moléculas solventes em torno de íons em fase gasosa. Experimentalmente, o fechamento de uma camada solvente pela  $s$ -ésima molécula é indicado por uma queda descontínua na energia de ligação de  $s+1$ -ésima molécula solvente, isto é, uma queda descontínua nas curvas da variação de entalpia de formação do íon vs. número  $n$  de moléculas solventes após  $n=s$ . É o caso dos "clusters"  $H_3O^+ \cdot nH_2O$  ( $s=3$ ) e  $NH_4^+ \cdot nNH_3$  ( $s=4$ ). Entretanto, no caso de  $NH_4^+ \cdot nHCN$ , p.ex., resultados experimentais sugerem que a formação da 2ª camada solvente pode iniciar-se antes da 1ª camada estar completa, ou que isômeros dos "clusters" estão presentes na mistura e que, por conseguinte, a ligação da 5ª molécula de HCN numa posição externa (2ª camada) não é muito mais fraca do que a da 4ª molécula diretamente com o íon. Qualquer que seja o caso, a conclusão mais plausível é que em algum estágio de solvatação, a energia de uma ligação  $NH_4^+ \dots NCH \dots NCH$  aproxima-se à de uma ligação  $NH_4^+ \dots NCH$ . Resultados ab initio concordam com a conclusão acima. Outrossim, uma análise feita mostra que a presença de isômeros pode induzir erros em medidas de natureza termoquímica.

(C.V.S. é parcialmente financiado pelo CNPq).

ATO - 13

**PROPRIEDADES ELETRÔNICAS E DE LOCALIZAÇÃO DO TRANS-POLIACETILENO COM DISTRIBUIÇÃO DE DEFEITOS TIPO SÓLITON.** C.A.R. Sá de Melo, E. Kotler, H.S. Brandt (Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro).

*Propriedades eletrônicas e de localização do trans-poliacetileno, com defeitos tipo soliton, neutros e estreitos, aleatoriamente distribuídos ao longo da cadeia, são estudadas. Este problema é tratado pelo método RVCM (Renormalized Virtual Crystal Method), que usa técnicas do grupo de renormalização (distinção simples e ternária) para o cálculo das densidades de estados. Estes resultados são comparados com os de uma simulação numérica para uma cadeia aleatória de um milhão de sítios. O livre caminho médio é calculado na energia de Fermi para várias concentrações de solitons. A transição semicondutor-metal é discutida e uma análise crítica do método usado é feita com base nos resultados obtidos.*

ATO - 14

**EFEITOS DE CORRELAÇÃO NO ESTUDO DE SÓLITONS EM POLIACETILENO,** Maria Cristina dos Santos, Depto de Química Fundamental, UFPE e Celso P. de Melo, Depto de Física, UFPE.

A estrutura eletrônica de uma cadeia infinita de trans-poliacetileno com um soliton é investigada através da técnica da Matriz Densidade com aproximação local. Tendo como ponto de partida o resultado de um cálculo não auto-consistente tipo "tight-binding", estudou-se o efeito das interações eletrônicas, sobre a distribuição de cargas em torno do soliton, acrescentando-se ao hamiltoniano inicial os termos de repulsão intereletrônica a nível do modelo de Parr - Paviiser - Pople (primeiros vizinhos). A convergência dos resultados em relação ao tamanho do espaço local é apresentada. (APOIO - FINEP e CNPq).

ATO - 15

**"Cálculo Auto-Consistente da Adsorção de Hidrogênio em Cadeias Metálicas"** Celso P. de Melo (Departamento de Física, UFPE), M.C. dos Santos (Departamento de Química Fundamental, UFPE) e Bernard Kirtman (Department of Chemistry, UCSB).

O método de Aproximação Local para a Matriz Densidade é aplicado para o cálculo da estrutura eletrônica associada à adsorção de hidrogênio em uma cadeia semi-infinita de átomos de tungstênio. A importância dos efeitos de auto-consistência é analisada, tendo em vista a redistribuição de carga e spin eletrônico.

Em particular, são comentadas as possíveis consequências do longo alcance dos efeitos de spin sobre a interação entre átomos adsorvidos em diferentes sítios. (APOIO CNPq - FINEP - NSF).

ATO - 16

"PROPRIEDADES DE ABSORÇÃO ÓTICA DE SEMICONDUTORES ORGÂNICOS",  
 Andréa L.S.da Rosa e Celso P.de Melo (Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco, 50.000-Recife-PE)

Parâmetros relevantes para o estudo das propriedades de absorção ótica de polímeros semicondutores orgânicos são obtidos a partir do cálculo a nível semi-empírico da estrutura eletrônica do material. Em particular, a densidade conjunta de estados e a força de oscilador para transições entre as bandas de valência e condução de poliáceno são apresentadas, para diversas conformações possíveis do material. (Apoio CNPq-FINEP).

ATO - 17

ENERGIAS TOTAIS EM SISTEMAS UNIDIMENSIONAIS  
 S.O. Dantas, G.G. Kleiman

Apresentamos cálculos, dentro do formalismo de densidade local, da energia total de sistemas unidimensionais inhomogêneos. Comparamos com cálculos auto-consistentes das equações de Kohn-Sham e aqueles feitos num esquema variacional. Utilizamos estes resultados para indicar a aplicabilidade de idéias químicas na determinação do estado fundamental de tais sistemas. A vantagem da escolha de sistemas unidimensionais é que eles podem expor a Física sem o ônus de cálculos muito complicados.

ATO - 18

ELETRONS LIGADOS À SUPERFÍCIE DE HÉLIO LÍQUIDO NA PRESENÇA DE UM CAMPO DE LASER. Roberto Lobo e Oscar Hipólito. Departamento de Física e Ciência dos Materiais do Instituto de Física e Química de São Carlos da Universidade de São Paulo.

Através da transformação unitária de Henneberger investigamos a influência de um campo de laser nos estados ligados de elétrons adsorvidos na superfície de Hélio líquido. Verificamos que a energia de ionização decresce rapidamente com a intensidade do campo do laser. Sugerimos ainda investigações experimentais em ionização por microonda para que nossas previsões sejam confirmadas.

ATO - 19

ESTUDO DOS EFEITOS DE AUTO-INTERAÇÃO NOS NÍVEIS DE ENERGIA DOS METAIS DE TRANSIÇÃO. A.T. Lino, E.K. Takahashi, J.L.P. Castiglira, E.N. Pereira. Universidade Federal de Uberlândia.

A aproximação de densidade de spin local para o tratamento do termo de troca ("exchange") na teoria do campo médio de Hartree-Fock para o estudo de sistemas de muitas partículas, consiste em substituir a expressão exata, não local, por uma aproximação local e essencialmente estatística, tal como aquelas sugeridas por Slater, Kohn-Sham, Liberman, etc.

No entanto, enquanto que na Teoria de Hartree-Fock o termo de exchange cancela exatamente o termo coulombiano para sistemas de um único elétron, isso não ocorre no caso da aproximação local. Neste último caso persiste um resíduo espúrio de auto-interação, como o preço a ser pago pelo tratamento simples e local do potencial de um único elétron. Embora essa auto-interação se anule para orbitais delocalizados, presentes em sistemas estendidos, ela ocasiona uma quantidade considerável de erros sistemáticos para sistemas finitos e estados localizados, em sistemas estendidos.

O nosso objetivo principal é o de incorporar a correção de auto-interação, como proposta por Perdew e Zunger, nos cálculos de estruturas eletrônicas de sistemas cristalinos complexos, através da utilização do método Celular Variacional. Pretendemos, em uma etapa inicial estudar o comportamento dessa correção em sistemas atômicos.

ATO - 20

CORREÇÃO DE AUTO-INTERAÇÃO NA APROXIMAÇÃO DA DENSIDADE FUNCIONAL: MS-Xa. S.K. Figueiredo e A. Fazzio (Instituto de Física-USP-S. Paulo).

Na teoria da densidade de spin local (LSD), diferente da teoria de Hartree-Fock a auto-interação não é cancelada completamente porque os operadores de "exchange" e Coulomb não tem o mesmo Kernel  $1/r^2 - r$ . Neste trabalho introduzimos a correção de Perdew-Zunger no método do Espalhamento-Múltiplo-Xa. Estudamos aglomerados de  $CH_4$ , GaAs, GaAs:V discutindo o processo de auto-consistência e energias de ionização comparadas com o conceito do estado de transição de Slater.

ATO - 21

UMA MODIFICAÇÃO DO MÉTODO DE ESPALHAMENTO MÚLTIPLO PARA O ESTUDO DE ESPALHAMENTO DE ELÉTRONS POR MOLÉCULAS: CÁLCULO PRELIMINAR PARA ESPALHAMENTO ELÁSTICO DE ELÉTRONS DE BAIXA ENERGIA POR MOLÉCULAS DE HIROGÊNIO.

M. C. C. F. A. Mancera, Instituto de Física e Química de São Carlos, USP, São Carlos (SP) e L. E. Machado, Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos (SP).

Neste trabalho propomos um novo modelo para o estudo do espalhamento de elétrons por átomos e moléculas. O modelo está baseado, em linhas gerais, no método de espalhamento múltiplo, como formulado por Dehaer e Dill [J. Chem. Phys. 61, 692 (1974)] para os casos de espalhamento elétron-molécula e de fotoionização molecular. Neste método o ambiente molecular é dividido em diversas regiões, definidas por esferas centradas nas posições dos núcleos da molécula e que estão todas elas englobadas por uma esfera maior. Usualmente o raio da esfera maior é tomado o menor possível, para minimizar as consequências de que o potencial na chamada "região II" é suposto constante, que é certamente uma hipótese não-realista. Nosso modelo levanta esta restrição, através das seguintes considerações: (i) utilização de potenciais centrais em cada esfera interna tais que praticamente todo o efeito dos potenciais estático e de troca estejam nestas regiões. Isto é obtido através do modelo do potencial multicêntrico renormalizado, de Lee e Freitas [J. Phys. B: At. Mol. Phys. 14, 1053, (1981)]; extensão da região I até a região assintótica e introdução af de um potencial de polarização adequado; (ii) determinação numérica dos coeficientes de reexpansão das funções da região II em termos de funções centradas nas regiões I, para que se possa fazer o "casamento" das soluções na fronteira das duas regiões. A matriz-K de colisão é obtida, como usual, da forma assintótica da solução de espalhamento. Como um teste de aplicabilidade do modelo, calculamos seções de choque integrais para espalhamento elástico e  $-M_e$  para elétrons de energia incidente entre 6.5 e 22.0 eV. Nossos cálculos são comparados com os de outras teorias e com resultados experimentais disponíveis na literatura.

ATO - 22

ESTADO FUNDAMENTAL DE UM GÁS DE PARTÍCULAS DE DIRAC HOMOGÊNEO.

A. Antonelli e A. Agostinho Neto (Instituto de Física USP)

Analisamos a polarização de um gás de partículas de Dirac homogêneo, em  $T = 0K$ , de acordo com estados de helicidade e segundo uma direção preferencial no espaço. Os resultados dentro da aproximação de Hartree-Fock mostram que as propriedades do gás dependem de como a polarização é considerada.

ATO - 23

MÉTODO CELULAR VARIACIONAL: BENZENO

Usamos o método celular variacional (MCV) para calcular os potenciais de ionização (IP) do benzeno.

A precisão obtida é a mesma de um cálculo atômico onde usamos a média esférica para a carga e o potencial. Se deslocarmos por uma constante os IP's por nós calculados para o benzeno, nossos resultados concordam melhor com resultados experimentais que os cálculos obtidos por Hartree-Fock ou espalhamento múltiplo, sendo comparáveis com os obtidos em cálculos de "configuration interaction". No entanto a constante de deslocamento é muito grande e atribuímos tal fato à aproximação local do exchange-correlação.

ATO - 24

"MODELO DE CLUSTER COVALENTE PARA O Fe bcc", A.C.Pavão, Departamento de Química Fundamental-UFPE - 50000-Recife-PE

A estrutura eletrônica de um cluster de Fe<sub>9</sub> (simetria Oh) foi determinada autoconsistentemente através do Método do Espalhamento Múltiplo<sup>1</sup>. Os efeitos magnéticos da estrutura eletrônica são claramente observados mas conduzem a valores pobres tanto para larguras de bandas como também para o spin total por átomo<sup>1,2</sup>. Uma análise detalhada da estrutura de níveis indica uma inversão na posição dos níveis 3d dos ligantes (3d<sub>l</sub>) e do átomo central (3d<sub>c</sub>). Os orbitais do cluster são obtidos por combinações apropriadas de ondas s, p e d e desta forma os níveis 3d contêm contribuições não desprezíveis de funções p e principalmente funções s. Esta grande hibridização s-d acaba conduzindo a uma estrutura de níveis onde os 3d<sub>l</sub> se localizam, contraditoriamente, abaixo do 3d<sub>c</sub>. Em nosso modelo usamos uma restrição no deck de simetria onde construímos a banda s (ou a banda d) exclusivamente com funções s (ou então d) e pelo menos qualitativamente se obtem uma melhor descrição das bandas e de efeitos magnéticos para o cluster. Resultados mais detalhados serão apresentados durante este ENCONTRO.

1. Yang C.Y. et al, Phys.Rev. B24, 5673 (1981)

2. Lee, et al. Phys.Rev. B30, 1724 (1984).

ATO - 25

## ELECTRON-MOLECULE COLLISIONS

Luiz M. Braccansini<sup>\*</sup>, M.A.P. Lima<sup>†</sup>, V. McKoy<sup>‡</sup>, and W. Huo<sup>††</sup>

<sup>\*</sup> IFGW da Unicamp, Campinas - SP; <sup>†</sup> A.A. Laboratory of Chemical Physics, Caltech, Pasadena, Ca; <sup>‡</sup> Radiation Laboratory, University of Notre Dame, Notre Dame, Indiana 46556).

Elastic differential, total and momentum-transfer cross sections for impact of low-energy electrons with  $H_2O$  with polyatomic targets have been calculated using a theory based on a multichannel extension of the Schwinger Variational Theory (SMC)<sup>1</sup> at the static-exchange level. The results of our calculations for elastic scattering of 2, 6, 10, 15 and 20-eV electrons by  $H_2O$  are compared with other theoretical and experimental results available in the literature.

1. K. Takatsuka and V. McKoy, Phys. Rev. A30, 1734 (1984).

ATO - 26

DIFUSÃO DE SPIN EM POLIACETILENO - NESTOR CORRÊA - Departamento de Física - Universidade de Brasília.

Apresenta-se um estudo da dinâmica de defeitos estruturais tipo soliton numa cadeia unidimensional. Coeficientes de difusão de spin são obtidos a partir de um modelo de Heisenberg acoplado às vibrações dos sítios. Compara-se os resultados obtidos com resultados experimentais em poliacetileno e com outros modelos.

**VI.3 - BIOFÍSICA**

**Coord.:- Prof. Paulo M.Bisch (CBPF)**

**BIO - 01** INFLUÊNCIA DA HISTIDINA DISTAL NA SIMETRIA DO LIGANTE NO E SUA ESTABILIDADE TÉRMICA. Otaciro Rangel Nascimento, Ignês Caracalli, Instituto de Física e Química de São Carlos, USP, C.P.369, 13560 São Carlos, SP.

A ligação do grupo NO na sexta coordenação do íon ferro em Mioglobinas e Hemoglobinas tem sido amplamente utilizada para obtenção da informação da simetria nestas moléculas no estado  $Fe^{2+}$ , spin nulo. A vantagem de se utilizar o grupo NO no lugar de  $O_2$  está no fato do grupo Nitrosil ser paramagnético e poder ser observado pela técnica da RPE. Neste trabalho está sendo mostrado que existem dois estados da simetria possíveis que estão em equilíbrio térmico e são estáveis em uma faixa muito ampla da temperatura. A temperatura da transição de um estado para outro é dependente do resíduo de amino-ácido que ocupa a posição da histidina distal (vizinhança da sexta coordenação) e que pode ser visto por medidas com diferentes Hemoproteínas. No caso presente foram usados Mioglobina de *Aplysia* Brasileira e Hemoglobina de *Glossoscolex* Paulistus. Este estudo está estendido para mioglobinas da Baleia e de Cavalo.

Apoio Financeiro: CNPq, FINEP e FAPESP.

**BIO - 02** O PAPEL DA ÁGUA NA CONFORMAÇÃO DA PROTEÍNA MIOGLOBINA: UM ESTUDO POR RPE, Ledislav Martín Neto\*, Rosemary Sanchez, Marcel Tabak, Sergio Mascarenhas e Otaciro R. Nascimento. Instituto de Física e Química de São Carlos, USP, S. Carlos, Brasil. \*FAPESP.

A estrutura desidratada de uma molécula biológica não é suficiente para explicar a sua ação, isto porque a água interage com os resíduos hidrofílicos e polares mudando sua conformação que é determinante na sua função. No presente trabalho observamos as variações de simetria do centro ativo (heme) da metamioglobina (metaMb) equina moduladas pelo grau de hidratação. Utilizou-se também ApoMioglobina (ApoMb) para verificar se um radical livre formado na desidratação, dependia só da globina e não do grupo prostético. Amostras liofilizadas foram utilizadas e o sinal de RPE do íon ferro(III) e do radical livre monitorado. Para a metaMb o espectro de RPE é caracterizado por linhas da absorções com valores de  $g \sim 6$ ;  $g = 4,3$ ;  $g \sim 2$  e também a linha do radical livre com  $g = 2,01$ . Para a ApoMb observou-se uma única linha da absorção com valor da  $g = 2,01$ . Observou-se na metaMb que a variação da largura da linha em  $g \sim 6$  com a hidratação decresce exponencialmente até um valor de  $0,2$  gr  $H_2O$ /grMb e mostrando pequena variação acima dessa hidratação. Duas possibilidades podem explicar este comportamento: 1) a simetria do íon ferro(III) na proteína é sensível a mudanças conformacionais induzidas pela variação no conteúdo da água; 2) a variação é devido ao estreitamento da linha provocado pelo aumento do grau de liberdade com o crescimento da hidratação. Constatou-se também que a presença do radical livre criado pela desidratação é independente do grupo prostético.

**BIO - 03** ESTUDO DE E.P.R. A BAIXAS TEMPERATURAS DE MET-HEMOGLOBINA -  $H_2$  INTACTA E DESNATURADA. E. Wajsborg (Deptº de Física-FUC/RJ), H.J. Kalinowski (Deptº Eng. Telecomunicações - UFF) e G. Kanski (CBPF).

Prendemos verificar o efeito da mudança conformacional da proteína sobre o parâmetro de dimensão fractal,  $d$ , quando uma solução de met-hb- $H_2$  em 50% de glicose é submetida a tratamento térmico para desnaturação (5min a 80°C). O parâmetro  $d$  pode ser obtido da dependência do tempo de relaxação spin rede,  $T_1$ , com a temperatura ( $T_1^{-1}$  a  $T_1^{-2}$ ) num processo Raman para o estado de spin baixo do  $Fe^{3+}$  verificamos que a temperaturas menores que 20K, a solução met-hb- $H_2$  não apresenta puramente um estado de spin baixo, mas uma fração de 0.04 de spin alto. O processo de desnaturação aumenta esta fração para 0.31 que deve estar associada a variação de campo cristalino para região de campos menores que o valor crítico  $A_c$  para o qual os dois estados de spin têm mesma energia. Nos casos onde existe a mistura de estados de spin, o mecanismo de relaxação do estado de spin baixo não pode ser interpretado em função do parâmetro  $d$ , porque para temperaturas menores 12.8-1.5K existe a contribuição de um processo Orbach via estado de spin alto. Os valores do desdobramento a campo zero A obtidos a partir da dependência de  $T_1$  no processo Orbach para proteína desnaturada ( $T_1$  e  $a^{-2/K^2}$ ) estão de acordo com o calculado a partir da variação de intensidade da linha de EPR com temperatura.

**BIO - 04** **DINÂMICA DA RECOMBINAÇÃO DO NITRÓXIDO COM A HEMOGLOBINA POR RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA, MARILIA P. LINHARES E E. MAJNBERG - CBPF.**

A Hemoglobina (Hb) contém 4 grupos Hemes, cada um associado a uma cadeia polipeptídica  $\alpha$  ou  $\beta$ . A Mioglobina (Mb) tem 1 Heme associada à cadeia  $\alpha$ . O átomo de ferro (Fe) central na Heme se liga reversivelmente à pequenas moléculas tais como  $O_2$ , CO e NO. 2 estados estão envolvidos na função destas proteínas, o estado ligado e o não ligado. A estrutura da Globina varia de um estado para o outro. A proteína se movimenta dando passagem ao ligante. Este é o centro da nossa pesquisa, conhecer os detalhes da dinâmica deste processo. É de 1975 o trabalho de Frauenfelder e col. (1) com MbCO e MbO<sub>2</sub>. A recombinação do ligante após fotodissociação foi acompanhada através do tempo por medidas de Absorção Ótica, à temperaturas entre 40 e 350K. Um modelo clássico foi construído propondo 4 barreiras de potencial no caminho do ligante ao Fe. Nós estamos investigando a Hb, mais complexa que a Mb. Fizemos medidas de dissociação por RPE da HbNO nas temperaturas entre 6 e 14K e encontramos cerca de 60% dos ligantes dissociados após  $\pm$  30 min de iluminação com uma lâmpada de 30W. Verificamos que com potências mais baixas a fotodissociação é menor ou não ocorre. Não observamos reassociação nestas temperaturas. As amostras de Hb saturadas com NO não apresentaram mudanças na forma de linha do espectro de RPE após fotodissociação, indicando que o NO se desligou igualmente das cadeias  $\alpha$ 's e  $\beta$ 's. Estamos preparando cadeias isoladas da Hb marcadas com NO para avaliar as suas contribuições relativas. (1) *Biochemistry*, vol. 14, no 24, 1975.

**BIO - 05**

**ESPALHAMENTO DE RAIOS X POR HEMEPROTEÍNAS EM SOLUÇÃO**

Christina F. de Souza e Iris L. Torriani, Universidade Estadual de Campinas.

Atualmente estamos estudando por espalhamento central de raios X, dispersões de eritrocruorina do anelídio *Glossoscolex paulistus*. As eritrocruorinas tem pesos moleculares da ordem de um milhão ou mais. Pouco se sabe sobre as proporções de grupos heme que contem ou sobre outras propriedades químicas destas macromoléculas.

A partir das curvas de espalhamento central de dispersões de eritrocruorina, é possível obter os parâmetros  $R_g$  = raio de giro e  $D_{max}$  = dimensão máxima das macromoléculas. Medidas preliminares permitiram determinar estes parâmetros, e os valores obtidos se encontram dentro do esperado para hemoglobinas de anelídios. Nosso trabalho continua, para obter dados mais precisos e maiores informações sobre a estrutura de baixa resolução destas macromoléculas.

**BIO - 06**

**ALGUNS ASPECTOS QUÂNTICOS DAS PROPRIEDADES ELETROSTÁTICAS BIOMACROMOLECULARES. Marçal de Oliveira Neto - Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CNPq, Rio de Janeiro).**

Dois problemas de interesse da biologia molecular são estudados empregando os métodos da Química Quântica.

É apresentada uma técnica para o cálculo do potencial eletrostático macromolecular e aplicando-a à molécula do ácido ribonucleico de transferência tARN<sup>Phe</sup>. Baseados nos resultados obtidos discutimos alguns dos aspectos das propriedades reativas desta molécula. Em seguida, uma metodologia é desenvolvida com o objetivo de estabelecer os sítios primários de interação entre macromoléculas e moléculas de água. Uma aplicação é feita para a molécula do ADN na conformação B.

BIO - 07

"COMPATIBILIDADE ENTRE A MECÂNICA QUÂNTICA E A REPRODUCIBILIDADE BIOLÓGICA",

I. Ferreira (Departamento de Química Fundamental, UFPE).

Wigner (1961), aplicando a matriz de espalhamento, mostrou que a transição  $v_{xw} \rightarrow v_{xv}x_r$  é fortemente proibida ( $v, w$  e  $r$  são respectivamente as autofunções de um sistema vivo, dos nutrientes e do resíduo deste último). Desta maneira a replicação biológica e a origem dos sistemas vivos no passado seriam incompatíveis com a M.Q. Laudsberg (1984) propôs sair do paradoxo postulando que a matriz  $S$  não é aleatória mas apenas "fracamente uniforme". Sabe-se hoje que o conceito de espécie unicamente definida não é satisfatório e deve-se usar o conceito de distribuição de espécies no sentido da genética das populações. A transição correspondente a replicação biológica deve ser  $v_{xw} \rightarrow (a_{\nu}v + \sum a_{\mu}p) x_r$ . Na medida em que a distribuição é larga, aumentamos a probabilidade de transição (no formalismo da matriz  $S$ ).

BIO - 08

ESTRUTURA ELETRÔNICA DAS MELANINAS. Douglas Soares Galvão e Mari-

lia Junqueira Caldas (IPGW - UNICAMP).

Melanins são pigmentos biológicos com função de fotoproteção. Embora existam vários trabalhos teóricos e experimentais sobre a estrutura destes pigmentos, algumas questões de importância fundamental como a possível estrutura dos polímeros que as constituem e os mecanismos de condução continuam em aberto. Neste trabalho investigamos a estrutura de alguns dímeros e polímeros associados a estes pigmentos.

BIO - 09

FLUORESCÊNCIA EM COMPLEXOS MELANO-PROTEICOS. Maria Regina Kawamura<sup>a</sup>, Adelaide Faljoni-Alario<sup>b</sup>, Amado Shuichi Ito<sup>a</sup>.

<sup>a</sup>Instituto de Física - USP, Departamento de Física Experimental. <sup>b</sup>Instituto de Química - USP, Departamento de Bioquímica.

Estudamos a interação entre melanina e proteína em processos envolvendo absorção e transferência da energia luminosa, através da espectroscopia de fluorescência. Analisamos alterações nas propriedades fluorescentes das proteínas séricas ESA e BSA e do aminoácido triptofano na presença do pigmento.

A intensidade de emissão fluorescente das proteínas e do aminoácido livre é diminuída na presença do pigmento, que age como supressor da fluorescência. Discutimos os resultados em termos dos possíveis mecanismos de transferência de energia entre proteína e melanina, que dependeriam do grau de interação entre as mesmas.

BIO - 10

ESTUDOS POR ESPECTROSCOPIAS DE RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA, ABSORÇÃO ÓTICA E DICROISMO CIRCULAR DE PROCESSOS DE AGREGAÇÃO E AUTOXIDAÇÃO DO ANTIBIÓTICO ANPOTERICINA B.

M. Teresa Lamy-Pfreund, Vergínia F.N. Perreira, Adelaide Paljoni-Alório e Shirley Schreier.

Departamento de Bioquímica, Instituto de Química, USP, CP. 20.780, São Paulo - Brasil.

O antibiótico poliênico anfotericina B (AB) é uma das drogas mais efetivas no tratamento de infecções micóticas sistêmicas, apesar de ser extremamente tóxico. Ele age a nível de membrana causando alterações em sua permeabilidade. Não estudamos o processo de autoxidação de AB, o qual está relacionado com a degradação do antibiótico, e, possivelmente, com seu efeito lítico. Demonstramos a formação de radicais livres durante o processo de autoxidação, através de ressonância paramagnética eletrônica, utilizando marcadores de spin e captadores de spin. Considerando que AB é muito pouco solúvel em meio aquoso, a pH fisiológico, grande parte dos estudos com esse antibiótico foram feitos em presença de agregados de AB. Quando agregada seus espectros de absorção ótica e dicroísmo circular são distintos daquelas observados para o antibiótico monomérico. Utilizando as técnicas espectroscópicas acima citadas nós caracterizamos vários estados de agregação do antibiótico e discutimos a dependência da cinética de autoxidação da droga com seu estado de agregação. Estados de agregação de AB poderiam também estar relacionados com seus mecanismos de ação e toxicidade. Auxílio Financeiro: FINEP, FAPESP, CNPq

BIO - 11

ESTUDO DA VARIAÇÃO DA INTENSIDADE DO ESPALHAMENTO RAMAN DO NYLON-12 EM FUNÇÃO DO TEMPO DE ILUMINAÇÃO DA AMOSTRA -  
R.M. Couto e J.H. Nicola - UNICAMP

Observa-se que a intensidade do espalhamento Raman do polímero amorfo Nylon 12 sofre uma atenuação em função do tempo de iluminação da amostra. Esta atenuação da intensidade foi correlacionada com o aquecimento local da região de espalhamento causado pela radiação de excitação do laser incidente.

A partir de informações sobre o comportamento térmico do Ny-12 é de se esperar que este aumento de temperatura local implique em uma série de alterações no estado da amostra (transição vidro-borracha), na conformação (transição cis-trans) e na configuração (transição  $\alpha \rightarrow \gamma$ ) das cadeias.

Partindo do princípio que a intensidade de espalhamento Raman é diretamente proporcional a estrutura da amostra a cada tempo, estamos fazendo o ajuste das curvas de atenuação obtidas para várias frequências Raman no intuito de correlacionar as alterações do espectro Raman com os diversos tipos de alterações da estrutura, conformação e configuração das cadeias.

BIO - 12

RADICAIS NITRÓXIDOS EM BIOFÍSICA DE MEMBRANAS. Marcel Tabak, Instituto de Física e Química de São Carlos, USP, 13.560 São Carlos, SP.

O método de marcadores de spin com radicais nitroxídeos tem sido amplamente aplicado ao estudo de membranas. O mesmo está baseado na introdução de um radical livre estável (nitroxídeo) no sistema de estudo (membrana) e a partir da análise dos espectros de ressonância paramagnética eletrônica (RPE) obtém-se informação sobre as mudanças estruturais que ocorrem na membrana em diferentes condições de pH, presença de íons, de moléculas pequenas (ação de drogas), etc. No caso de membranas os nitroxídeos utilizados são derivados paramagnéticos de ácidos graxos bem como análogos de colesterol. No presente trabalho foram estudados os efeitos de moléculas que possuem um fragmento de açúcar sobre a estrutura de membranas preparadas na forma de lipossomas de lecitina e membranas de hemícelulas. Verificou-se que os grupos polares do fragmento de açúcar interagem fortemente com a superfície da membrana aumentando a rigidez medida pelo marcador nitroxídeo através do parâmetro de ordem. Variando a posição do grupo  $-N-O$  ao longo da membrana verificou-se o efeito a diferentes profundidades da superfície da membrana.  
CNPq, FINEP.

BIO - 13

**INFLUÊNCIA DO COLESTEROL SOBRE A DENSIDADE DE CARGA SUPERFICIAL E POTENCIAL SUPERFICIAL DE MEMBRANAS DE BI-CAMADAS LIPÍDICAS**

 José A. Fornés<sup>a</sup> e Joaquim Procópio<sup>b</sup>
<sup>a</sup>Instituto de Matemática e Física, Universidade Federal de Goiás, Campus Universitário, Bloco DMF-2 74000 Goiânia, Go

<sup>b</sup>Departamento de Fisiologia e Farmacologia, Instituto de Ciências Biomédicas, Universidade de São Paulo, 05508 São Paulo, SP

**Resumo.** Foram medidas a densidade de carga superficial e potencial de membranas de asolectina, com e sem colesterol. O conteúdo de colesterol foi na relação 2:1 asolectina/colesterol, mostrando um efeito de aumento de 25% em ambas grandezas. Se discute a possível influência disto na explicação de outros fenômenos.

BIO - 14

**ANÁLISES DO MÍNIMO SECUNDÁRIO NA TEORIA DE DLVO**

José A. Fornés

Instituto de Matemática e Física, Universidade Federal de Goiás, Campus Universitário, Bloco DMF-2 74000 Goiânia, GO

**Resumo.** Descreve-se um método simples para a determinação da distância e energia do mínimo secundário para duas superfícies planas que interagem com potencial constante e densidade de carga superficial constante em uma solução de um eletrólito simétrico. Se consideram os dois casos de interação retardada e não retardada. Se reportam dois gráficos os quais fornecem uma fonte rápida para a determinação do mínimo secundário.

BIO - 15

**FORÇAS DE HIDRATAÇÃO EM FILMES DE ÁGUA EXTREMAMENTE FINOS.** Fernando da Silva

Rodrigues e Paulo Mascareño Bisch (CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS, RJ).

As forças de hidratação nos filmes de água com espessuras na ordem de 40Å, são atribuídas à influência do surfactante na estruturação da água no interior do filme. As propriedades do surfactante determinam se a força de hidratação é repulsiva (superfícies hidrofílicas) ou atrativa (superfícies hidrofóbicas). Utilizamos um modelo microscópico (modelo de Pople, J.A. Pople, Proc. Roy. Soc. 205-p.163 (1951); S. Marcelja, D.J. Mitchell, B.W. Ninham, M.J. Sculley, J. Chem. Soc. Faraday Trans. II, 73, p.630 (1977)), para descrever a interação entre as moléculas de água. A estruturação da água no interior do filme é obtida a partir do cálculo do parâmetro de ordem, que mede a deformação média local das pontes de hidrogênio. Para calcular o parâmetro de ordem, utilizamos o Formalismo do Funcional Densidade, convenientemente adaptado para o caso em que consideramos os graus de liberdade de rotação da molécula de água. Após obter o parâmetro de ordem, calculamos a força de hidratação e comparamos nossos resultados com experimentos recentes com filmes formados entre multicamadas de lípidios e entre placas de mica. Nossa intenção é melhorar o modelo, pois embora nossos resultados sejam da mesma ordem dos experimentais, alguns aspectos da força de hidratação permanecem sem explicação.

BIO - 16

ESTUDO DA INFLUÊNCIA DO POTENCIAL ELÉTRICO E DAS CARGAS SUPERFICIAIS NA ESTABILIDADE MECÂNICA DA MEMBRANA DO ERITRÓCITO. CELIA CORTEZ MAGNELLY E PAULO M. BISH - CBPF.

O potencial elétrico em função de coordenada espacial, é determinado pela resolução da equação de Poisson-Boltzmann; com base num modelo matemático que toma a membrana do eritrócito (constituída por bicamada lipídica) como um filme fluido, plano e infinito, de espessura  $h$  (de  $Z = -h/2$  a  $Z = h/2$ ). Considera-se que a distribuição de cargas nas superfícies do filme é homogênea, de tal forma que o potencial é dependente apenas da coordenada  $Z$ . Baseado neste modelo, uma análise hidrodinâmica linear é desenvolvida para o estudo da estabilidade mecânica da membrana quando perturbada por flutuações do meio. Os gradientes de tensão superficial e stress elétricos longitudinais são considerados (Prevost, M., Bisch P.M. e Senfeld A. - J. of Colloid and Interf. Sc 88(2):353-371, 1982). É discutido o papel das cargas superficiais na dinâmica da membrana. Os resultados são comparados aos de experiências em que são observados distúrbios ondulatórios na superfície de células vermelhas quando aquecidas a temperaturas superiores que  $48^{\circ}\text{C}$  (Coackley W.T., Deeley J.D.T. - Bioch et Biophys. Acta 602:355-375, 1980).

BIO - 17

SIMULAÇÃO DA DINÂMICA DO MOVIMENTO DE MICROORGANISMOS MAGNETOTACTICOS - DARCI MOTA DE S. ESQUIVEL E HENRIQUE G.P. LINS DE BARROS - CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS.

Microorganismos magnetotacticos respondem ao campo magnético (terrestre ou um campo externo aplicado). A um modelo simples do movimento, que só leva em conta o torque magnético e o torque viscoso numa esfera de raio  $R$  e momento magnético  $m$ , acrescentamos a influência de fatores ambientais agrupados em um único termo aleatório gerado computacionalmente. Acrescentamos também um torque girando no plano perpendicular ao momento magnético. Este torque descreve em primeira aproximação o efeito do flagelo sobre o movimento do microorganismo. A evolução temporal dos ângulos de orientação é dada por um sistema de equações diferenciais acoplados não homogêneo e não linear. Este sistema só pode ser resolvido numericamente e mostra que a introdução dos termos de flagelo e de perturbação fazem com que a trajetória não esteja no plano.

BIO - 18

FLUXO DE FOTONS γ NO OSSO E NO MÚSCULO - José Marcos Andrade Figueiredo - Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais.

O fluxo de fótons γ fornece o número de fótons em dado ponto do meio, com dada energia e direção. Neste trabalho, o fluxo é calculado utilizando-se uma expansão em polinômios de Hermite e a equação transporte para o fenômeno. São apresentados os detalhes do tratamento numérico e computacional e a análise do fluxo calculado em função da dependência energética dos vários processos de interação  $\gamma$ - $e^-$ . Os resultados são comparados com aqueles obtidos pelo Método de Monte Carlo e sugeridas aplicações dos cálculos ao problema das interfaces.

Membranas de eritrócitos humanos foram marcadas com spin labels de vários comprimentos, da série malainida, que se ligam as proteínas e com spin labels derivados de ácidos graxos que se intercalam na parte lipídica das membranas. Os espectros dos spin labels em amostras submetidas a tratamento com clorpromazina em concentrações variando de 0 a 10  $\mu$ M foram registrados e analisados. Os resultados experimentais indicam que os spin labels ligados às proteínas respondem a concentrações mais baixas do fármaco quando comparados aos spin labels lipídicos, apresentando restrição acentuada em seu movimento. A análise das modificações dos espectros sugerem interação direta do fármaco com as proteínas das membranas e não apenas a aglomeração destas proteínas.

#### **VI.4 - CRISTALOGRAFIA**

**Coord.:- Profa. Lia Queiroz do Amaral (IFUSP)**

CRI - 01

## A EXTINÇÃO SECUNDÁRIA CALCULADA COMO EXPANSÃO EM SÉRIE DE TAYLOR.

C.B.R.Parente e V.L.Mazzocchi - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN-CRÉN/SP.

Em difração simples, para o cálculo do fator de extinção secundária, foram desenvolvidas diversas fórmulas empíricas que permitem uma razoável aproximação entre as intensidades determinadas experimentalmente e as calculadas teoricamente. Na teoria desenvolvida para a difração múltipla em cristais mosaicos, as intensidades são normalmente calculadas como somas de expansões em séries de Taylor. Quando essas expansões contêm um número suficiente de termos, a extinção secundária fica corrigida em sua totalidade. A dedução do termo geral da série, permitiu que, em difração múltipla o problema da extinção secundária ficasse totalmente resolvido. Neste trabalho, são mostrados resultados da aplicação do termo geral no cálculo de intensidade em difração simples, em cristais mosaicos com extinção secundária intensa.

CRI - 02

## ESTUDO DA MAGNETITA COM DIFRAÇÃO MÚLTIPLA DE NÊUTRONS. V.L.Mazzocchi e

C.B.R.Parente - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN-CRÉN/SP.

O fenômeno da difração múltipla vem sendo utilizado como técnica de análise de estruturas químicas, em trabalhos recentes na literatura. Entretanto, até o presente, nenhuma tentativa tinha sido feita de utilização da difração múltipla de nêutrons no estudo de estruturas magnéticas. Neste trabalho, são mostrados resultados preliminares referentes ao estudo da magnetita ( $Fe_3O_4$ ), com difração múltipla de nêutrons. A magnetita tem uma estrutura do tipo espinel inversa, pertencente ao grupo espacial  $Fd\bar{3}m (O_h^7)$ . Em temperaturas abaixo de 850K, ela apresenta estrutura ferromagnética do tipo Néel A-B. O método de análise, a ser empregado, compreende a obtenção experimental do diagrama-diferença de difração múltipla entre as fases ferromagnética e paramagnética, e sua comparação com o mesmo tipo de diagrama calculado teoricamente.

CRI - 03

PERFIL DE LINHA EXPERIMENTAL NA REGIÃO DO ESPALHAMENTO DE RAIOS-X PRÓXIMO AO ÂNGULO DE BRAGG  $\pi/2$ . CÍCERO CAMPOS E S.CATICHA ELLIS - UNICAMP

Desde que o cálculo detalhado do perfil de linha na região da retro coincidência foi publicado, (A.Caticha e S.Caticha Ellis; Acta Cryst. (1981), A37, 267; Phys. Rev. B. (1982) 25, 971-983; Proceed. "Topical meeting on Free Electron Generation of extreme ultraviolet coherent radiation". Brookhaven, 1983 Nat. Lab.), as tentativas no sentido de se obter o seu valor experimental foram limitadas pelas dificuldades experimentais impostas pela geometria do espalhamento. Contudo uma tentativa logrou êxito nesse intento (W.Graeff e G.Haterlik, Desy SR-81/15), mas a sofisticação da montagem experimental envolvida, e o uso do síncrotron torna inviável sua realização no nosso país. O interesse neste tipo de medida é devido ao fato sugerido nos trabalhos iniciais de que nesse caso o cristal se constitui numa cavidade ressonante para Raios-X. Essa tese foi demonstrada teoricamente por A. e S. Caticha (Phys. Rev., trabalho). Assim, utilizamos uma montagem original que permite a medida do perfil com uma pequena perda de informação, comparável ao experimento citado anteriormente, apenas que, essa montagem utiliza fontes convencionais de radiação. A idéia principal consiste em utilizar, um feixe monocromatizado, que emerge quase paralelamente a superfície de um monocromador assimétrico, para a inspeção do perfil. Este artifício permite o acesso à medição quantitativa do perfil, através do uso de detectores. A experiência está projetada para a reflexão (62D) de um cristal de Ca a temperaturas próximas a 10°C, usando-se como monocromador um cristal de Si (111) assimétrico. Detalhes do experimento serão apresentados.

CRI - 04

TOPOGRAFIA DE RAIOS-X DE CRISTAL DUPLO: ESTUDO DE QUARTZO NATURAL E SINTÉTICO. C.K. Suzuki, F. Iwasaki\*, C.R.L. Farias e H. Iwasaki\*. UNICAMP, Instituto de Física.

A topografia de raios-X de cristal duplo é uma técnica muitoútil e de grande versatilidade para a caracterização dos defeitos estruturais em materiais cristalinos. No presente trabalho, utilizou-se um sistema topográfico de cristal duplo no arranjo não-paralelo com monocromador assimétrico de Silício (111) e radiação de Cobre. A disponibilidade de se utilizar as geometrias (+,-) e (+,+) com respeito a disposição das reflexões do monocromador (1º cristal) e da amostra (2º cristal), permitem analisar tanto amostras de boa perfeição cristalina quanto amostras bastante tensionadas. Adaptando-se um motor de passo ao goniômetro de precisão (amostra)obtivemos perfis de difração ("rocking-curve") combinados com as imagens topográficas. Os resultados de aplicação deste sistema topográfico/goniométrico no estudo de caracterização do quartzo natural e sintético revelam uma boa sensibilidade na variação da "cristalinidade" das lascas de quartzo. A excelente resolução permite um estudo detalhado dos principais defeitos de crescimento em quartzo sintético.

(\* ) JICA, Japan International Cooperation Agency

Agradecemos o auxílio da Fapesp e do CNPq.

CRI - 05

ESTUDO DE MECANISMOS DE SORÇÃO DE AGUA EM BIOPOLÍMEROS  
Lúcia L. Labaki e Iris L. Torriani, Universidade Estadual de Campinas.

Como parte do projeto sobre mudanças estruturais em biopolímeros, apresentaremos resultados de estudos atualmente em andamento sobre adsorção de água em fibras de colágeno e celulose. Estes estudos são realizados utilizando métodos de difração de raios X para monitorar a estrutura cristalina das fibras nas diversas condições de umidade e medidas quantitativas de sorção de água que permitem o levantamento de curvas de sorção-desorção. A análise teórica destas curvas leva a identificação e quantificação de diferentes tipos de água de hidratação na estrutura das fibras. A correlação destes resultados com aqueles obtidos por difração de raios X deverá revelar detalhes sobre os mecanismos de adsorção de água nos dois tipos de biopolímeros em estudo.

CRI - 06

ESTUDOS DE SUPERFÍCIES FRACTAIS POR ESPALHAMENTO DE RAIOS X A BAIXOS ÂNGULOS:

Aldo Felix Craievich.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas.

Serão expostas as possibilidades e limitações da técnica de espalhamento de raios x a baixos ângulos com equipamentos convencionais e mediante o uso de radiação de síncrotron, para estabelecer o caráter fractal das superfícies de interfaces de materiais porosos. Serão discutidos recentes resultados experimentais e conclusões de diversos estudos de sólidos porosos com superfícies fractais e não fractais. Comparar-se-ão os resultados experimentais expostos com as teorias clássicas do espalhamento de raios x por sistemas porosos e com as recentes teorias associadas ao modelo fractal das superfícies.

CRI - 07

ESTUDO DO COMPLEXO CROTOXINA POR SAXS. J.R. Beltran, Yvonne P. Mascarenhas, (IFQSC, Universidade de São Paulo), Aldo F. Craievich (CBPF, Rio de Janeiro), J.C. Laure (Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo).

Mediante a técnica de espalhamento de raios-X a baixo ângulo, estudaram-se a forma e tamanho do complexo crototoxina, proteína neurotóxica extraída do veneno da Crotalus durissus terrificus, em diferentes condições de concentração (60, 50, 40, 30, 20 mg/ml), pH = 2,8 e temperatura de 25°C, visando a determinação dos seguintes parâmetros estruturais: raio de giro, volume hidratado da proteína, área da superfície externa, superfície específica a máxima dimensão da molécula. A análise das curvas de espalhamento na região de Porod e dos parâmetros acima leva à conclusão que as três proteínas apresentam - se em solução na forma de um elipsóide oblato. O estudo das curvas da função distribuição de distâncias  $P(r)$  confirma claramente a presença na crototoxina de duas moléculas associadas (fosfolipasa e crotapotina), se as compararmos qualitativamente com as funções  $P(r)$  calculadas utilizando os modelos diméricos para elipsóide prolatos (O. Clatter, J. Appl. Cryst., 12, 166, 1979). Medidas do raio de giro, volume e área da superfície externa da crototoxina num intervalo de 36 horas de exposição ao raio-X mostram que a estrutura quaternária da proteína não é afetada substancialmente nesse intervalo de tempo. O mesmo tipo de estudo das curvas de espalhamento foi feito para a fosfolipasa e crotapotina como objetivo de estabelecer o tipo de associação dimérica no complexo crototoxina.

Suporte financeiro: FAPESP, FINEP, CNPq.

CRI - 08

ESTUDO DE SAXS E DE MICELAS EM SOLUÇÃO

ROSANGELA TTRI e LIA QUEIROZ DO AMARAL - IPUSP

A análise do espalhamento de R-X em baixo ângulo (SAXS) é uma técnica usada para estudar características estruturais de partículas de tamanho coloidal.

Neste trabalho foram estudados os efeitos de colimação e demais correções necessárias ao tratamento de dados, usando-se uma amostra padrão de carvão vítreo, em diferentes geometrias (sistema de colimação de fendas linha - resolução normal e alta resolução; fendas ponto; câmara Kratky; mono cromador e filtros). Procurou-se verificar a necessidade real de utilização de feixe monocromático e a confiabilidade das correções aplicadas à curva de espalhamento.

Uma vez estabelecida uma sistemática de utilização do SAXS, iniciou-se um estudo de micelas em solução, do sistema binário lauril sulfato de sódio/água. A composição da amostra foi de 26.17% de SLS e 73.83% de água, cujos resultados obtidos a partir da curva de espalhamento serão discutidos.

CRI - 09

DETERMINAÇÃO DE ESTRUTURA DE LIGAS METÁLICAS AMORFAS: George Humberto

Bezerra (Instituto de Física da Universidade de São Paulo)

A informação estrutural obtida a partir da intensidade espalhada por Raio X, refere-se à função de distribuição radial (RDF). A RDF é obtida pela transformada de Fourier da intensidade espalhada coerentemente e dá uma informação uma vez que não diferencia entre os vários componentes atômicos. Já para uma informação mais detalhada (determinação das funções parciais) são necessárias várias curvas de espalhamento para diferentes radiações. Como estamos interessados no espalhamento coerente, a intensidade medida será objeto de varias correções. O processo de obtenção da RDF a partir da curva de espalhamento de RX já está implantado no programa RADIST e resultados obtidos por nós para a liga de ZrCu serão apresentados e comparados com a literatura. (FAPESP)

CRI - 10

ESTRUTURAS CRISTALINAS DOS COMPLEXOS FENILMERCÚRIO-2-MERCAPTOPYRIDINA (FPMF) E METILMERCÚRIO-2-MERCAPTO-BENZOXAZOL (MHGMF). Y.P. Mascarenhas, Depto. de Fís. e Ci. dos Materiais, Inst. Fís. Quím. São Carlos, USP, São Carlos, SP, Brasil, C.O.P. Santos, Depto. de Ci. Amb., Inst. Plan. Est. Ambientais, UNESP, Presidente Prudente, SP, Brasil, J.S. Casas, Depto. Quím. Inorg., Univ. Santiago, Espanha.

Este estudo visa verificar o papel dos átomos doadores vizinhos ao grupo -SH na coordenação do átomo de Hg. As reflexões foram medidas em um difratômetro CAD-4 Keraf-Nonius, MoK $\alpha$  monocromatizada por grafite. As estruturas foram resolvidas pelo método do átomo pesado e apresentam duas moléculas por unidade assimétrica. Em ambos os casos, observa-se variação nas distâncias entre Hg e seus ligantes em cada uma das moléculas. Sugere-se que estas variações sejam devidas a interações intermoleculares. Nota-se também em ambas as estruturas interações secundárias intramoleculares entre o Hg e a ligação  $\pi$  existente entre C e N anulares. Dados cristalinos: FPMF, P1, a=6,713(3), b=12,018(2) Å, c=15,436(2) Å,  $\alpha=66,28(4)$ ,  $\beta=77,43(2)$ ,  $\gamma=77,61(2)$ , 4 mol./cela unitária, R=5,80 e Rw=6,01; MHGMF, P2 $_1$ , a=10,601(1), b=8,164(3) e c=10,876(2) Å,  $\beta=103,87(1)$ , 4 mol./cela unitária, R=7,74 e Rw=7,65.

Apoio: CNPq, CAPES, FINEP.

CRI - 11

ESTRUTURA CRISTALINA DA LIPSCOMBITA SINTÉTICA: UMA REDETERMINAÇÃO. I. Vencato (Depto. Física - UFSC), E. Mattievich (Instituto de Física-UFRJ) e Y. P. Mascarenhas (Instituto de Física e Química de São Carlos-USP).

O composto sintético  $\text{Fe}^{2+}\text{Fe}_2^{3+}(\text{PO}_4)(\text{OH})_2$  é tetragonal, grupo espacial  $P4_32_12$ , com a = 7,310(3), c = 13,212(7) Å, Z = 4,  $D_{\text{calc}} = 3,68 \text{ g/cm}^3$ , V = 706,01 Å $^3$ ,  $\mu = 63,14 \text{ cm}^{-1}$ .

Utilizou-se um cristal preto bipiramidal de simetria tetragonal e dimensões 0,15 x 0,18 x 0,18 mm $^3$ , medindo-se 1270 reflexões num difratômetro automático CAD-4. Foi feita correção  $I_p$ , mas não por absorção. A estrutura foi resolvida pelo método de Patterson e refinada pelo método dos mínimos quadrados com pesos unitários até o índice R = 0,109 pra 347 reflexões observadas com  $I \geq 3\sigma(I)$ . O refinamento anisotrópico foi feito apenas nos átomos de Ferro.

A estrutura consiste de dois íons de  $\text{Fe}^{2+}$  desordenados em posição especial e de um íon de  $\text{Fe}^{3+}$  em posição geral, octaédricamente coordenados por ligantes  $(\text{PO}_4)^{-}$  e grupos  $(\text{OH})^-$ . Os octaedros formam cadeias infinitas compartilhando faces nas direções [1 1 0] e  $[1 \bar{1} 0]$ , alternadamente. Um aspecto inusitado da estrutura inclui a distância  $\text{Fe}^{3+}-\text{OH}$  de 2,26 Å e um valor médio das arestas de faces compartilhadas, O-O de 2,74 Å.

Órgãos Financiadores: CAPES, FAPESP, CNPq e FINEP.

CRI - 12

ESTUDO E CARACTERIZAÇÃO DE ESMERALDAS DE SANTA TEREZINHA DE GOIÁS.

Carlito Lariucci (Universidade Federal de Goiás), Regina Helena Almeida Santos (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP) e Cirano Rocha Leite (Instituto de Química de Araraquara, UNESP).

O objetivo deste trabalho é o estudo e caracterização de esmeralda de Santa Terezinha de Goiás com o intuito de relacionar suas propriedades físicas e cristalógicas.

A primeira parte consistiu em coletar amostras "in loco" seguida da preparação de lâminas com faces polidas, para estudo por espectroscopia e cristalografia, medida do índice de refração e densidade e também redeterminação da sua estrutura cristalina e molecular.

A identificação e estudo das inclusões, bem como dos xistos onde a esmeralda é encontrada é feita usando difração de raios-X.

Órgãos Financiadores: CNPq, FAPESP, FINEP.

CRI - 13

**LEI DE BRAGG NA FORMA AUTO-CONSISTENTE - W.A.Keller e H.S.Campos**  
Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia.

É apresentada uma forma auto-consistente para a lei de Bragg, considerando a interação de duas ondas planas com um conjunto de planos formados por dipolos induzidos. Ao contrário do tratamento de Darwin, a lei de Bragg modificada é obtida sem considerar qualquer coeficiente de transmissão ou de reflexão, tampouco separação das ondas. A solução encontrada para o caso de um plano, sugere a existência da continuidade do campo eletromagnético da região de influência de um plano para a correspondente de plano vizinho. Um resultado importante desta aproximação indica que, mesmo no caso "sem absorção", não existe possibilidade de ocorrer, experimentalmente, reflexão perfeita.

CRI - 14

**HIGH PRECISION LAUE ORIENTATION. W.A. Keller, Edmund Ratajczyk**  
and Maria das Graças Martins - Instituto de Física, UFBA, Salvador, Ba.

A new version for Laue orientation has been developed to substitute Greninger chart by iterative computer program. Instead three spots are arbitrarily chosen in standard method, all available reflections are used in the program. This one, besides orientation calculates also the effective crystal-film distance. This last determination removes the main part of systematic errors and allows the better evaluation of remaining causal errors.

Orientation angles are obtained in consecutive two-level iterations; for orientation and distance respectively. When the experimental set of normals is brought to the "best" coincidence with that set of normals of a respective perfect crystal in one of its standard orientation, then the iterative process is stopped. The residual variance of angular differences between the both sets of normals is a measure of causal errors or in other words the precision attained in each particular experiment.

The program has been thoroughly tested for calculated Laue diagrams with different levels of simulated errors. The practical application of single silicon crystal's orientation enables readily to separate the "good" results from those "bad" ones.

CRI - 15

**SELF-CONSISTENT STRUCTURE FACTOR. W.A.Keller and Dionisios Soares de Vasconcelos**, Instituto de Física, UFBA., Salvador, Ba.

Diffraction of two electromagnetic plane waves with a set of parallel planes of induced dipoles, analysed under the self-consistency requirement, can be described by means of two equations in which appear terms corresponding to structure factors  $F_a$  and  $F_b$  for the first and  $F_c$  and  $F_d$  for the second, respectively. These terms are defined conventionally as the Fourier Transforms of the charge density function. However, it has arisen additional parts in mathematical expressions that make energy to be conserved not only for the whole stack of dipole-planes but also locally among the planes.

CRI - 16

## ATENUAÇÃO DE RAIOS-X EM SILÍCIO

DESAR CUSATIS - DEPTO DE FÍSICA DA UFPR

Mediu-se o coeficiente de atenuação de raios-x em silício para vários comprimentos de onda com precisão da ordem de 0,1%. Mostra-se que é necessário uma série de cuidados na medida das intensidades e espessuras envolvidas no método utilizado (intensidades com amostra e sem amostra no feixe) para se atingir aquela precisão.

É discutido o uso do mesmo método para a medida do coeficiente de atenuação para outros cristais "perfeitos" e para cristais mosaicados.

CRI - 17

"APLICAÇÃO DO MÉTODO MONTE CARLO NA SIMULAÇÃO DA MICROSSONDA ELETRÔNICA" Gerald Weber e Carlos Alberto Ribeiro - (Laboratório de Pesquisas em Dispositivos, IFGW - UNICAMP)

Simulamos as trajetórias dos elétrons que compõem a microsonda eletrônica de um microscópio eletrônico de varredura. Para tal propomos o seguinte modelo:

- Perda de energia ao longo da trajetória segundo Betho
- O livre caminho médio dos elétrons segundo Lilljequist
- Espalhamento Rutherford com ajuste empírico

Partimos para a elaboração de um programa de computador para iniciar os testes do nosso modelo.

Os testes avaliaram as distribuições angulares dos elétrons retroespalhados, o alcance máximo dos elétrons no interior da amostra e a distribuição da energia dissipada pelos elétrons em termos de profundidade. Aplicamos esta simulação com bastante sucesso também a estruturas mais complexas de amostras, como um laser de heteroestrutura dupla de arseneto de gálio. (FAPESP - Telebrás S.A.)

CRI - 18

## ESTUDO DO POLIMENTO QUÍMICO DE SILÍCIO PARA FABRICAÇÃO DE DISPOSITIVOS ÓPTICOS DE RAIO-X.

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

Na fabricação de dispositivos ópticos para Raio-x e em especial de interferômetros é necessário obter-se lâminas de silício com bastante uniformidade na superfície, evitando ao máximo os arredondamentos nas bordas, o que produziria a perda de contraste devido as diferentes espessuras atravessada pelo feixe.

Construiu-se uma série de 8 interferômetros, rígidos, idênticos, cortados de um mesmo bloco de silício livre de deslocções. Cada interferômetro foi polido quimicamente em solução de HF e HNO<sub>3</sub> em intervalos de tempo mínimo de 1 minuto e durante vários minutos. Entre um polimento e o seguinte, mediu-se o contraste e observou-se o Padrão das franjas de interferência em função do tratamento submetido.

São apresentados os resultados obtidos e destes inferiu-se o tempo de polimento químico necessário para obter-se as lâminas de interferômetro livre de tensões que se originam durante a confecção dos mesmos no processo de corte.

\* Atualmente no DFCM - IFQSC - USP.

CRI - 19

CAMARA DE EXAFS DISPERSIVA COM MONOCROMADOR COM FOCALIZAÇÃO SAGITAL

HELIO C.N.TOLENTINO E A.RICARDO D.RODRIGUES (IFQSC - SÃO CARLOS)\*

A obtenção de espectros de EXAFS (Extended X-ray Absorption Fine Structure) com tubos de raios-x convencionais pelo sistema varredura ponto a ponto em energia leva a um tempo de aquisição de dados em torno de 20 a 30 horas.

Utilizando EXAFS no modo dispersivo e monocromador com focalização sagital pretendemos reduzir este tempo de aquisição por um fator de ordem de 1000.

Para estudar a viabilidade do novo tipo de câmara foram obtidos, através de uma montagem improvisada, espectros de EXAFS para o Cu. A análise posterior permitiu obter informações estruturais de boa qualidade.

Será apresentado o projeto de um equipamento, atualmente em construção, que utilizará o mesmo princípio de focalização e dispersão para obtenção de espectros de EXAFS de elementos com número atômico de 22 a 50.

\* Trabalho parcialmente desenvolvido do UF-UFPR.

CRI - 20

DETECTORES DE RAIOS X SENSÍVEIS A POSIÇÃO.

Ademir Laudo Barbosa, André Gabriel\* e Aldo Craievich  
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas. (\*) EMBL/ILL, Grenoble.

Expor-se-á o andamento de um projeto de desenvolvimento e construção de detectores de raios x proporcionais e sensíveis à posição para aplicações em experiências de espalhamento e difratometria de polícristais (unidimensional) e em difratometria e espalhamento por monocristais (bidimensional).

## **VI.5 - DEFEITOS, CRESCIMENTO E CARACTERIZAÇÃO DE CRISTAIS**

**Coord.:- Prof. Alfredo Gontijo de Oliveira (UFMG)**

DEF - 01 ESTUDO DA NATUREZA DAS TRANSIÇÕES DE FASE NO  $\text{LiNH}_4\text{SO}_4$ . Antonio Roberto Mendes Martins, José Mendes Filho, Francisco Erivan de Abreu Melo, José Evangelista C. Moreira, Francisco Alcides Germano; Depto. Física UFC.

O  $\text{LiNH}_4\text{SO}_4$  exibe no regime de baixas temperaturas as seguintes transições de fase: A primeira delas<sup>1</sup> acontece a uma temperatura de 248k acompanhada de uma forte histerese levando a simetria do cristal do grupo  $C_{2v}$  para uma simetria ainda não bem determinada.

A outra transição<sup>2</sup> acontece a 28k e tem simetria bem definida. Estamos estudando através de medidas de constante dielétricas e espalhamento Raman dependente da temperatura e podemos constatar que  $\text{LiNH}_4\text{SO}_4$  experimenta no intervalo de 248k a 28k pelo menos mais uma transição, que pode ter o carácter incomensurável, já que este material obedece os critérios de Lifchitz.

1. H. Foullet, J.P. Mathieu; Sol. State Commun, 21, 421 (1977)
2. T. Simonson, J. Denyer and R. Morat; J. de Physique 45, 1257 (1984)

DEF - 02 RELAXAÇÃO DIELÉTRICA EM CRISTAIS MISTOS DE  $\text{KCN}_x:\text{KBr}_{1-x}$   $0.5 \leq x \leq 1.0$ . Máximo Siu Li (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP).  
 Estudamos o comportamento de relaxação do dipolo elétrico  $\text{CN}^-$  nessas matrizes hospedeiras usando técnicas de corrente de despolarização termoestimulada (TSDC, ITC), com o que observamos picos de relaxação em 43K para o KCN puro, até 13K em  $\text{KCN}_{50}:\text{KBr}_{50}$ .  
 As energias de ativação também se comporta de maneira análoga com valores de 0.16 eV para o KCN até 0.05 eV para  $\text{KCN}_{50}:\text{KBr}_{50}$ . Pelos cálculos prévios, os primeiros ajustes das curvas experimentais sugerem a existência de mais de uma distribuição tipo Havriliak-Nagami que satisfaz unicamente para KCN puro, pelo que propomos o ajuste das outras com mais de uma função de distribuição. O comportamento, mostrado pelos resultados, indicam que nestes sistemas os dipolos elétricos se comportam classicamente com certa distribuição complexa, sendo que uma das formas para determinar se o sistema é homogêneo ou inhomogêneo é através de ITC pulsado.

DEF - 03

REORIENTAÇÃO DE CENTROS  $F_2^+$  INDUZIDA PELO ION  $\text{OH}^-$  EM  $\text{KCl}$ , Laércio Gomes, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN-CNEN/SP

A presença de íons  $\text{OH}^-$  substitucionais em matrizes de  $\text{KCl}$  ( $\text{M}_{\text{OH}}/\text{M}_{\text{Cl}} = 10^{-3}$ ), coloridas aditivamente, produz uma rápida reorientação do centro  $F_2^+$  opticamente excitado na sua transição  $1S_0 \rightarrow 2P_{1/2}$ . O tempo médio de reorientação desse centro que no equilíbrio térmico com a rede à 10K é praticamente infinito cai para ~ 2 segundos na presença do íon  $\text{OH}^-$ . Em consequência disso, os pares de defeitos  $F_2^+, \text{OH}^-$  mais próximos apresentam somente a emissão em 1670 nm ( $2P_{1/2} \rightarrow 1S_0$ ) sendo que a emissão em 603 nm ( $2P_{3/2} \rightarrow 1S_0$ ) é suprimida.

DEF - 04 EXCITAÇÕES MOLECULARES EM SISTEMAS MISTOS DE KCN,  $Cl_{1-x}$ , S.S. Canaygo Jr. e J.P. von der Weid - Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Os espectros de luminescência e vidas médias associadas às transições vibrônicas  $A^1\pi \rightarrow X^1\Sigma^+$  do íon molecular  $CN^-$ , foram medidos utilizando-se técnicas de radiação luminescência e catodoluminescência em cristais mistos de  $KCN, Cl_{1-x}$ , para diversas concentrações  $x$  e temperaturas entre 4K e 450K. Para altas concentrações ( $x \geq 0,2/D, 3$ ) observa-se o decréscimo dos tempos de vida e intensidade da luminescência além das baixas temperaturas, indicando que transições não radiativas são ativadas tipicamente. Este comportamento é descrito por uma energia de ativação pouco dependente da concentração ( $U \approx 40meV$ ) e é devido à migração da excitação através do cristal. Para baixas concentrações de  $CN^-$  ( $x \leq 0,01$ ) a luminescência se mantém até além da temperatura ambiente e cai com uma energia de ativação bastante maior ( $U = 0,63eV$ ), indicando que mecanismos não radiativos internos ao íon molecular  $CN^-$  são ativados. Os cristais com concentração intermediária apresentam duas ou mais energias de ativação, assim como mais de um tempo de decaimento que estão ligados aos diferentes tamanhos de aglomerados de  $CN^-$  existentes no cristal.

DEF - 05

RESPOSTA DIELÉTRICA EM CRISTAIS DE KCN A ULTRA-BAIXAS FREQUÊNCIAS. Ervino Carlos Ziemath e Michel André Aegerter, Instituto de Física e Química de São Carlos - Universidade de São Paulo.

A resposta dielétrica de cristais de KCN puro ( $\epsilon'$ ,  $\epsilon''$  e  $\tan \delta$ ) foi medida em função da temperatura no intervalo de  $10^{-2}$  a  $10^4$  Hz. Na fase antiferroelétrica a largura dos picos da perda são praticamente independentes da temperatura (1,4 décadas) e próximos de um comportamento da Debye; o tempo da relaxação dos dipolos  $CN^-$  é caracterizado por um comportamento de Arrhenius  $\tau = \tau_0 \exp(U/RT)$  com  $\tau_0 = 7,26 \times 10^{-15}s$  e  $U = 0,147$  eV, o que confirma a reorientação clássica ativada, termicamente dos dipolos.

DEF - 06

ESTUDO DE FOTOCONDUZIVIDADE DE CENTROS DE COR EM CRISTAIS DE KCN. Teresa Del Soldato (Deptº de Física - PUC/RJ)

A fotocondutividade dos halogenatos e cianetos alcalinos com centros da cor são baseadas na existência de estados excitados associados a estes centros existentes no "gap" entre as bandas de valência e de condução a aproximadamente  $10$  a  $15$  meV desta.

São apresentados resultados de medidas de fotocondutividade de cristais de KCN e KBr com centros F.

DEF - 07

ESTUDO DE MODELOS ANARMÔNICOS DE  
CRISTAIS IMPERFEITOS  
Jose Nicodemus Teixeira Rebelo

Neste trabalho, pela primeira vez se estuda de um único ponto de vista os efeitos anarmônicos em cristais com diversos tipos de defeitos. São obtidas fórmulas para a distorção da rede nas vizinhanças dos defeitos e para as amplitudes efetivas das vibrações anarmônicas. São obtidas também expressões para as energias livres e outras funções termodinâmicas. São estudados modelos simples de cristais com impurezas, vacâncias e superfícies. Conclui-se que a anarmonicidade tem papel decisivo nos efeitos tais como a dependência entre a distorção da rede e a temperatura e a ação dos defeitos nas propriedades caloríficas dos cristais.

DEF - 08

DISPERSÃO DO CENTRO  $F_2^+$  EM CRISTAIS DE  $KCl:SH^-$ . Dario Antonio Donatti e Michel André Aggerter, Faculdade de Engenharia - Campus Ilha Solteira - UNESP; Instituto de Física e Química de São Carlos - Universidade de São Paulo.

A dispersão devido ao centro  $F_2^+$  em cristais de KCl foi determinada a temperatura de hélio líquido através de uma técnica elipsométrica utilizada nas propriedades de polarização da transição  $1s^2g - 2p^2u$ . A variação máxima do índice de refração é expressa como função da constante de absorção dióptica pico a pico  $\alpha_d(\text{cm}^{-1})$ , e é dado por  $(n_{\parallel} - n_{\perp})_{\text{max}} = (3.4 \pm 0.2) \cdot 10^{-6} \alpha_d$  para  $E = 0.85 \text{ eV}$  e  $(n_{\parallel} - n_{\perp})_{\text{max}} = (2.35 \pm 0.2) \cdot 10^{-6} \alpha_d$  para  $E = 0.94 \text{ eV}$ . Os resultados são comparados com a teoria desenvolvida por Dexter.

DEF - 09

PROPRIEDADES TERMOLUMINESCENTES DE ALGUMAS RESINAS ACRÍLICAS

J. E. RODAS DURAN, \*D. VINHA e \*H. FANZERI. (Dpto. de Física da Faculdade de Filosofia, Ciên. e Let. de Ribeirão Preto-USP. 14100 Rib. Preto, SP. \*Faculdade de Odontologia de Ribeirão Preto-USP)

Algumas das resinas acrílicas usadas em restaurações odontológicas, apresentam propriedades termoluminescentes. Foram escolhidos quatro tipos de resinas (Dencor, Ivoclar, Clássico e Plastolain) para serem estudadas sua intensidade termoluminescentes (TL) em função da exposição da radiação-X a que são submetidas.

As amostras após de preparadas foram cortadas em forma de lâmina finas de 1mm de espessura e 3 x 3mm de seção transversal. A relação linear encontrada entre a resposta da intensidade termoluminescente e a exposição é diferente para cada uma destas resinas, sendo que em comum achamos que a relação intensidade termoluminescente/exposição, apresenta valores pequenos. Estes valores são aumentados quando as resinas são misturadas em diferentes porcentagens com esmalte em pó e/ou quartzo natural em pó. Estes últimos resultados são os que apresentam interesse maior, já que, a amostra resultante da mistura de resina acrílica + esmalte em pó e/ou quartzo em pó, pode ser usado como elemento medidor da dose de radiação-X.

DEF - 10

LASER DE CENTROS  $F_2$  EM LiF:MG. Paulo Toshio Udo, Nilson Dias Vieira Junior, Wagner de Rossi e Spero Penha Morato. - IPEN/CNEN/SP.

Este trabalho descreve a construção de um laser de centro de cor baseado na emissão luminescente do centro  $F_2$  num cristal de LiF:MG. A ação laser pretendida já foi anteriormente em amostras finas à temperatura ambiente por bombeamento com um dye laser pulsado na banda de absorção do  $F_2$  no LiF (1). Estamos desenvolvendo uma nova configuração baseada no emprego de um bastão de LiF cilíndrico, no qual foram produzidos por irradiação  $\gamma$   $10^{17}$  centros  $F_2$   $\text{cm}^{-3}$ . Esta cavidade é do tipo difusa e emprega uma lâmpada flash de Xe.

(1) N.D. Vieira Jr., I.M. Ranieri and S.P. Morato, phys. stat. sol. (a) 73, K115 (1982).

DEF - 11

SIMULAÇÃO NUMÉRICA E HIDRODINÂMICA DA CONFIGURAÇÃO CZOCHRALSKI

Adriano Roberto Donadel, Luis Vicente de Andrade Scalvi e Bernhard Joachim Mokros - Instituto de Física e Química de São Carlos

O escoamento da fase líquida no crescimento de silício pelo método Czochralski é de observação praticamente impossível devido às altas temperaturas. Para se compreender os fenômenos de transporte nesta fase, torna-se necessária a utilização de simulações numéricas e/ou experimentais. A importância de um conhecimento das distribuições de velocidades e de temperatura na fase líquida está relacionada com a incorporação de impurezas e/ou de dopantes no cristal em crescimento e, consequentemente, com a geração de defeitos. Foi realizada uma simulação utilizando o método dos Elementos Finitos para o silício. Para se testar a eficiência do método, vem sendo realizada, paralelamente, pela técnica da Anemometria Doppler Laser (ADL), a simulação experimental. Tem-se utilizado como fluido de trabalho, nos experimentos atuais, uma mistura de água com dietanolamina ( $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$  2), cujas características foram incorporadas pela simulação numérica. A ADL tem demonstrado ser a única técnica precisa capaz de conseguir bons resultados sem perturbar o fluxo. A comparação entre os resultados ADL com os da simulação numérica, permitirão concluir sobre a qualidade desta, estabelecendo segurança nos parâmetros calculados para o silício.

DEF - 12

ESTUDO ANALÍTICO E MONTE CARLO DA RUGOSIDADE SUPERFICIAL

Marco Antonio Alves da Silva, Bernhard Joachim Mokros e Antonio Caliri - Instituto de Física e Química de São Carlos

Neste trabalho apresentamos uma solução analítica aproximada da rugosidade, válida para alta temperatura ( $T > T_T$ ,  $T_T$ : temperatura de transição da rugosidade). O resultado é obtido através da aplicação de uma técnica do tipo "Migdal-Kadanoff". Simulação Monte Carlo é feita e comparada com a solução analítica.

DEF - 13

## DINÂMICA DE CRESCIMENTO DE CRISTAIS ESTUDADA POR MEIO DE ESPALHAMENTO DE LUZ -

O.N. Mesquita, L.O. Ladeira e G.A. Barbosa - Departamento de Física, Instituto de Ciências Exatas Universidade Federal de Minas Gerais

Informações à nível microscópico e quase microscópico sobre a dinâmica de crescimento de cristais tem sido obtidas com o uso da técnica de espalhamento quase-elástico de luz (correlação de fótons). Esta técnica já foi aplicada com sucesso em estudos da dinâmica de solidificação de alguns cristais. Está em curso no nosso Laboratório de Espalhamento de Luz experimentos visando o estudo da interface cristal-vapor de cristais em crescimento com vistas a medidas da dinâmica da transição rugosa (roughening transition). Estes seriam os primeiros resultados no mundo sobre a dinâmica desta transição. Estudos estão sendo feitos nos cristais  $C_2Cl_6$  (hexacloroetano) e  $C_{12}H_{10}$  (difenil).

DEF - 14

## APLICAÇÃO DE RADIAÇÃO SINCROTRON NA DISPERSÃO ANÔMALA DOS RAIOS X

PARA DIFERENCIAÇÃO DOS GEMINADOS DO TIPO BRASIL EM AMETISTA. Z. Baran, Instituto de Física, UFBA., Salvador - Bahia.

Em trabalho anterior (Z. Baran et al., X-Ray Study of Brazil Twins in Natural Amethyst, submetido a Phys. Stat. Sol., 1985) foi feita a comparação entre a fotomicrografia em luz polarizada e a topografia de raios X por reflexão com a radiação  $Cu K_{\alpha}$ , da face romboidica da ametista, apresentando uma sequência de lâminas levôginas e dextrôginas. Assim o enantiomorfismo é evidente pois estão presentes as lâminas da cristal direito e esquerdo arranjadas alternadamente. Para distinguir por meio de raios X essas duas estruturas enantiomorfas foi aproveitado o efeito da dispersão anômala dos raios X. A fim de obter um conhecimento mais completo possível sobre este tipo de geminados é necessário estudá-lo pela topografia por transmissão. Este método deveria nos permitir caracterizar as lâminas de germinação contidas no interior de uma placa de cristal de 2mm de espessura. Neste caso porém é indispensável empregar a radiação sincrotron devido a alta absorção da radiação de  $\lambda = 2,29\text{\AA}$  - pela placa de ametista.

Pretendemos discutir uma possível modificação do efeito Serrmann pela dispersão anômala e também o problema da lei de Friedel na teoria dinâmica da difração de raios X.

DEF - 15

"CARACTERIZAÇÃO DE CAMADAS DE GaAs/GaAlAs POR CxV ELETROQUÍMICO CONJUGADO A FOTOLUMINESCÊNCIA A BAIXA TEMPERATURA". Maria Salete Sartório Loural, Mario Tozi Furtado, Antonio de Campos Sachs, Paulo Motisuke - CPqD-Telebrás.

É de indiscutível importância em crescimento de camadas de GaAs/GaAlAs por LPE para lasers semicondutores, a caracterização do restor e das camadas crescidas. Uma das linhas de caracterização seguidas no CADO-CPqD é a de medida de dopagem residual por CxV eletroquímico em camadas crescidas, relativamente espessas, não internacionalmente dopadas e a identificação dessas impurezas por fotoluminescência a 2 K. A análise em conjunto das duas medidas nos auxiliam na obtenção de lasers de heteroestrutura dupla de GaAs/GaAlAs com alta confiabilidade. Além disso, por CxV eletroquímico obtemos o traçado do perfil de dopagem dos cristais crescidos para fabricação de lasers, que é um método muito útil na estimativa da dopagem de todas as camadas crescidas e na caracterização das interfaces.

DEF - 16

CARACTERIZAÇÃO DE "LASCAS" DE QUARTZO. C.K. Suzuki, F. Iwasaki, H. Iwasaki, D.C.A. Hummel, A.H. Shinohara, V.A.R. Oliveira e D. Torikai. UNICAMP, Instituto de Física.

Ainda hoje as "lascas" de quartzo brasileiro são classificadas apenas por método visual de acordo com o seu grau de transparência (por ex., 1a., mista, 2a., 3a., etc), sem nenhum controle em bases científicas apesar da sua importância estratégica como insumo básico para a indústria de alta tecnologia.

Relatamos alguns resultados de um estudo integrado usando técnicas diversas de caracterização, tais como topografia e goniometria de raios-X, medidas de densidade pelo método de Arquimedes, micrografia óptica, análise de impurezas por espectroscopia de absorção atômica e análise ultrasônica. A concentração de impurezas entre lascas graduadas de 1a. a 4a., provenientes de duas jazidas foram comparadas para oito tipos de impurezas (Al, Ti, Fe, Mn, Cr, Cu, Mg e Li) verificando-se a não correlação com as graduações. Observou-se entretanto, através de outras técnicas mencionadas variações na cristalinidade, densidade de cracks e inclusões com a graduação das lascas. O presente estudo constitui-se numa importante contribuição ao entendimento das propriedades das lascas e também para se adquirir conhecimento no desenvolvimento de sementes para quartzo sintético.

(\*) JICA, Japan International Cooperation Agency

DEF - 17

IMPLANTAÇÃO DE Sb POR RECUCO EM SILÍCIO POR BOMBARDEAMENTO COM IONS DE GERMÂNIO.

R. Erichsen Jr., C.M. Rasenack, J.P. de Souza e I.J.B. Baumvol - Instituto de Física, UFRGS.

Amostras de silício monocristalino contendo filme fino de antimônio de 60 nm de espessura depositado sobre sua superfície foram bombardeadas com ions de germânio para promover implantação por recuco de átomos de Sb. Estudou-se a influência dos parâmetros da implantação sobre a eficiência do processo de implantação por recuco e sobre o perfil em profundidade dos átomos recucados no silício. Pela escolha do germânio como projétil, conseguiu-se perfeita recristalização da camada bombardeada e elevado grau de substitucionalidade do Sb após recucamento térmico rápido. A análise das amostras foi realizada empregando-se a técnica RES (Rutherford Backscattering) em direção aleatória e em direção alinhada (channeling).

DEF - 18

DIFUSÃO DE Sn EM GaAs:Cr USANDO FONTE DE  $\text{SiO}_2:\text{Sn}$ . Thebano Emílio

de Almeida Santos e Mauro Monteiro Garcia de Carvalho, LPD - UNICAMP.

É feito em estudo sobre difusão de estanho em GaAs dopado com Cr (semi-isolante) através de técnica que utiliza filme de  $\text{SiO}_2:\text{Sn}$  depositado sobre a amostra. Neste estudo, evidencia-se as influências da conversão de GaAs dopado com Cr e das vacâncias de Ga. Os métodos principais de caracterização utilizados neste estudo foram c - v eletroquímico e Efeito-Hall com decapagem de camadas.

DEF - 19

ESTUDO DA CINÉTICA DE PRECIPITAÇÃO DO OXIGÊNIO EM MONOCRISTAIS DE Si:B A PARTIR

DE TÉCNICAS DE RAIOS X: D.A.P. Bulla, W.E. de Castro Jr., V. Stojanoff, C.A. Pimentel (Instituto de Física da USP) e S. Hahn (Siltec Corp.)

O Oxigênio e o Carbono são os principais dopantes não intencionais em monocristais de silício crescidos pelo método Czochralski (CZ). Normalmente, a concentração de O está bem acima de seu limite de solubilidade o que acarreta a sua precipitação quando os cristais são submetidos a processamentos térmicos. Apesar dos evidentes efeitos deletérios da precipitação do O no Si os efeitos benéficos não são tão óbvios além de difícil reprodução. Estes defeitos (precipitados) são estudados em monocristais de Si livres de discordâncias, crescidos pelo método CZ, dopados com Boro por difusão durante o crescimento e submetidos a diversos tratamentos térmicos; empregando-se neste estudo técnicas de Raios X (Perfil de Linha e EPRX). Este trabalho tem por objetivo estudar esses defeitos e contribuir para uma melhor compreensão da cinética de precipitação do Oxigênio. Pretende-se discutir os resultados obtidos.

DEF - 20

DEFEITOS RESIDUAIS EM SILÍCIO IMPLANTADO COM ÍONS DE Ga, In, As, Sb, Ge, Sn e Pb SUBMETIDO A RECOZIMENTO TÉRMICO RÁPIDO.

C.M. Basenack, J.P. de Souza e I.J.R. Baumvol - Instituto de Física, UFGS.

Estudou-se a densidade e distribuição espacial de defeitos residuais em amostras de silício monocristalinas implantadas com íons de elementos químicos das colunas III, IV e V da tabela periódica e submetidas a recozimento térmico rápido. Empregou-se doses variando entre  $10^{15}$  e  $3 \times 10^{16}$   $\text{cm}^{-2}$  a energias entre 80 e 120 keV. Nos ciclos de recozimento a temperatura e duração situaram-se no intervalo de 850 a 1200°C e de 10 a 120 s respectivamente. Observou-se que a densidade e distribuição espacial dos defeitos residuais dependem da espécie química implantada e que ciclos de recozimento que induzam redistribuição do perfil de implantação por difusão térmica acarretam supressão eficiente destes defeitos. Utilizou-se como técnica de análise o retroespalhamento elástico de partículas alfa em direção de incidência aleatória e alinhada (channeling).

DEF - 21

DETERMINAÇÃO DE ESTÁGIOS DOS COMPOSTOS DE GRAFITE INTERCALADOS.

A.A. BERNUSSI; M.P. DA SILVA E G.M. GUALBERTO. Instituto de Física "Gleb Wataghin" UNICAMP.

A partir de um fator de Estrutura previamente calculado, obtém-se uma expressão aproximada da Intensidade Relativa espalhada pela difração de raios-x nos Compostos de Grafite Intercalados (CGIs). Comparando-se com os resultados experimentais para os intercalantes  $\text{FeCl}_3$  e  $\text{ZnCl}_2$ , determina-se o índice de estágio desses compostos.

DEF - 22

ESTUDOS DE SÍNTESE, CRISTALINIDADE E PROPRIEDADES DE MATERIAIS LAMELARES DERIVADOS DO FOSFATO DE ZIRCÔNIO(IV). Oswaldo Luiz Alves. GEQV - Grupo de Espectroquímica Vibracional, Instituto de Química, UNICAMP.

Os materiais contendo estruturas lamelares têm recebido grande atenção nos últimos 15 anos como consequência da sua bidimensionalidade induzir uma série de propriedades químicas (troca iônica, separação, catálise, etc) e físicas (semi e super condutividade, superionidade, etc) não-usuais. Se por um lado as propriedades químicas serem devidas ao fato das forças intralamelares serem muito mais fortes que as forças de Van der Waals interlamelares dando lugar as chamadas reações de intercalação, por outro, as propriedades físicas vem do fato destas estruturas bidimensionais conferirem a estes materiais uma elevada anisotropia.

Foram preparados materiais com estas estruturas do tipo  $\alpha$ -Zr(PO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>·nH<sub>2</sub>O com diferentes cristalinidades, que foram caracterizados por raios-X, IV, Raman, Área superficial e comportamento térmico. Estes compostos poderão ser utilizados como precursores para outras famílias de condutores sólidos protônicos do tipo NASICON. Os resultados estão sendo analisados visando uma base para interpretação das relações entre estequiometria, estrutura e propriedades dos materiais sintetizados.

DEF - 23

CRESCIMENTO E CARACTERIZAÇÃO DE MATERIAIS SEMICONDUTORES PARA CÉLULAS FOTOELETROQUÍMICAS. P. CERDEIRA, I.L. TORRIANI, V. LEMOS, P. MOTISUKE E F. DECKER. Instituto de Física - UNICAMP.

Filmes policristalinos de CdSe foram crescidos por dois métodos diferentes: (a) de posição química (CD) e (b) eletrodeposição (ED). Os filmes de CdSe obtidos por deposição química apresentam uma cor avermelhada, em contraste com os eletrodepositados que são pretos. Esta cor está associada a um "gap" de energia de 2.06 eV, em contraste com o valor de 1.73 eV apresentado pelo CdSe monocristalino ou as amostras policristalinas obtidas por eletrodeposição. Fizemos um estudo de espalhamento Raman, Fotoluminescência e Difração de Raio X nestas amostras em função do tempo e temperatura de recozimento. Desta forma conseguimos acompanhar a evolução do gap de energia e o tamanho de grão em função da temperatura de recozimento. O controle destes parâmetros é de fundamental importância no desempenho das células fotoeletroquímicas.

DEF - 24

CRESCIMENTO DE MONOCRISTAIS DE GaAs PELO MÉTODO DE BRIGMAN-Mauro M.G. de Carvalho, Clóvis M. de Oliveira - O crescimento de monocristais de GaAs apresenta uma certa dificuldade devido à alta pressão de vapor de As na temperatura de crescimento (1240°C). No método do Brigman, este problema é contornado com um perfil apropriado de temperatura do forno. Apresentaremos uma descrição dos problemas e soluções que encontramos na construção de um sistema de crescimento de GaAs pelo método de Brigman. Neste sistema, procuramos utilizar somente equipamentos nacionais e/ou desenvolvidos no próprio laboratório.

DEF - 25

**DIFRATÔMETRO DE RAIOS-X DUPLO-EIXO PARA CARACTERIZAÇÃO DE CRISTAIS**  
**A. RICARDO O. RODRIGUES\* E IRINEU MAZZARO - DEPTº DE FÍSICA/UFPR**

Um difratômetro duplo-eixo construído no DF-UFPR será apresentado. Esse difratômetro foi desenvolvido principalmente para topografia de raios-x duplo-cristal e estudo de perfis de reflexão Bragg, duas técnicas importantes para a caracterização de defeitos de crescimento em cristais. Alguns resultados obtidos com o equipamento serão mostrados para exemplificar as suas possibilidades.

\* Atualmente do DFCM - IFQSC - USP.

## **VI.6 - FÍSICA ESTATÍSTICA E FENÔMENOS CRÍTICOS**

**Coord.:- Prof. Mário José de Oliveira (IFUSP)**

EST - 01

### MODELO DE ISING BIDIMENSIONAL NA REDE TRIANGULAR

O modelo de Ising com interações entre primeiros e segundos vizinhos na rede triangular bidimensional não foi ainda resolvido analiticamente (existem cálculos de MC apenas). Tal modelo é o ideal para o estudo de gases adsorvidos e portanto de bastante interesse prático além de teórico. Um método aproximado de solução usando técnicas de Grupo de Renormalização será discutido juntamente com alguns resultados preliminares.

Evandro V. Lins de Mello (PUC/RJ)

EST - 02

### GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO PARA O MODELO DE ISING NA REDE TRIANGULAR

Alex H. Lacerda e Francisco G. Brady Moreira - Departamento de Física, UFPE

Com o Grupo de Renormalização no espaço real, a técnica de dizimação é utilizada para o estudo das propriedades críticas e das funções termodinâmicas para o modelo de Ising na rede triangular com interações ferro ou antiferromagnéticas. No caso de interações antiferromagnéticas, o sistema é totalmente frustrado e diferentes transformações de renormalização são consideradas. (CNPq)

EST - 03

### FINITE-SIZE SCALING PARA MODELO DE ISING COM INTERAÇÕES ALEATÓRIAS

F.C. Alcaraz e J.R. Drugowich de Felício, Departamento de Física e Ciência dos Materiais do Instituto de Física e Química de São Carlos da Universidade de São Paulo

Levanta-se o diagrama de fases para uma cadeia de Ising, em campo transversal, com interações distribuídas segundo

$$P(\Gamma_1) = p\delta(\Gamma - \Gamma_1) + (1-p)\delta(\Gamma - \Gamma_2).$$

Esse modelo corresponde ao modelo de Ising bidimensional com interações aleatórias considerado por McCoy no volume 2 de coleção Domb & Green.

EST - 04

O MODELO DE ISING BIDIMENSIONAL COM CAMPO TRANSVERSO (NICT) E DILUIÇÃO ANISOTRÓPICA NAS LIGAÇÕES: TRATAMENTO VIA O GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO DE CAMPO MÉDIO

(GRCM). - E.C. Valadares

Estudamos o NICT na rede quadrada em  $T=0K$ , com duas distribuições independentes para as ligações ao longo dos eixos  $x$  e  $y$ , com respectivas concentrações  $P_x$  e  $P_y$ . Empregamos aglomerados de um e quatro spins que fornecem os limites unidimensionais corretos ( $P_x=1, P_y=0$ ) e ( $P_x=0, P_y=1$ ) no  $pl_{\alpha}$  no  $g=0$  (Limite de Ising),  $g=r/J$ ,  $r$  campo transversal e  $J$  o acoplamento. A simetria entre  $P_x$  e  $P_y$  ( $P_x \leftrightarrow P_y$ ) é preservada, mas não a de dualidade ( $P_x \leftrightarrow 1-P_y$ ), devido à quebra de simetria introduzida pela aproximação de campo médio. O diagrama de fases no espaço  $(P_x, P_y, g)$  obtido reproduz qualitativamente o de Rita M. Z. dos Santos e R.R. dos Santos, obtido através do Grupo de Renormalização no Espaço Real (Comunicação Privada).

EST - 05

FERROMAGNETO DE POTTS EM REDE CÚBICA SIMPLES SEMI-INFINITA:

CRITICALIDADE.

L.R.da Silva\*, C.Tsallis\*\* e E.F.Sarmiento\*\*

\* Departamento de Física, UFRN, 59.000 - Natal - RN

+ Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF, 22.290 - Rio de Janeiro - RJ

\*\* Departamento de Física, UFAI, 57.000 - Maceló - Al.

Dentro de um formalismo de Grupo de Renormalização no espaço real, discutimos o modelo de Potts de  $q$ -estados, ferromagnético, em uma rede cúbica simples semi-infinita com constantes de acoplamento  $J_B$  para o volume e  $J_S$  para a superfície. As ligações da superfície satisfazem a uma distribuição de probabilidades binária, tendo uma chance  $p$  de estar presente e  $1-p$  de estar ausente (diluição). Estudamos a evolução das propriedades críticas deste sistema com a diluição.

EST - 06

CRITICALIDADE DO FERROMAGNÉTICO DE HEISENBERG ANISOTRÓPICO DE VOLUME SEMI-INFINITO. - Uriel M.S.Costa, A.M.Maris e C.Tsallis - Universidade Federal de Alagoas.

Utilizamos uma aproximação de grupo de Renormalização do tipo Migdal-Kadanoff para estudar o comportamento crítico de um volume semi-infinito com interações ferromagnéticas anisotrópicas (no espaço de spins) de Heisenberg. O diagrama de fases apresenta três fases (a paramagnética, a ferromagnética de volume e a ferromagnética de superfície), as quais se juntam em um ponto multicrítico. Calculamos a localização deste ponto em função das anisotropias de volume e da superfície. Exibimos as várias classes de universalidade do sistema.

EST - 07

TRANSIÇÕES DE FASE EM MODELO ISING COM UMA ARESTA: GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO.  
V.K. Saxena. (Departamento de Física, UFSC - Florianópolis-SC).

Neste trabalho, estudamos transições de fase e fenômenos crítico em sistemas  $sp$ - $nl$ -infinitos, limitados por dois planos perpendiculares que se convergem em uma aresta. O método do grupo de renormalização de Migdal-Kadanoff é aplicado incorporando-se a assimetria geométrica do sistema nas superfícies livres e na aresta. Analisando-se as relações das recursões entre vários parâmetros do sistema, determinou-se pontos fixos e diagramas de fluxo que representam vários tipos de transições de fase. Construiu-se curvas críticas para vários valores das interações dos spins em superfícies e na aresta. Exponentes foram calculados e classes de universalidades foram estabelecidas. Finalmente, concluiu-se, como já conjecturado há dois anos atrás por alguns autores para dimensões  $d \geq 4$ , que em  $d=3$ , dependendo dos valores relativos das interações na aresta, na superfície e no volume, a aresta pode ordenar-se ferromagneticamente antes da superfície e do volume.

EST - 08

CRITICALIDADE DO MODELO DE ISING SEMI-INFINITO, João Antônio Plascak, Universidade Federal de Minas Gerais.

Estudamos o modelo de Ising semi-infinito com interações modificadas na superfície utilizando um método variacional para a energia livre baseado na desigualdade de Bogolubov. Diagramas de fases para o ordenamento na superfície são obtidos quando se levam em conta exatamente as interações ao longo de cadeias lineares tanto paralelas como perpendiculares à superfície.

EST - 09

EFEITOS DE TAMANHO FINITO NAS PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DO MODELO DE ISING FERROMAGNÉTICO COM INTERAÇÃO CONSTANTE - ANTÔNIO CALIRI e SYLVIO GOULART ROSA JR. - INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS.

Estuda-se os efeitos de tamanho nas propriedades de modelo de Ising ferromagnético na aproximação de campo médio. As expressões para a temperatura crítica, máximo do calor específico, máximo da susceptibilidade magnética são analisadas como função do número de spin.

EST - 10

MODELO DE HEISENBERG COMPRESSÍVEL - Jair L. Cadore e Wagner Figueiredo - Departamento de Física da Universidade Federal de Santa Catarina.

Neste trabalho estudamos as propriedades magnéticas de um modelo de Heisenberg com anisotropia uniaxial onde são levadas em conta as vibrações da rede. A interação de intercâmbio depende linearmente da distância entre os spins e o acoplamento elástico é tomado na aproximação harmônica. Pode-se mostrar que devido às relações de comutação existentes entre os operadores de spins não é possível desacoplar os graus de liberdade elásticos dos graus de liberdade de spins. Somente no caso de dois spins e na ausência de anisotropias uniaxiais é possível desacoplar esses graus de liberdade. Após uma transformação unitária de desacoplamento surge um termo biquadrático na hamiltoniana efetiva de spins. A magnetização, a função de correlação e o calor específico do sistema de dois spins são calculadas exatamente para  $S=1$  e os resultados exibidos em função do coeficiente do termo biquadrático. Pretende-se ainda determinar o diagrama de fases de um modelo antiferromagnético em função da pressão, onde as interações de intercâmbio e elásticas são tratadas no mesmo espírito do modelo de Baker e Essam.

EST - 11

MODELO BEG - TRATAMENTOS DE CAMPO MÉDIO ( VERSÃO CURIE-WEISS ) E DE GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO. Vera B. Henriques ( UFUSP ), C.E.I. Carneiro ( IEAV-CTA ) e S.R. Salinas ( IFUSP )

O comportamento crítico do modelo de spins de Blume - Emery - Griffiths para a mistura  $\text{He}^3 - \text{He}^4$  é analisado a partir da versão Curie-Weiss da hamiltoniana modelo. O ponto tricrítico conhecido só é obtido na presença do termo de íon único. O mesmo resultado é obtido no cálculo de grupo de renormalização no espaço de momentos. A transformação discreto-contínuo de Baker Hubbard, para as variáveis de spin, permite analisar a hamiltoniana reduzida em termos dos parâmetros físicos originais. No espaço par obtemos uma hamiltoniana reduzida semelhante àquela que aparece no trabalho de Nelson e Fisher para o metamagneto de Ising. O ponto fixo tricrítico é fisicamente inacessível na ausência de termo de íon único. Estes cálculos estão sendo estendidos para o modelo BEG no espaço ímpar.

EST - 12

O MODELO DE BLUME-EMERY-GRIFFITHS COMO UM PROBLEMA DE MAPEAMENTO. Cíntia P. de Barros, Instituto de Física, USP.

O modelo de Ising mais geral, de spin 1, envolvendo no máximo interações de dois corpos, pode ser escrito na forma

$$H = - J \sum_{(ij)} S_i S_j - K \sum_{(ij)} S_i^2 S_j^2 + D \sum_i S_i^2 - H \sum_i S_i - H_3 \sum_{(ij)} S_i S_j (S_i + S_j),$$

onde  $S_i = 1, 0, -1$ . Com  $H_3 = 0$ , na aproximação de campo médio, Blume, Emery e Griffiths utilizaram este modelo para explicar a existência de um ponto tricrítico em misturas de  $^3\text{He}$  com  $^4\text{He}$ . Recentemente, Oliveira e Salinas estudaram uma versão simplificada do modelo, com  $K = H = H_3 = 0$ , como um problema de mapeamento na árvore de Cayley. Generalizamos o tratamento de Oliveira e Salinas para incluir o espaço completo de cinco parâmetros. Em particular, mostramos que a introdução do termo biquadrático conduz a um mapeamento bidimensional mesmo no limite de coordenação infinita.

EST - 13

**TRANSIÇÕES DE FASE DE DEUTÉRIO ADSORVIDO EM GRAFOIL .**  
Francisco Artur Braun Chaves (UFRJ) e Maria Elena B. P. Cortez;  
 UFRJ.

Estamos determinando o diagrama de fase de-Deutério adsorvido em Grafoil através de medidas de capacidade calorífica de filmes de diferentes espessuras. Os resultados preliminares indicam semelhanças com o diagrama de fase do hidrogênio adsorvido no mesmo substrato, tendo porém algumas diferenças significativas.

Há indicações de que a região temperatura da transição de 1<sup>a</sup> ordem é 2 K superior do que a mesma no caso do hidrogênio e que a transição de 2<sup>a</sup> ordem é 2 K inferior.

EST - 14

**DINÂMICA MOLECULAR DE ELÉTRONS ADSORVIDOS EM FILME DE HÉLIO SOBRE UM SUBSTRATO.** Giomal A. Antonio e Oscar Hipólito Departamento de Física e Ciência dos Materiais do Instituto de Física e Química de São Carlos da Universidade de São Paulo.

Utilizando a técnica de Dinâmica Molecular, estudamos a natureza da transição de fase sólido-líquido bem como propriedades estruturais e dinâmicas de cada fase de um sistema de elétrons adsorvidos em filme de hélio (300 Å de espessura) sobre um substrato de mica ( $\epsilon=5,4$ ). Os resultados são obtidos para um sistema composto de 256 elétrons sujeitos a condições periódicas de contorno.

EST - 15

**TRATAMENTO UNIFICADO DA PARAESTATÍSTICA DE UM GÁS IDEAL.** Maria da Conceição de Sousa Vieira e Constantino Tsallis (Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas)

Consideramos um gás ideal de  $N$  partículas em  $d$  dimensões cuja dispersão espectral é do tipo  $\epsilon_k = |k|^d$  ( $k$  é o vetor de onda), e cujos estados de energia são ocupados no máximo por um número  $p$  de partículas. Verificamos que as propriedades termodinâmicas do gás são funções da razão  $d/d$ , além de  $p$ , da temperatura e da concentração  $N/V$  ( $V$  é o hipervolume). O potencial químico e o calor específico são estudados para diversos valores destes parâmetros. Nos limites  $p=1$  e  $p=\infty$  nossos resultados obviamente coincidem com os obtidos na estatística de Fermi-Dirac e Bose-Einstein, respectivamente. Analisamos neste contexto geral a condensação de Bose-Einstein.

Trabalho subvencionado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico.

EST - 16

COMPORTAMENTO CRÍTICO DE UM GÁS DE BOSE-EINSTEIN CARREGADO NUM CAMPO MAGNÉTICO EM D-DIMENSÕES

Melquisedech S. Silva e Hidembergue O. da Frota  
Dept. de Física / ICE / UA

Dando prosseguimento a trabalho anterior (1) vamos investigar as propriedades críticas do gás ideal de Bose-Einstein (GIBE) carregado na presença de um campo magnético uniforme. Sabe-se que este sistema sofre condensação de Bose-Einstein somente se sua dimensão for maior que quatro(2). Portanto a dimensionalidade crítica inferior (d.c.i.) deste sistema depende fortemente da presença do campo externo, uma vez que para o GIBE não magnetizado a d.c.i. é igual a três.

No trabalho anterior observamos que o GIBE formado por partículas neutras, porém com spin, viola a lei de escala de Fisher. Com o cálculo dos expoentes críticos do GIBE carregado em um campo magnético testaremos a validade das leis de escala, procurando entender a razão daquela violação.

(1) Hidembergue O. Frota, Melquisedech S. Silva e S.G.Rosa Jr., J. Phys. C, 17, 1669 (1984).

(2) May, R.M., J. Math. Phys. 6, 1462 (1965).

EST - 17

MODELO DE ISING NA REDE DE BETHE COM DILUIÇÃO CORRELACIONADA ENTRE SÍTIOS E LIGAÇÕES. J.Albino O.de Aguiar, Sergio G.Coutinho e F.G.Brady Moreira, Departamento de Física, UFPE.

Propomos o estudo do modelo de Ising na rede de Bethe com interações de intercâmbio entre sítios vizinhos mais próximos que dependem da ocupação dos segundos vizinhos mais próximos (interação correlacionada sítio-ligação). O objetivo é compreender o diagrama temperatura versus concentração, de sistemas magnéticos desordenados com interação de Ising nos limites da aproximação de Bethe - Peierls.

EST - 18

CONECTIVIDADE E FRUSTRAÇÃO - S.B.Cavalcanti, Departamento de Física, Universidade Federal de Alagoas.

Faz-se um estudo do Modelo de Ising numa rede de Bethe conexa, i.e. numa rede de Bethe onde são introduzidas ligações entre spins situados no mesmo anel (geração). Três casos são investigados:

(i) todas as ligações são do tipo ferromagnética.

(ii) todas as ligações são do tipo antiferromagnética.

(iii) ligações misturadas, com ligações ferromagnéticas entre spins situados em anéis diferentes e antiferromagnéticas para spins situados num mesmo anel, e vice-versa.

Os diagramas de fase para os três modelos descritos acima são obtidos através do método de anéis recorrentes.

EST - 19

MODELO DE POTTS DILUÍDO COM INTERAÇÕES COMPETITIVAS NA  
ÁRVORE DE CAYLEY  
Fernando S. Aguiar e Hidembergue O. da Frota  
Dept. de Física / ICE / UA

Recentemente tem-se estudado o modelo de Ising na árvore de Cayley<sup>(1,2,3)</sup> com interações competitivas de primeiros e segundos vizinhos. O diagrama de fases constitui-se das fases ferromagnética, paramagnética, antiferromagnética de período quatro e uma fase modulada que consiste de regiões comensuráveis (periódicas) e incomensuráveis (não periódicas), encontradas também no modelo ANNNI.

No presente trabalho estamos estudando o modelo de Potts diluído de estados de spin - 0,1,2 - com interações competitivas de primeiros e segundos vizinhos e um campo adicional M aplicado em sítios vizinhos que estão no mesmo estado de spin - 0. Estamos usando um procedimento tipo Grupo de Renormalização no espaço real, onde as interações de primeiros vizinhos e o campo adicional M são renormalizados.

- (1) Vannimenus, J. Z. Phys. B, 43, 141 (1983)  
(2) Inawashito, S. and Thompson, C.J., Phys. Lett. 97A, 245 (1983)  
(3) Mariz, A.M., Tsallis, C. and Albuquerque, E.L., Notas de Física do CBPF(1984)

EST - 20

MODELO DE POTTS NA ÁRVORE DE CAYLEY COM INTERAÇÕES COMPETITIVAS  
ENTRE PRIMEIROS VIZINHOS

J.M.R. DOS SANTOS - Universidade Federal do Maranhão

P.L. CHRISTIANO - Universidade Federal da Paraíba

Estudamos o modelo de Potts com  $p$  - estados na árvore de Cayley com número de coordenação  $b$ . Cada spin interage com  $n$  vizinhos por meio de ligações antiferromagnéticas e com  $b - n$  por meio de ligações ferromagnéticas. Os resultados parciais obtidos até agora indicam que o diagrama de fases para esse modelo difere qualitativamente do obtido por OLIVEIRA e SALINAS [1] para o modelo de Ising na mesma rede. Em particular, pode-se mostrar que, uma vez fixados  $b$  e  $n$  existe um valor máximo de  $p$  acima do qual a fase modulada deixa de existir.

1 - M.J. de Oliveira and S. R. Salinas. J. Phys A: Math Gen 18(1985)L 1157

EST - 21

SISTEMAS ALEATÓRIOS COMO UM PROBLEMA DE MAPEAMENTO. Mário J. De Oliveira e Silvio R.A.Salinas, Instituto de Física, USP.

Estudamos vários sistemas aleatórios de spins de Ising sobre uma árvore de Cayley no limite de coordenação infinita. Obtemos explicitamente relações de recorrência entre os momentos da magnetização efetiva por spin em gerações sucessivas da árvore. Os modelos considerados incluem vidros de spin, dos tipos de Edwards-Anderson e de Van Hemmen, bem como hamiltonianos de Ising na presença de campos aleatórios. Através das equações dos pontos fixos recuperamos, de forma muito simples, todos os resultados já conhecidos na literatura.

EST - 22

## O VIDRO DE SPIN DE ASHKIN-TELLER COM INTERAÇÕES DE ALCANCE INFINITO.

P. L. Christiano - Universidade Federal da Paraíba

O vidro de Spin de Ashkin-Teller, descrito pela Hamiltoniana  $H_{ij} = -J_{ij}^1 \sigma_i \sigma_j - J_{ij}^2 S_i S_j - J_{ij}^3 \sigma_i S_i \sigma_j S_j$ , onde  $\sigma$  e  $S$  são variáveis de spins de Ising e as interações  $J_{ij}^a$  ( $a = 1, 2, 3$ ) são variáveis aleatórias independentemente distribuídas segundo uma gaussiana, é estudado na aproximação em que o alcance das interações é infinito. O tratamento utilizado é uma generalização direta do desenvolvido por Sherrington e Kirkpatrick [1] e verifica-se que o mesmo ocorre com os resultados obtidos. Para o modelo de Ashkin-Teller simétrico ( $J_{ij}^1 = J_{ij}^2$ ), entretanto, verifica-se o aparecimento de parâmetros de ordem transversais e sua solução se aproxima mais das obtidas para o vidro de spin de Potts.

1 - D. Sherrington and S. Kirkpatrick - Phys. Rev. Lett. 35(1975)1792.

2 - D. Elderfield and D. Sherrington - PJ. Phys. C: Solid State Phys. 16(1983)L971.

EST - 23

## VIDRO DE SPIN E GRAFOS

Antonio Caliri, D. Mattis e R.C. Head - Instituto de Física e Química de São Carlos

É estudado um modelo de vidro de spin do tipo "Sherrington-Kirkpatrick", e suas propriedades são obtidas através da localização dos zeros da Função Partição no plano complexo de temperatura. Para  $N=5$  e  $N=9$  spins, nós obtemos os polinômios relevantes - cujos coeficientes podem ser expressos graficamente, enquanto que os relevantes grafos envolvem conceitos de grafos para e de grafos com sinal (grafos positivos e grafos negativos) - e seus zeros explicitamente. Suas propriedades no limite termodinâmico são analisadas.

EST - 24

## VIDROS DE SPIN COM QUEBRA DE SIMETRIA

R. T. DA SILVA - DE ALMEIDA F. G. BRADY MOREIRA

Apresentamos o modelo de Ising ( $S_i = 0, 1$ ) com anisotropia considerando o esquema de quebra de simetria entre réplicas proposto por G. Parisi<sup>1)</sup>. As ligações de troca têm distribuição de probabilidades gaussiana com média nula e largura unitária. Como previsto (de Almeida e Thouless<sup>2)</sup>) o resultado difere daqueles de réplicas simétricas.

1) Parisi G - J. Phys. A13, 1101 (1980)

2) de Almeida J.R.L e Thouless DJ - J. Phys. A11, 983 (1978)

EST - 25

MODELO DE ISING COM CAMPO ALEATÓRIO NA APROXIMAÇÃO DE BETHE-PEIERLS. Américo T. Bernardes e Mário J. de Oliveira, Instituto de Física- USP.

O modelo de Ising na presença de um campo aleatório é tratado através da aproximação de Bethe-Peierls. O diagrama de fases no plano temperatura versus campo aleatório, possui uma região paramagnética e uma região ferromagnética separadas por uma linha que é de primeira ordem a baixas temperaturas e de segunda ordem a altas temperaturas. A linha de primeira ordem é obtida através de uma construção de Maxwell. Mostramos que a região paramagnética não coincide com a região correspondente, ao caso em que, a equação de consistência para a magnetização possui uma única solução.

EST - 26

FUNÇÃO DE DENSIDADE SOBRE O ATRATOR DE LORENZ - UM MÉTODO ALTERNATIVO - Roberto Fernandes Silva Andrade - Instituto de Física da Universidade Federal da Bahia.

A determinação da função de densidade no espaço de fase de sistemas dissipativos é um problema aberto. No caso de sistemas de baixa dimensionalidade este cálculo tem sido feito pela integração numérica da equação de continuidade que é válida sobre os atratores do sistema. Propomos um método alternativo para este cálculo e ilustramos sua utilização no modelo de Lorenz. Ele é baseado na igualdade entre os elementos de um conjunto de integrais sobre curvas no atrator e permite a obtenção de sucessivas aproximações para a função exata, que podem ser dadas por meio de expressões analíticas simples. Comparações com os resultados obtidos através da integração numérica são apresentadas.

EST - 27

DIAGRAMA DE FASE DO MODELO CLOCK COM 5 ESTADOS. Maria Elena Pol (PUC/RJ). Estuda-se o diagrama de fase do modelo clock com 5 estados, para todos os valores das constantes de acoplamento de primeiros e segundos vizinhos, usando simulações de Monte Carlo em redes quadradas.

Cinco fases são encontradas, uma de ordem ferromagnético, uma de ordem antiferromagnético, duas fases críticas e a fase desordenada.

As fronteiras de fase são determinadas estudando o comportamento do calor específico, dos parâmetros de ordem e de funções de correlação calculadas pelo método do grupo de renormalização de Monte Carlo.

**EST - 28**      **SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE  $\lambda_0^2$  A TEMPERATURAS FINITAS** (Marcia G. do Amaral, C. A. Aragão de Carvalho, Maria Elena Poi, Ronald C. Shellard, Depto. de Física, PUC/RJ).

Fazemos uma simulação numérica, usando o método Monte Carlo, da teoria  $\lambda_0^2$  em duas a três dimensões. Simulamos os efeitos da temperatura finita estreitando a rede na direção temporal euclidiana. O modelo é renormalizado na fase de simetria quebrada da teoria. Analisamos a estrutura de fases do modelo e construímos os potenciais efetivos em diferentes temperaturas.

**EST - 29**      **TEORIA CINÉTICA DE GASES DENSOS POLIATÔMICOS**  
**GILBERTO MEDEIROS KREMER - DEPTO FÍSICA/UFR**

Desenvolve-se uma teoria cinética para o gás denso de Enskog, constituído de moléculas perfeitamente esféricas, elásticas, rígidas e rugosas. Considera-se como campos básicos a densidade de, a velocidade, a temperatura, o tensor pressão, o fluxo de calor translacional, o fluxo de calor rotacional, o spin e o fluxo de spin. As equações de balanço para estes campos básicos seguem de uma equação geral de transporte que, por sua vez, é obtida à partir da equação de Boltzmann. Considera-se os campos básicos como vínculos na maximização da entropia e determina-se a função de distribuição fora do equilíbrio, a qual é usada no cálculo dos momentos da função de distribuição e dos termos de produção. Através de um tipo de iteração Maxwelliana obtêm-se equações constitutivas, que descrevem o comportamento de um fluido polar.

**EST - 30**      **RESISTIVIDADE CRÍTICA DAS LIGAS DE HEUSLER Pd<sub>2</sub>MnSn E Pd<sub>2</sub>MnSb.**  
**G.L.F.Fraga, P.Pareur, W.H.Schreiner, J.V.Kunzler e D.B.Brandão, Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.**

As ligas com a composição Pd<sub>2</sub>MnZ (Z = Sn, Sb) fazem parte da família das ligas de Heusler que são tidas como ferromagnetos do Heisenberg quase ideais. O momento magnético está todo localizado no sítio do Mn e estes sítios magnéticos estão afastados entre si por mais de 4 Å. O interesse da medida da resistividade crítica em ligas de Heusler se prende ao fato de que os ferromagnetos comuns não apresentam características marcantes de Heisenberg, as quais por sua vez são muito bem explorados teoricamente. Estamos realizando medidas de resistividade de alta precisão e resolução ao redor da temperatura crítica nestas ligas, extraíndo coeficientes críticos. Comparamos os resultados com as previsões teóricas e com o comportamento resistivo de outros metais e ligas.

EST - 31

**ESPECTROSCOPIA DE MÖSSBAUER EM COMPOSTOS DE VALÊNCIA FLUTUANTE.** Marisa Whitaker, Luiz M. Oliveira e Hildebergue O. Frota. Departamento de Física e Ciência dos Materiais do Instituto de Física e Química de São Carlos da Universidade de São Paulo.

Calculamos espectros de absorção de Mössbauer em compostos de valência flutuante usando técnicas de grupo de renormalização aplicadas ao modelo de Anderson de uma impureza. Nos compostos de valência flutuante uma mudança na ocupação dos orbitais  $4f$  dos íons de terra rara altera a blindagem que esses orbitais exercem sobre a interação coulombiana entre o núcleo e os elétrons e portanto modifica a linha de absorção dando origem ao deslocamento isomérico. A dependência com a temperatura do deslocamento e da forma dos espectros serão discutidos e comparados com resultados experimentais.

EST - 32

**RELAXAÇÃO NUCLEAR NO MODELO DE ANDERSON PARA ADSORÇÃO QUÍMICA.** Luiz Nunes de Oliveira e Marisa A. Whitaker. Departamento de Física e Ciência dos Materiais, Instituto de Física e Química de São Carlos, USP.

Medidas recentes<sup>1</sup> dos tempos de relaxação nucleares de carbono adsorvido quimicamente em platina indicam um acoplamento forte entre os orbitais de valência do adsorvido e os estados de Bloch do adsorvente. Tempos de relaxação calculados com base no Hamiltoniano de Anderson<sup>2</sup> para esse sistema, diagonalizado via técnica de grupo de renormalização, serão apresentados e comparados com os dados experimentais.

1. S. Rudaz et al., Phys.Rev.Lett. 54, 71 (1985)

2. P. W. Anderson, Phys.Rev. 124, 41 (1961).

EST - 33

**FASES CRÍTICAS DO MODELO DE FOTTS ANTIFERROMAGNÉTICO EM FRACTAIS.** Rosanna Riera Freira, (Deptº de Física - FUC/RJ)

É estudado o modelo de Fotts antiferromagnético de  $q$  estados em fractais chamados "Sierpinski Carpets" ( $1 < D_f < 2$ ) e "Sierpinski Fractals Shells" ( $2 < D_f < 3$ ). Para ambas as famílias de redes foi obtido um valor crítico  $q_c$  acima do qual o sistema é paramagnético e abaixo do qual o sistema apresenta uma fase ordenada crítica. Os diagramas de fase são analisados sob o ponto de vista topológico.

EST - 34

O MODELO DE POTTS E FLUXOS. Arlan Cristina Navarro da Magalhães e John W. Essam

(Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas e Royal Holloway and Bedford New College of the University of London)

Recentemente foi demonstrado que a função de partição e a função de correlação entre pares de spin do modelo de Potts com  $q$  estados estão relacionadas com fluxos mod- $q$  num modelo de percolação. Estudamos funções de correlação entre  $m$  ( $m \geq 2$ ) spins sob o enfoque desta nova interpretação probabilística geométrica. Mostramos que as transmissividades equivalentes entre  $m$  terminais de Teallis e Levy, que têm sido utilizadas com bastante sucesso em métodos de grupo de renormalização no espaço real, são combinações lineares das referidas funções de correlação.

EST - 35

EQUAÇÃO DE ESTADO DO ANTIFERROMAGNETO DE POTTS NA REDE QUADRADA ISOTRÓPICA EM PRESENÇA DE UM CAMPO UNIFORME.

Edson de Pinho da Silva, Constantino Teallís e Anibal Omar Caride - Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas/CNPq.

Utilizando um método recentemente desenvolvido que possibilita obter a equação de estado para o parâmetro de ordem usando o grupo de renormalização no espaço real, obtivemos a equação de estado para o antiferromagneto de Potts na rede quadrada isotrópica em presença de um campo magnético uniforme.

EST - 36

MAGNETIZAÇÃO ESPONTÂNEA DO FERROMAGNETO DE POTTS NA REDE QUADRADA ANISOTRÓPICA - Anna Maria Móbrega Chams, Uriel Medeiros de Souza Costa, Constantino Teallís / CBPF, \*UPAL

Utilizando um método recentemente desenvolvido que possibilita obter a equação de estado para o parâmetro de ordem usando grupo de renormalização no espaço real, calculamos a magnetização espontânea em função da temperatura para o ferromagneto de Potts na rede quadrada anisotrópica.

EST - 37

EFEITOS DA ANISOTROPIA UNIAXIAL SOBRE A TEMPERATURA CRÍTICA EM MODELOS DE SPINS DE ISING MISTOS. - A.F.Siqueira e I.P.Fittipaldi.  
Universidade Federal de Alagoas

Recentemente [1] apresentamos resultados de temperatura crítica em um Modelo de Ising de spins mistos ( $S=1$  e  $1/2$ ) em uma rede quadrada. Os resultados apresentam completa concordância qualitativa com os obtidos por metodologias exatas. [2] Neste trabalho, ampliamos os cálculos para misturas de spins interiores ( $S=1$  e  $2$ ) spins semi-inteiro ( $S=1/2$  e  $3/2$ ) em uma rede honeycomb. Os resultados são comparados com aqueles disponíveis na literatura para o mesmo tipo de rede.

[1] A.F.Siqueira and I.P.Fittipaldi, Jour.Mag.Mag.Mat. (to be published).

[2] L.L.Gançalves, Physica Scripta. 32, 248(1985).

EST - 38

FERROMAGNETOS MISTOS COM COMPETIÇÃO DE ANISOTROPIAS UNIAXIAIS - Rita M. Iorzenon dos Santos e Raimundo R. dos Santos Departamento de Física - PUC/RJ

Estuda-se uma mistura aleatória ferromagnética de sistemas com anisotropias uniaxiais (tipo Ising) ortogonais competitivas, através de técnica do Grupo de Re normalização no Espaço Real.

Obtêm-se os pontos fixos não triviais, os expoentes críticos do comprimento de correlação e de crossover e o diagrama de fases no espaço de parâmetros (temperatura  $\times$  concentração  $\times$  parâmetro de anisotropia).

Os efeitos da competição são comparados com resultados experimentais.

EST - 39

TERMODINÂMICA DE UM FERROMAGNETO DE ISING DILUÍDO, Roberto Osório Departamento de Física, Universidade de Brasília.  
O sistema de Ising ferromagnético diluído na rede quadrada é analisado através da aproximação "V" do método variacional de aglomerados. São calculados diagramas de fase e funções termodinâmicas como a magnetização e a suscetibilidade inicial em função da temperatura e diluição do sistema. Para pequena ou média diluição, os resultados apresentados são mais precisos que os obtidos pela teoria de campo efetivo correlacionada.

EST - 40

O MODELO DE ISING AXIAL COM INTERAÇÕES DE TERCEIROS VIZINHOS  
Maria do Nascimento Berreto-Departamento de Física - UFAL.

O Modelo de Ising tri-dimensional com interações competitivas até terceiros vizinhos é analisado usando técnicas de programação linear, expansão em séries à baixas temperaturas e teoria de campo médio. Novas sequências de fases surgindo das linhas de multifase são encontradas e o crossover para o comportamento do modelo ANNNI é estudado.

EST - 41

GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO APLICADO AO MODELO DE HUBBARD, C.M. Chaves, PUC/RJ

É proposta uma teoria de campos para o modelo de Hubbard usando-se o formalismo de variáveis de Grassmann. Através de uma identidade do tipo Hubbard-Stratonovich transforma-se o termo de interação e introduz-se campos bosônicos auxiliares, o que permite a eliminação exata das variáveis de Grassmann e a obtenção da função de partição como uma integral funcional, sobre todas as configurações dos campos auxiliares, envolvendo uma ação efetiva.

A expansão em "loops" permite então aproximações sistemáticas para o problema. A seguir especializa-se ao caso  $d=1$ .

EST - 42

EQUAÇÃO DE ESTADOS NO QUADRO DO GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO

C.Tsallis - CBPF / Rio de Janeiro - RJ

Um novo procedimento muito simples foi recentemente introduzido<sup>[1]</sup> dentro do quadro das técnicas de grupo de renormalização no espaço real. É possível com este procedimento o cálculo direto de equações de estados de sistemas magnéticos, para valores arbitrários dos parâmetros externos (e.g., a temperatura). O método é ilustrado com o ferrromagneto de Potts em rede quadrada. Quando a comparação com resultados exatos existentes é possível, esta se mostra muito satisfatória.

[1] A.O.Caride e C.Tsallis, submetido para publicação (Phys. Rev. Lett.).

EST - 43

**MÉTODO DA CONVOLUÇÃO (PAULO MURILO CASTRO DE OLIVEIRA)**, Instituto de Física da Universidade Federal Fluminense)

Está sendo desenvolvido um método de cálculo para transições de fase. O método é uma extensão do Grupo de Renormalização com transformação de escala entre células finitas. A novidade consiste em aumentar previamente o tamanho das células (antes de impor a transformação de escala) através de convoluções.

Pretende-se discutir idéias sobre melhorias e aplicações do método.

EST - 44

**GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO DE CAMPO EFETIVO: APLICAÇÃO A SISTEMAS DE SPIN CLASSICOS.** -

Um grupo de renormalização é construído a partir dos resultados para as magnetizações de aglomerados de diferentes tamanhos. As magnetizações são obtidas a partir da aproximação mais simples feita em relações exatas derivadas dos diferentes aglomerados. O método é aplicado no modelo de Ising na rede quadrada para aglomerados de uma, duas e quatro partículas. Os resultados para o acoplamento crítico e expoente crítico térmico são próximos dos exatos, sendo muito melhores do que aqueles obtidos por outros grupos de renormalização fenomenológicos.

Francisco Cesar de Sá Barreto (UFMG)

EST - 45

**EFEITOS DE LOCALIZAÇÃO EM SEMICONDUTORES MULTIVALENTE COM TRANSIÇÃO SUPERCONDUTORA.** Hamilton Viana da Silveira, Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos e Hilda A.G. de Cerdeira, IFGW-UNICAMP. O objetivo deste trabalho consiste em estudar a condutividade dinâmica nos calcogenetos  $PbTe:Ti$  e  $GeTe$ . Estes materiais apresentam transições supercondutoras. A condutividade é estudada nas proximidades da temperatura de transição supercondutora, tomando em conta o efeito de impurezas desordenadas. O efeito de localização em supercondutores será estudado em função da dimensionalidade do sistema.

EST - 46

CONDUTIVIDADE EM UMA DIMENSÃO, Alba Theumann, Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

O grupo de renormalização junto com o método de dissiminação de Gonçalves da Silva e Koeller é utilizado no estudo do comportamento de escala da condutividade no modelo de Anderson, que é calculada com o formalismo de Abrikosov. As equações integrais de recorrência para as funções de distribuição de probabilidade são resolvidas exatamente, mostrando o fluxo do sistema a um estado localizado junto com o decaimento exponencial da condutividade predito por Landauer.

EST - 47

FORMULAÇÃO ESTOCÁSTICA DA DINÂMICA DE SPIN. Claudio Scherer (Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul) e Bernard Lavenda (Universidade de Camarino, Itália).

O movimento Browniano de um spin atômico num sólido, devido à interação com os fônons, é estudado a partir de uma equação de Liouville estocástica. O aparecimento de um coeficiente de difusão dependente do estado conduz a uma não-unicidade na interpretação da equação diferencial estocástica, conforme seja considerada como uma equação de Itô ou de Stratonovich. Este problema de interpretação pode, tal vez, ser resolvido experimentalmente, pois as propriedades de dissipação de energia, no caso de ressonância magnética diferem fundamentalmente entre as duas interpretações.

EST - 48

CAOS EN UNIONES JOSEPHSON, Miguel Octavio, Centro de Física, Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas. En los últimos años ha habido un gran interés en sistemas no-lineales que exhiben, cuando un parámetro es variado, una transición a un estado no-determinista que se conoce como caos. De los muchos sistemas no-lineales, la unión Josephson es un sistema interesante por su bajo número de parámetros (pocos grados de libertad), bajo ruido y el extenso conocimiento de sus propiedades. En esta presentación revisaremos el estado actual del conocimiento sobre caos en uniones Josephson, tanto desde el punto de vista teórico como experimental. Se presentarán resultados experimentales que muestran como el caos en la Unión Josephson forzada se manifiesta como temperaturas efectivas de ruido de hasta  $10^6$  K. Igualmente, se compararán los resultados experimentales con simulaciones numéricas con y sin ruido térmico presente.

"Palestra Convidada - 50 min. - Mecânica Estatística"

## **VI.7 - INSTRUMENTAÇÃO**

**Coord.:- Prof. Jan Slaets (IFQSão Carlos-USP)**

INS - 01

**AVALIAÇÃO DA DOSE DE RADIAÇÃO BETA ABSORVIDA NA PELE COM O USO DE DETECTORES TERMO-LUMINESCENTES ULTRA-FINOS DE  $\text{CaSO}_4:\text{Dy}$ .** Luiz Antonio R. da Rosa\* e Linda V. Ehlis Caldas. Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares/CNEN-SP.

O controle da dose de radiação beta absorvida na pele é especialmente importante em ambientes onde há a presença desta radiação de baixa energia. Segundo as recomendações da ICRP 26, a dose absorvida na pele deve ser avaliada entre 5 e  $10\text{mg}\cdot\text{cm}^{-2}$ . Por razões de praticidade, a ICRP 26 recomenda a determinação da dose absorvida na pele a uma profundidade de  $7\text{mg}\cdot\text{cm}^{-2}$ . A dose absorvida superficial devido à radiação beta pode ser avaliada com uso de detectores termoluminescentes com pequena espessura. Neste trabalho a reprodutibilidade, o limite de detecção, fatores de transmissão para diferentes espessuras de material equivalente a tecido e a dependência energética de detectores ultra-finos de  $\text{CaSO}_4:\text{Dy}$  + Teflon foram determinados com o uso de fontes de radiação beta de  $^{90}\text{Sr}$ ,  $^{90}\text{Y}$ ,  $^{204}\text{Tl}$  e  $^{147}\text{Pm}$ . Com base nos resultados obtidos, um dosímetro apresentando uma dependência energética melhor que  $12^\circ$  é proposto para a avaliação da dose de radiação beta absorvida na pele.

\* Endereço Permanente : Instituto de Radioproteção e Dosimetria, CNEN, Rio de Janeiro

INS - 02

**CARACTERIZAÇÃO DO CAMPO DE RADIAÇÃO BETA DE UMA FONTE PARA APLICAÇÕES INDUSTRIAIS.** Linda V.E.Caldas (Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, CNEN, S.Paulo, Brasil) e Josef David (Institut für Strahlenschutz, GSF, Munique, Alemanha).

Um dos tipos de sistemas utilizados em escala industrial para medição e controle da espessura de materiais têxteis consiste de um instrumento do qual faz parte um emissor radioativo de  $^{85}\text{Kr}$ , de 3,7 GBq. Com a utilização dos três sistemas de medida, dosímetros termoluminescentes de  $\text{CaSO}_4:\text{Tm}$  (60 $\mu\text{m}$ ), câmara de extrapolação e detector de cintilação, foi possível caracterizar o seu campo de radiação. Foram determinados a taxa de dose absorvida no ar a determinadas distâncias, a lei da variação da taxa de dose absorvida no ar com a distância entre fonte e detector, os fatores de transmissão para espessuras de tecido entre 1 e  $100\text{mg}/\text{cm}^2$  e as curvas de isodose tanto para radiação beta como para radiação Bremsstrahlung a distâncias onde se localizam os operadores deste tipo de fontes, ou seja, entre 30 e 100 cm. A determinação destas características constitui um método recomendável para os sistemas radioativos utilizados em aplicações industriais.

INS - 03

**PASTILHAS SINTERIZADAS DE  $\text{CaSO}_4:\text{Dy}$  + TEFLON PARA MONITORAÇÃO INDIVIDUAL E AMBIENTAL.** Letícia Lucente Campos. Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN-CNEN/SP.

Dosímetros sólidos na forma de pastilhas são os mais adequados para a dosimetria da radiação. Nos últimos cinco anos o IPEN vem produzindo pastilhas termoluminescentes de  $\text{CaSO}_4:\text{Dy}$  prensadas a frio, usando NaCl como material agregante, que tem sido utilizadas por vários serviços de prestação de serviços de monitoração individual. Essas pastilhas apresentam duas grandes vantagens: alta sensibilidade e baixo custo. A única inconveniência, a higroscopicidade do material agregante, é evitada selando-se as pastilhas em filme fino de plástico para o uso.

Com o propósito da utilização do  $\text{CaSO}_4:\text{Dy}$  na monitoração ambiental, foi desenvolvido um método de produção de pastilhas sinterizadas de  $\text{CaSO}_4:\text{Dy}$  usando Teflon como agregante.

O estudo detalhado das propriedades dosimétricas destas novas pastilhas mostrou que as mesmas são adequadas para utilização tanto na monitoração individual como ambiental.

INS - 04

ESTUDO E MONTAGEM DE UM SISTEMA FOTOTÉRMICO ("BEAM DEFLECTION")

LUIZ DE SIQUEIRA MARTINS FILHO, CARLOS LENZ CESAR E ANTONIO FERNANDO DOS SANTOS PENNA.

A técnica de "Beam Deflection" mede uma pequena variação de temperatura na superfície de uma amostra, causada pela absorção de uma radiação eletromagnética modulada. Esta medida é feita através da deflexão de um feixe de laser de prova, causada pelo gradiente de temperatura, e consequente gradiente no índice de refração, que aparece no gás ou líquido que circunda a amostra, quando a mesma é aquecida. Esta é uma técnica calorimétrica, com sensibilidade para medir variações de temperatura de até  $10^{-6}$  K e pode ser utilizada para obter informações sobre parâmetros óticos e térmicos de várias amostras.

INS - 05

ANÁLISE QUANTITATIVA ATRAVÉS DA ESPECTROSCOPIA FOTOACÚSTICA NO

INFRAVERMELHO PRÓXIMO - C.A.Vinha - H.Vargas - IFGW - Unicamp

O objetivo do trabalho é a determinação quantitativa dos adulterantes mais comuns utilizados para fraudar o café em pó comercializado no Brasil. Utilizando-se o espectrômetro OAS 400 (EDT) são obtidos espectros no infravermelho próximo de amostras preparadas com porcentagens pré-estabelecidas de adulterantes. Obtêm-se a partir da análise desses espectros curvas de calibração que podem ser utilizadas para determinar porcentagens desconhecidas de adulterantes presentes no café em pó comercial.

INS - 06

MONTAGEM DE UM ESPECTRÔMETRO FOTOACÚSTICO DE FREQUE DÚPLO NO TEMPO. SYLVIO QUEZADO, Departamento de Física, CCT-UPPb.

O sistema apresenta um espelho que fará as vezes do beamsplitter e do chopper, alternando o feixe de radiação entre amostra e referência. Amostra e referência são colocadas numa mesma câmara e um só microfone é utilizado para detectar os dois sinais. A utilização de um sistema de detecção em fase permite que o sinal de saída seja a diferença entre o da amostra e da referência. Este sistema permite uma correção dos efeitos da fonte utilizando-se outras referências que não o de carbono preto, sem perda de potência luminosa e consequentemente de sensibilidade. O sinal do microfone é pré-amplificado e acondicionado por um amplificador logarítmico antes de ser amplificado pelo lock-in. A resposta do lock-in nos é dada em absorbância.

A automação do sistema está sendo desenvolvida. O equipamento permite deste modo dispensar o uso duplo de lock-in's e pode ser utilizado em modo de feixe-duplo, feixe único ou absorbância.

INS - 07

SENSORES MAGNETOMÉTRICOS A PARTIR DE FILMES FINOS DE "PERMALLOY".

Ramon V. Martin e Nei F. Oliveira Jr., IFUSP.

Nos últimos dois anos viemos desenvolvendo uma evaporadora capaz de produzir filmes de "permalloy" com magnetostricção praticamente nula. Estes filmes são adequados, particularmente, à construção de dispositivos sensores magnetométricos, na faixa  $10^{-5}$  a 1 Oersted, ou seja, competitivo com os clássicos "fluxgates", mas com grande vantagem em simplicidade e custo. Construímos com sucesso sensores com excitação de radio-freqüência (descritos originalmente por Baeder and Fussell) e trabalhamos atualmente no desenvolvimento de um sensor magneto resistivo.

INS - 08

CÁLCULO FOTO ACÚSTICO PARA BAIXA TEMPERATURA

Aderbal Carlos da Oliveira e Paulo Sérgio Pizani, Universidade Federal de São Carlos

Descrição de uma célula foto acústica para temperaturas de até 1,5 K.

Apresentação dos primeiros resultados com a célula.

INS - 09

DESENVOLVIMENTO E APLICAÇÕES DE UM LASER DE CO<sub>2</sub> CW DE 250 WATT DE POTÊNCIA

R.A. Muribeca - UFFb, E.J. Lima - UNICAMP, J.H. Nicola - UNICAMP

Em nosso trabalho desenvolvemos um laser de CO<sub>2</sub> de potência média, com o objetivo maior de obtermos tecnologia nacional na produção e aplicação desta ferramenta de grande utilidade em processos industriais. Pode ser utilizado em eletro-eletrônica, siderurgia, confecção de embalagens, em madeira e no geral, em aplicações onde os materiais sejam sensíveis à radiação de 10,6 micrometros.

A configuração escolhida em nosso projeto foi a de um laser com seis metros de cavidade óptica composta de dois segmentos interligados por um arranjo óptico que nos possibilitou uma montagem de aproximadamente três metros de comprimento. Esse laser encontra-se já em funcionamento e estamos realizando ajustes que permitam o funcionamento pleno.

Como parte de nosso projeto desenvolvemos uma mesa coordenada que se utiliza de motores de passo e que nos permite realizar processos de varredura em semicondutores para efeitos de obtenção de superfícies policristalinas, bem como deposições metálicas.

Este projeto foi financiado pelo FINEC - Banco do Brasil S.A. com apoio da CAPES.

**INS - 10** SISTEMA DE MEDIDAS EM ULTRA-BAIXAS TEMPERATURAS NA PRESENÇA DE CAMPOS MAGNÉTICOS

Valdir Bindilatti (IFUSP), L. Poeh (CNRS-Grenoble, França) e Nei Fernandes Oliveira Junior (IFUSP).

Construímos um sistema para medidas de propriedades magnéticas ou de transporte capaz de operar em temperaturas entre 0,3 e 0,02 K na presença de campos magnéticos de até 9T. Uma bobina supercondutora, projetada e construída por nós, produz, próximo a região de campo alto e homogêneo, uma região de campo praticamente nulo. A bobina é acoplada a um refrigerador de diluição adaptado com uma câmara de mistura em plástico, dimensionada para conter as regiões de campo máximo e de campo nulo. Este arranjo permite a utilização de termômetros convencionais ao mesmo tempo que a amostra é submetida a campos magnéticos intensos. A termometria é baseada no Nitrato de Cério - Magnésio, como termômetro primário, através do qual calibramos resistores de carvão, e uma célula capacitiva para medida da pressão de fusão de hélio-3. A curva de fusão é quase independente do campo pelo menos até  $H = 6T$ . Apresentaremos uma descrição do sistema e suas características de funcionamento. (FAPESP, CNPq, FINEP)

**INS - 11** CRIOSTATO EM AÇO INOX PARA EPR NA FAIXA DE 1,5 a 4,2K. WILSON VANDINI - CBPF, NEY DE OLIVEIRA - USP e GEORGE BEMSKI - CBPF.

O Laboratório de EPR do CBPF deverá contar em breve com novas facilidades na área de criogenia: um criostato de aço inox de temperatura controlada na faixa de 1,5 a 4,2K. Algumas características deste equipamento são as seguintes:

- 1) Dimensão: 1m.
- 2) Capacidade: 5l de He líquido.
- 3) Tempo de operação: 2h de uso contínuo.
- 4) Utilização: nas áreas de Física de Metal e Biofísica.

O criostato está sendo construído em colaboração com o Prof. Ney de Oliveira da USP.

**INS - 12**

MAGNETOS SUPERCONDUTORES PARA SISTEMAS DE BAIXO CONSUMO DE HÉLIO

Geni Vallego, Jorge Otubo, Pirelli S.A.  
Nei F. Oliveira Jr., Valdir Bindilatti, IFUSP

A Pirelli e o IFUSP estão desenvolvendo um programa de construção de magnetos supercondutores, a partir de fios produzidos pela Pirelli. Inicialmente foi projetado um pequeno magneto com 26 cm de furo central e 60 cm de diâmetro máximo externo, que na sua versão de maior densidade de corrente, deverá produzir até 6 T a 4,2 K e 9 T a 1,5 K, e com homogeneidade de campo de até 0,01 % em 20 cm. Protótipos já foram produzidos e testados com fios de procedência americana. Um primeiro protótipo já foi construído e testado com fio Pirelli.

Pretende-se projetar e construir um sistema completo, incluindo um vaso criogênico de baixo consumo de hélio.

INS - 13

**CATODOLUMINESCÊNCIA COM CANHÃO ELETRÔNICO DE TELEVISÃO.** S.S. Camargo Jr. e J.P. von der Weid - Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Foi construída uma montagem de catodoluminescência utilizando um canhão eletrônico convencional de T.V. preto e branco, para medidas de vidas médias maiores ou da ordem de 100ps. Nesta montagem o canhão de elétrons é acoplado a um tubo de vidro Pyrex e conectado por meio de flanges a uma válvula de esfera que possibilita mantê-lo permanentemente em vácuo. De forma a obter um feixe pulsado utiliza-se um conjunto de bobinas defletoras e uma fenda de largura ajustável. Todo o sistema é acoplado diretamente à cauda do criostato em que se encontra a amostra. O canhão utilizado, de um tubo de T.V. AW 59-91, trabalha com uma tensão de aceleração de até 18KV e uma corrente típica de 100 $\mu$ A.

INS - 14

**NOVO MÉTODO PARA MEDIDAS DE SUSCEPTIBILIDADE DIELÉTRICA COMPLEXA A BAIXA TEMPERATURA.** Erwin Carlos Ziemath, Jan Franz Sigets e Michel André Agertar, Instituto de Física e Química de São Carlos - Universidade de São Paulo.

Descrição de um equipamento de ultra-baixas frequências empregando técnicas digitais programáveis para medir as partes real e imaginária da susceptibilidade dielétrica,  $\epsilon'$  e  $\epsilon''$ , entre 10<sup>-6</sup> e 40 Hz através de medidas de fase e corrente. São empregadas técnicas de correlação e análise de séries de Fourier para determinação de fase, amplitude, fator de qualidade e reprodutibilidade dos dados. A programação é feita em Fortran IV e Macro-Assembler para computador PDP 11/45. O sistema foi empregado para efetuar medidas dielétricas em cristais de KCN e os resultados são descritos resumidamente.

INS - 15

**MEDIDA DE PEQUENOS SINAIS.** M. Fin e M.N. Baibich, Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Utilizando o princípio de funcionamento de um "Lock-in Amplifier" construímos um sistema capaz de distinguir sinais da ordem de 10 nV, e estamos implementando o uso de transformadores de baixo ruído para atingir o limite desejado de 1 nV. Esta medida se refere a variações produzidas sobre um valor-base de 1 mV, tipicamente, fordocando resolução de 10<sup>-6</sup>. A partir deste sistema estamos desenvolvendo um verdadeiro "Lock-in Amplifier" para uso geral em laboratório, e um manovoltímetro digital.

INS - 16

"CONFORMADOR DE PULSOS", Ricardo E. de Sousa e George C. do Nascimento, Departamento de Física, UPPE - 50000 - Recife-PE.

Apresentamos um equipamento, baseado em memórias do tipo RAM, para modulação de sinais com pulsos de qualquer forma desejável. O equipamento foi projetado para gerar duas formas de ondas independentes, isto permite utilizá-lo, por exemplo, em experimentos de RMN onde for necessário excitar a amostra com RF em duas direções.

APOIO: CNPq e FINEP.

INS - 17

SISTEMA AQUISIÇÃO DE DADOS PARA ESTUDO DE CORRENTE DE DESPOLARIZAÇÃO TERMOESTIMULADA (4 - 300 K). Luciano da Fontoura Costa e Máximo Szu Li (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP).

A técnica de corrente de despolarização termoestimulada, muito usada para determinar parâmetros do comportamento de relaxação dielétrica em sólidos, foi desenvolvida em nossos laboratórios. Apresentamos o projeto de desenvolvimento do sistema de aquisição das curvas de corrente de despolarização e temperatura em função do tempo utilizando um microcomputador Apple, com sistema CP/M, mais interface A/D com precisão de 12 bits (ADC 80-12). A temperatura é obtida por um termopar tipo chromel constantân e/ou termistor diodo de silício, e aquisicionada pela interface A/D, enquanto a corrente é medida por um eletrômetro Keithley modelo 642 ( $10^{-18}$  A) e obtida por interface BCD.

Desenvolvemos ainda o software para aquisição, armazenamento em disquete e transferências para o computador VAX 11/780 para cálculos e ajustes das curvas.

INS - 18

IMPLEMENTAÇÃO DE CONTROLE DIGITAL PID COM MICROCOMPUTADOR

Rosecláa Lopes de Oliveira Melo - UNICAMP

Desenvolvimento de um controlador tipo Proporcional-Integral-Derivativo (PID), em tempo real, usando um microcomputador desenvolvido no Laboratório de Instrumentação Digital do IFGW - UNICAMP. Este foi testado no controle de temperatura de um forno elétrico a aquecimento resistivo, apresentando uma precisão de 0,3 C em temperatura de 900 C. As linguagens utilizadas foram FORTRAN IV e ASSEMBLER (assembler para o Z80). O programa de controle foi feito em forma modular, facilitando eventuais alterações.

INS - 19

COMPUTAÇÃO DISTRIBUÍDA PARA AQUISIÇÃO, CONTROLE E PROCESSAMENTO. Jan FransWillem Slaets, Instituto de Física e Química de São Carlos (USP).

A utilização de arquiteturas pode ser empregada no desenvolvimento de vários instrumentos eletrônicos utilizados nos laboratórios de Física.

O sistema proposto é constituído de vários módulos com recursos independentes capazes de executar tarefas específicas tais como aquisição, controle, gerenciamento de arquivos, visualização gráfica, gerenciamento de memória e outros.

Foi definido além de um duto de endereços e dados, uma via de comunicação paralela de alto nível (DCAN), facilitando a solicitação e monitoração de pedidos de alto nível. Cada módulo do sistema é dedicado a uma tarefa específica e é dotada de UCP e memória local podendo assim efetuar independentemente as funções de alto nível solicitada pelo DCAN.

INS - 20

TERMINAL DE VÍDEO VOLTADO PARA PROCESSAMENTO DE IMAGENS. Alvaro Garcia Netoe Jan Frans Willem Slaets, Instituto de Física e Química de São Carlos, USP.

O processamento digital de imagens tem sido cada vez mais empregado em diversos ramos da Física. A espectrografia quase não pode mais prescindir do mesmo em algumas áreas como a Resonância Magnética Nuclear e uma de suas mais promissoras aplicações: a tomografia computadorizada com radiações não ionizantes.

Ciente dessa tendência o Laboratório de Instrumentação Eletrônica tem desenvolvido um projeto para a construção de um terminal de computador voltado para essas aplicações. Este trabalho já foi objeto de duas teses de mestrado, estando em fase final de implementação. Suas principais características são:

- Modularidade - há várias possíveis configurações de hardware/software para o terminal, dependentes da aplicação e do custo.
- Baixíssimo custo, consequente da otimização do projeto - apenas 20 CI's são empregados no terminal em sua forma mais simples
- capacidade gráfica - Com CRT comum consegue-se uma resolução de  $5R \times 250$  pontos e 8 pl de memória
- capacidade de emulação de vários terminais
- capacidade de processamento local

A construção desse terminal insere-se num projeto maior, também já concluído, de construção de um microcomputador modular para aquisição e processamento de dados experimentais, automação de laboratório e processamento de sinais.

INS - 21

SISTEMA ELETRÔNICO PARA ESPECTROFOTÔMETRO POR TRANSFORMADA DE FOURIER. Lucianoda Fontoura Costa, Máximo Sio Li & Sérgio Carlos Zilio (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP).

Encontra-se em desenvolvimento no Instituto de Física e Química de São Carlos um protótipo de Espectrofotômetro por Transformada de Fourier destinado à análise de materiais na região do infravermelho ( $3000$  a  $500$   $\text{cm}^{-1}$ , resolução  $5$   $\text{cm}^{-1}$  ou  $1$   $\text{cm}^{-1}$ ).

Este tipo de espectrofotômetro permite resolução e relação Sinal/Ruído melhores que os espectrofotômetros dispersivos, entretanto exige um suporte eletrônico-computacional bastante completo para processamento numérico (TFR, apodização, correção da linha de base, etc) e Entrada/Saída de dados (videográfico, registrador CRT, impressora gráfica).

Desenvolvemos, então, um sistema modular de multiprocessamento tipo mestre-escravo constituído de:

i- Microcomputador de Controle: Z-80A, 64 Kbytes memória, sistema CP/R, 2 unidades disquete  $5\frac{1}{4}$ " (312 Kbytes), terminal de vídeo serial e impressora gráfica.

ii- Sistema de Aquisição de Dados: Z-80A, 8 Kbytes "buffer" de dados, conversor A/D 12 bits (AD 574), "sample-hold" e 4 Kbytes de rotinas dedicadas para controle e aquisição (2732).

iii- Processador Dedicado de TFR: TMS32010, 8 palavras de 16 bits, capaz de efetuar uma Transformada de Fourier (método TFR) de 2048 pontos em menos de 0,2 segundos.

INS - 22

UM DETECTOR DE PONTO DE EQUILÍBRIO SINTONIZÁVEL SIMPLES E SENSÍVEL

R.P. Baptista e J.A. Fornes

Instituto de Matemática e Física, Universidade Federal de Goiás, Campus Universitário, Bloco IMP-2  
74000 Goiânia, GO

**Resumo.** Descrevemos como usar um rádio como um detector de ponto de equilíbrio sintonizável simples e de baixo custo. O intervalo de frequência desse instrumento depende do intervalo de frequência do rádio. A sensibilidade alcançada foi melhor que 0,1  $\mu$ V.

INS - 23

PONTE DE MEDIDA PARA ESTUDAR AS PROPRIEDADES DIELÉTRICAS DE LÍQUIDOS ALTAMENTE CONDUTORES NO INTERVALO DE FREQUÊNCIA DE 1kHz-30MHz

R.P. Baptista e J.A. Fornes

Instituto de Matemática e Física, Universidade Federal de Goiás, Campus Universitário, Bloco IMP-2  
74000 Goiânia, GO

**Resumo.** A ponte de medida descrita é utilizada no intervalo de frequência de 1kHz a 30 MHz para a determinação da impedância de materiais biológicos e líquidos altamente condutores caracterizados por um fator de perda muito alto. A novidade nesta ponte é o uso como unidade de resistência padrão de dois "trimming" potenciômetros e dois pequenos transformadores de ferrita blindados como a saída para o detector. Isto o torna compacto, versátil e livre de efeitos indutivos e capacitivos.

## **VI.8 - CRISTAIS LÍQUIDOS**

**Coord.:- Prof. Antonio M.Figueiredo Neto (IFUSP)**

LIQ - 01

DIAGRAMAS DE FASE E ESTUDOS DE DIFUSÃO NOS CRISTAIS LÍQUIDOS LIOTRÓPICOS COMPOSTOS DE ÁGUA, CLORETO DE AMÔNIO E CLORETO DE  $C_8$ ,  $C_{10}$  e  $C_{12}$  AMÔNIO.

John Dale Gault (Departamento de Física - UFSC - Florianópolis).

Diagramas de fase foram elaborados para os sistemas binários de cloreto  $C_8$ ,  $C_{10}$  e  $C_{12}$  amônio e para os sistemas ternários onde a razão molar anfifílico/ $NH_4^+Cl^-$  foi de 2.5/1. Brometo de decil amônia também foi estudado no sistema binário e com brometo de amônio. No sistema cloreto de decil amônio a difusão de um corante foi medida como função da temperatura, e perpendicular ao eixo óptico, nas mesofases lamelar, nemático e também na fase isotrópica.

Com o aumento da cadeia de  $C_8$  para  $C_{10}$  e  $C_{12}$  e as mesofases deslocam-se para temperaturas maiores e concentrações anfifílicas menores. A adição do sal teve o mesmo efeito, mas nota-se uma ampliação na região ocupada pela nemática. A substituição do cloro pelo bromo elimina a fase hexagonal (presente nos sistemas clorados) mas o restante do diagrama permanece essencialmente inalterado.

A difusão aumenta com a adição do sal e diminui com o aumento da concentração da água.

(Financiado pelo CNPq (PADCT))

LIQ - 02

DETERMINAÇÃO DO ÍNDICE DE REFRAÇÃO EM SISTEMAS DE CLORETO DE DECIL AMÔNIA, CLORETO DE AMÔNIA E ÁGUA.

Gerson R. Ouyriques e Maria Luiza Caselani (Depto. de Física - UFSC).

São feitas medidas dos índices de refração em sistemas de Cloreto de Decil Amônia, Cloreto de Amônia e Água, usando um espectrômetro-gonômetro acoplado a um dispositivo de aquecimento e refrigeração.

O cristal líquido liotrópico é selado em tubos capilares retangulares e colocado entre dois prismas de faces paralelas. Esta técnica permite determinar, com uma precisão de leitura da ordem de  $10^{-4}$ , o índice de refração do C.L.L. em estudo.

(Financiado pelo FINEP, CNPq, PADCT e CAPES).

LIQ - 03

DETERMINAÇÃO DE ESTRUTURAS CRISTALOGRAFICAS E CÁLCULOS DE SUSCEPTIBILIDADES DIAMAGNÉTICAS DIRECIONAIS DO DECIL E DODECIL CLORETO DE AMÔNIO (DAC1 e DDAC1). A. V. A. Pinto, I. Vencato, H. Olmedo (Depto. Física - UFSC) e Y. P. Mascarenhas (Instituto de Física e Química de São Carlos - USP)

Os parâmetros cristalográficos do DAC1 [36ª Reunião da SBPC, 02-D.2.3, p.463] e do DDAC1 [37ª Reunião da SBPC, 39-D.2.3, p.421] obtidos por difratometria automática de raios-x, são utilizados na definição da geometria atômica molecular - Sistema dos Momentos de Inércia Principais (SMIP). Nos cálculos das susceptibilidades os valores médios de distâncias e ângulos interatômicos são tomados de modo que as estruturas moleculares possam ser consideradas não tensionadas por hábitos cristalográficos particulares dos anfifílicos (molécula livre). As susceptibilidades direcionais são calculadas segundo as direções dos eixos determinados pelo SMIP (método de Flygare). Para efeito dos cálculos dos valores médios são usados

$\bar{X} = 1/3 (X_{aa} + X_{bb} + X_{cc})$  e no cálculo das anisotropias  $\Delta X = [X_{bb} - 1/2(X_{aa} + X_{cc})]$  isto é, assume-se uniaxialidade dos sistemas, DAC1 e DDAC1, ao longo do eixo "bb". Nestas condições os valores obtidos são:

	$X_{aa}$	$X_{bb}$	$X_{cc}$	$\bar{X}$	$\Delta X$	
DAC1	-142	-138	-124	-135	-5	Unidades: [ $10^6$ erg/G <sup>2</sup> mol]
DDAC1	-166	-162	-146	-158	-6	

Órgãos Financiadores: CAPES, FAPESP, CNPq e FINEP

**LIQ - 04** MÉTODO E ARRANJO EXPERIMENTAL DE CONOSCOPIA LASER PARA MEDIDAS DA BIREFRINGÊNCIA DE CRISTAIS LÍQUIDOS LIOTRÓPICOS. Teodósio Kroin (IFUSP/UFSC) e A. M. Figueiredo Neto

Devido à fraca birefringência dos liotrópicos ( $\Delta n \cdot 10^{-3}$ ), são necessárias amostras espessas de mesofases líquido cristalinas (~2mm) para as medidas de  $\Delta n$  com uma reduzida margem de incerteza. Esse fato impossibilita a utilização de microscópios ópticos convencionais que exigem espessuras de amostras da ordem de dezena de microns. A conosopia laser utiliza um feixe de luz monocromático de aproximadamente 5mm de diâmetro que converge no centro de uma amostra de cristal líquido liotrópico com ângulo de abertura maior do que  $58^\circ$ . Essa técnica permite a obtenção de  $\Delta n$  com um erro da ordem de  $10^{-4}$ ,  $10^{-5}$ . Serão apresentados o arranjo experimental e uma descrição teórica do método utilizado na obtenção de  $\Delta n$ .

**LIQ - 05**

**SAXS DE CRISTAIS LÍQUIDOS LIOTRÓPICOS (\*)**

Dionar Bittencourt (IFUSP)

Mesofases liotrópicas nemáticas ternárias e quaternárias discóticas e calamíticas ( $N_C$  e  $N_I$ ) foram medidas em um difratômetro de baixo ângulo, tendo sido obtidas curvas de espalhamento de raios X em baixo ângulo (SAXS), à temperatura ambiente, na região angular de  $0^\circ$  a  $5^\circ$  ( $2\theta$ ).

(\*) Trabalho orientado pela Dra. Lia Queiroz do Amaral (IFUSP)

**LIQ - 06**

**TRANSIÇÕES DE FASE EM LIOMESOFASES COLESTÉRICAS - Maria Elisa Marcondes Holene**

Cristais líquidos liotrópicos colestéricos foram preparados a partir de laurato de potássio/n-decanol/D<sub>2</sub>O/sulfato de brucina heptahidratado (BS). A todos eles foram adicionados cerca de  $10^{-2}$  grãos/cm<sup>3</sup> de ferrofluido conseguindo-se orientação das amostras por campo magnético de apenas 5-10 Gauss.

As texturas das amostras foram observadas em microscópio de luz polarizada estando as amostras contidas em microslides de espessuras de 0,1 e 0,2 mm.

Nestes sistemas estão sendo estudadas as transições de fase em função da temperatura. Todas as amostras contêm a mesma quantidade molar de componentes com exceção do sulfato de brucina cuja concentração vai de 0 a  $10,4 \times 10^{-3}$  moles de BS por mol de detergente.

São feitas medidas de transmissão de luz para determinar as temperaturas de transição entre as fases  $Ch_D$  e  $Ch_{BX}$ . As fases encontradas foram  $Ch_D$ ,  $Ch_{BX}$ ,  $Ch_C$ ,  $N_{BX}$  e polifásica.

$Ch_D$  - Colestérica discótica

$Ch_{BX}$  - colestérica biaxial

$Ch_C$  - colestérica calamítica

$N_{BX}$  - nemática biaxial

LIQ - 07

POSSÍVEL DEFORMAÇÃO DAS NICELAS EM UM CRISTAL LIQUIDO FERROCOLESTÉRICO INDUZIDA POR AGENTE QUIRAL. A.M.Figueiredo Neto (IFUSP), A.M.Levalut, L.Liebert, e Y.Galerie (Univ. Paris-Sud, Lab. Physique des Solides - France)

Ferrocolestéricos liotrópicos de decilsulfato de sódio/decanol/água/sulfato de brucina (BS)/ferrofluido, foram estudados por meio da técnica de difração de raios-X com fonte sincrotrônica. Diferentes concentrações do agente quiral foram investigadas: de 0 a 0,54% em peso, ou aproximadamente, de 0 a 1 molécula de BS por micela respectivamente. Os padrões de difração de ferrocolestéricos calamíticos de senrolados por ação de um campo magnético externo (500 G) são comparados com os padrões usuais de mesofases ferronemáticas calamíticas orientadas.

LIQ - 08

RMN DE DEUTÉRIO DE NOVOS INDUTORES DE COLESTERICIDADE. M.R. Alcantara (Instituto de Química - UNICAMP) & J.A.Vanin (Instituto de Química - USP)

Foram usados a diacetona-sorbose (DAS) e diacetona-2-ceto-gulonato de potássio (DGK), como novos indutores de colestericidade em mesofases baseadas em diferentes anfífilos. DAS e DGK parcialmente deuterados foram obtidos através da troca de acetona ligada aos carbonos 4 e 8 do anel furanosídico por material perdeuterado. O indutor DAS marcado foi adicionado a mesofases de laurato de potássio, decilsulfato de sódio, cloreto de decil-amônio, decanoato de potássio e 1-N-lauroil-arrinato de potássio. O indutor DGK deuterado foi adicionado a laurato de potássio e decilsulfato de sódio. Para mesofases cujos anfífilos possuem cabeças carboxilato ou amônio, os espectros de RMN de deutério do DAS apresentam dois dubletes distintos, associados aos dois metilas deuterados do indutor. Quando a cabeça do anfífilo da matriz hospedeira foi sulfato, apenas um dublete foi observado. Em todas as mesofases preparadas, o DGK mostrou dubletes distintos. Considerando-se um sistema de coordenadas preso na molécula do indutor, é possível definir uma matriz de ordem e relacioná-la com a razão de desdobramento entre os dois dubletes. Verifica-se que esta relação depende de poucos termos, sendo aquele fora da diagonal o responsável pela distinguibilidade; seu valor depende de fatores estruturais do soluto e de sua interação com o meio anisotrópico.

LIQ - 09

RMN E PROPRIEDADES ÓPTICAS DE LIOMESOFASES COLESTERICAS TIPO II. M.R. Alcantara (Instituto de Química - UNICAMP) & J.A.Vanin (Instituto de Química - USP).

Técnicas de RMN de deutério e de microscopia óptica sob luz polarizada são usuais na caracterização de liomesofases colestéricas. Se a fase tipo II é preparada com óxido de deutério, o espectro de RMN da água orientada no meio líquido-cristalino se apresenta na forma de um diagrama de "po", para amostras em rotação no campo magnético. Em alguns casos, observa-se um "po"-modificado, mostrando uma distribuição preferencial dos diretores em torno do eixo de rotação. Ocasionalmente, rotação por tempo prolongado pode conduzir a um dublete bem definido, demonstrando um desenrolamento da superestrutura helicoidal. As texturas ao microscópio polarizado de amostras orientadas por campo magnético podem ser de vários tipos. Frequentemente, observa-se um chevron quando em orientação paralela. Amostras de passo longo não exibem esta textura e, dependendo da magnitude do passo, vários padrões serão possíveis. Nos casos mais favoráveis, as propriedades colestéricas podem ser caracterizadas para amostras em arranjo planar, através de medida da dispersão óptica rotatória ao microscópio, seguida da construção do gráfico de De Vries. Normalmente, sistemas tipo II colestéricos são uniaxiais negativos. Entretanto, em amostras de passo longo, efeitos de biaxialidade e mudança do sinal óptico são possíveis e detectáveis através de observações concópicas. A birrefringência das liomesofases colestéricas induzidas apresenta valores da mesma ordem que os associados às correspondentes nemáticas.

**LIQ - 10** FLUTUAÇÕES DE ORDEN E DENSIDADE MICELAR EM FASES UNIAXIAIS ( $N_u$  E  $N_c$ ) BIAIXIAL, E ISOTRÓPICA DE UM CRISTAL LÍQUIDO LIOTRÓPICO ESTUDADAS POR ESPALHAMENTO RAYLEIGH(\*) - Marcus B. Lacerda Santos (\*\*), G. Durand - Laboratoire de Physique des Solides, Drsay, França.

O estudo de flutuações excitadas termicamente em cristais líquidos nemáticos ganhou novo interesse com o aparecimento de sistemas liotrópicos apresentando fase biaxial. Neste sentido nós realizamos medidas de Espalhamento Rayleigh no sistema Laurato de Potássio : Decano - água em função da temperatura, compreendendo duas transições de fase uniaxial-biaxial, e uma, nemático-isotrópica. O parâmetro de ordem biaxial foi definido por de Gennes em termos de um tensor simétrico a traço nulo. A dinâmica das flutuações do parâmetro de ordem prediz então 5 modos normais: 2 associados às flutuações do módulo do parâmetro uniaxial e biaxial (modos escalares), 3 associados às rotações infinitesimais rípidas do elipsóide tensorial em torno dos seus eixos principais (modos orientacionais). Usando um formalismo de Landau-Khalatnikov nós estimamos as dependências de temperatura das frequências de relaxação associadas a estes 5 modos válidas para as fases uniaxiais e biaxial. Essas predições teóricas nos permitiram identificar os 5 modos nos nossos dados experimentais (funções de autocorrelação), em particular os que são inéditos em relação aos nemáticos clássicos: modo orientacional associado ao "diretor" biaxial; e os de flutuação de ordem uniaxial e biaxial em fases ordenadas. Além desses modos a experiência revelou a existência de um modo escalar lento e praticamente independente de T. Nós atribuímos esse modo às flutuações de densidade micelar e propomos um mecanismo para tal.

(\*) aceito para publicação do J. de Physique (Fr.)

(\*\*) Endereço atual : UFMG - Departamento de Física, Belo Horizonte - MG

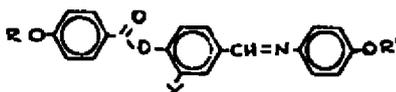
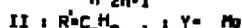
**LIQ - 11** UM ESTUDO DO ÍON BENZENOSULFONATO EM MESOFASES LIOTRÓPICAS E SOLUÇÕES MICELARES. Fred Y. Fujiwara e Angela R. Custódio, Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas.

Com o objetivo de estudar o comportamento do íon benzenossulfonato em sistemas micelares, a orientação parcial e a anisotropia da difusão rotacional do soluto foram determinadas. Os parâmetros de ordem, que descrevem a orientação parcial, foram determinados através dos acoplamentos dipolares obtidos dos espectros de RMN de prótons de mesofases nemáticas preparadas usando-se vários tensoativos catiônicos e aniônicos. Os tempos de relaxação  $T_1$  de C-13, determinados em soluções micelares isotrópicas, foram usados para caracterizar a difusão anisotrópica usando-se uma aproximação de um pião simétrico. De acordo com a carga elétrica das micelas e a natureza do grupo iônico do tensoativo, foi observada uma variação dos dois parâmetros de ordem independentes e da razão das constantes de difusão.

**LIQ - 12** SÍNTESE E ESTUDO DO EFEITO DE SUBSTITUINTE LATERAL SOBRE O MESOMORFISMO DA SÉRIE HOMÓLOGA P-(P'-N-HEPTILOXIBENZOILOXI)BENZILIDENE -P''-N-ALQUILOXIANILINA.

Hugo Gallardo e Francisco Carlos Silva, (Departamento de Física, Universidade Federal de Santa Catarina).

No presente trabalho estuda-se o efeito do substituinte lateral, sínteses de duas séries homólogas de P-(P'-N-heptiloxibenzoiloxil)benzilidene, P''-N-alquilo-xianilina (I) e P-(P''-heptiloxibenzoiloxil)-3-metoxibenzilidene-P''-N-alquilo-xianilina (II), e compara-se seu comportamento mesomórfico de ambas séries. Na série I, todos os membros apresentam uma ampla faixa de mesofase nemática. Os dois primeiros membros da série apresentam uma mesofase nemática e ausência de transições S-N e S-I. O gráfico das temperaturas de transições contra número de átomos de carbonos da cadeia alquílica, n, mostra uma alternância par-ímpar normal. A partir de n=3 observa-se um trimorfismo identificado como N, S<sub>B</sub>, S<sub>C</sub> e as temperaturas de transições sobem gradualmente a medida que a curva N-I cai com o aumento de n. Para a série II, observa-se uma diminuição de estabilidade da mesofase nemática por um comportamento similar de alternância par-ímpar de série I. O grupo lateral metoxi em na série II, desestabiliza a mesofase nemática e elimina totalmente a presença de mesofase sméctica. A estrutura das séries estudadas é a seguinte:



Agradecimentos Financeiros ao CAPES e CNPq.

LIQ - 13

A TECNOLOGIA DE FABRICAÇÃO DE MOSTRADORES DE CRISTAL LÍQUIDO, A.P.Mammone, S.Kobayashi, A.Pavani Filho e C.A.Pisani, FEC/UNICAMP, C.I.Z.Mammone e N.Januzzi, IMCTI.

A tecnologia de fabricação de mostradores de cristal líquido do tipo nemático torcido (LCD) está sendo estudada por nós no que concerne à sua importância no complexo eletrônico, sua história evolutiva desde as primeiras patentes até seu estágio atual e suas perspectivas futuras de desenvolvimento. Uma comparação com as demais tecnologias de mostradores (ELD, VFD e GPD) foi estudada, analisando-se as vantagens e desvantagens de cada uma. Os processos de fabricação de LCDs foram avaliados procurando-se identificar seus fatores limitantes e discutindo-se as ações de pesquisa e desenvolvimento essenciais para que o país possa dominar esta tecnologia.

LIQ - 14

ESTUDO DA GRAVAÇÃO DO  $\text{SnO}_2$  SOBRE VIDRO, L.A.C.de Almeida, C.A.B.Primiano, S.Kobayashi e A.P.Mammone, FEC/UNICAMP.

A confecção de mostradores de cristal líquido vem exigindo uma constante redução nas dimensões das configurações a serem gravadas nos contatos transparentes tendo-se, além disto, que assegurar linhas de melhor definição e uniformidade ao longo da placa de vidro. Neste trabalho foi estudado o processo de fotolitografia de filmes de  $\text{SnO}_2$  por via úmida depositados sobre placas de vidro pela técnica de CVD. Foram analisadas as influências dos diversos parâmetros envolvidos na limpeza da placa, na aplicação do fotorresista, no pré e pós-cozimento, na exposição ao UV, na revelação do fotorresista e na remoção do  $\text{SnO}_2$ . Foi estabelecido um processo para a etapa de fotogração do  $\text{SnO}_2$  sobre vidro, obtendo-se resoluções de até 4µm de largura.

**VI.9 - MAGNETISMO**

**Coord.:- Prof. Carlos Castilla Becerra (IFUSP)**

MAG - 01

PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DAS FERRITAS DE LÍTIO DILUÍDAS POR GÁLIO . Apresentaremos as propriedades físico-químicas e estruturais deste sistema e resultados experimentais preliminares sobre as suas propriedades magnéticas. Serão analisados formalismos empíricos para descrição daquelas propriedades.

EQUIPE : Paulo Henrique Dominques, Hélio Salim de Amorim, Fernando de Souza Barros e Julio Maria Neto - Instituto de Física - UFRJ

MAG - 02

O MÉTODO DA CONTRA CORRENTE : EXTENSÃO E RESULTADOS EXPERIMENTAIS

Renato Figueiredo Jardim, Cláudio Santos e Bernardo Laks - UNICAMP

Os métodos indutivos para a determinação de resistividade elétrica em metais apresentam vantagens significativas em relação ao método convencional (método potenciométrico ou quatro pontas).

Callarotti et al. <sup>(1)</sup> determinaram a resistividade de amostras metálicas com geometria tipo cilindro circular maciço através do método da contra corrente ou corrente de Foucault <sup>(2)</sup>.

Nós construímos um sistema experimental e desenvolvemos uma extensão da teoria para o tratamento de amostras com geometria tipo cilindro circular oco. Medidas de resistividade elétrica em diversas amostras metálicas (alumínio, bronze, cobre, latão e nióbio eletrolítico) foram efetuadas nas temperaturas ambiente e do nitrogênio líquido fornecendo um desvio inferior a 5%, quando comparados com resultados obtidos pelo método convencional.

(1) R.C.Callarotti and M.Alfonzo, J.Appl.Phys., 43,7(1972).

(2) C.P.Bean, R.W.DeBlois and L.B.Nesbitt, 30,12(1959).

MAG - 03

ESTUDO POR ESPECTROSCÓPIA BARKHAUSEN DA CRIAÇÃO E ALÍVIO DE DEFEITOS POR DEFORMAÇÃO MECÂNICA EM FERROMAGNETOS

Ruben Luís Sommer e Flávio Pohlmann Livi

Instituto de Física da UFRGS

Foi construído um sistema para detecção e análise de descontinuidades Barkhausen durante o processo de magnetização de materiais ferromagnéticos com sensibilidade de  $4 \cdot 10^{-7}$  emu. São obtiníveis dois tipos de distribuição: a) distribuição das amplitudes e b) distribuição de ocorrência contra campo aplicado.

Neste trabalho é apresentado um acompanhamento dos efeitos produzidos nos espectros Barkhausen do Ni puro (5N) por tensões mecânicas introduzidas e relaxamentos subsequentes.

MAG - 04

ESTUDO DO COMPORTAMENTO MAGNÉTICO DA LIGA CuMn COM ALTA CONCENTRAÇÃO DE Mn  
S.M.H. Ramos, W.R. Schreiner e J. Schaf, Instituto de Física, UFRGS.

CuMn em alta concentração (>74 at%) de manganês apresenta um caráter antiferromagnético. A baixas temperaturas o sistema comporta-se porém com irreversibilidades típicas de vidro de spin. Este trabalho estuda dois aspectos do CuMn: a anisotropia da fase vidro de spin e a hipótese de coexistência ou reentrância das fases antiferromagnéticas e vidro de spin. Utiliza-se medidas de magnetometria e NMR neste estudo.

MAG - 05

Estudo da Coercividade em Ímãs de Nd-Fe-B.  
João Carlos Gil Martínez, Frank P. Missell  
Instituto de Física - USP.

Em 1983 anunciou-se nos Estados Unidos e no Japão o desenvolvimento de ímãs permanentes feitos a partir de  $Nd_2Fe_{14}B$ . Ímãs baseados nesse novo composto intermetálico podem vir a substituir os magnetos tradicionais de  $SmCo_5$ , porque esse material não leva Co na sua composição, apresenta altos valores no campo coercivo  $H_c$  (20kOe) e possui um produto  $(BH)_{max}$  da ordem de 40 MG.Oe. Estamos tentando entender os mecanismos responsáveis pelas altas coercividades encontradas nesses ímãs. O campo coercivo é limitado pelo valor do campo de anisotropia  $H_a$ , quando cada grão constitui um monodomínio. Por outro lado para ímãs de  $SmCo_5$   $H_c$  é muito menor que  $H_a$ . Este fato foi explicado pela existência de defeitos no material que formam os chamados sítios de nucleação e aprisionamento. No  $Nd_2Fe_{14}B$  esses mecanismos tem uma contribuição cuja importância varia em função de temperatura. Duas amostras comerciais de  $Nd_2Fe_{14}B$  e uma de  $SmCo_5$  estão sendo medidas e comparadas com modelos teóricos. Começamos também a estudar perdas reversíveis e irreversíveis em função da geometria da amostra.

PATROCINADORES: FAPESP, FINEP, CNPq.

MAG - 06

PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DE LIGAS FERROMAGNÉTICAS  $Nd_2(Fe_{1-x}T_x)_{14}B$   
Valquíria Villas Boas Gomes e Frank P. Missell, Instituto de Física - USP.

Estamos estudando o composto  $Nd_2Fe_{14}B$  que serve para a fabricação de ímãs permanentes com um alto campo coercivo  $H_c$  e um alto produto energético  $(BH)_{max}$ . A única restrição em relação ao uso de ligas de Nd-Fe-B em dispositivos vem da forte dependência das suas propriedades com a temperatura. Isto, por sua vez, resulta do valor relativamente baixo ( $T_c = 300^\circ C$ ) da temperatura de Curie desta Liga. Estamos investigando o efeito sobre a temperatura de Curie  $T_c$  e o momento de saturação  $M_s$  ao substituir pequenas quantidades de metais de transição da série 3d (T) no lugar de ferro em ligas de Nd-Fe-B.

Foram fabricadas amostras de  $Nd_2(Fe_{1-x}T_x)_{14}B$  (ou melhor,  $Nd_{15}(Fe_{1-x}T_x)_{77}B_8$  para evitar problemas de segregação de ferro), sendo T = Co, Mn e Cr. As amostras foram caracterizadas por difração de raio-X, o que nos permitiu determinar os parâmetros da rede cristalina de cada amostra e compará-los com os valores da literatura. A temperatura de Curie e o momento de saturação das amostras foram determinados através de medidas termomagnéticas num magnetômetro de amostra vibrante.

Os valores do momento de saturação  $M_s$  serão comparados com o modelo de Slater-Pauling e cálculos de bandas mais recentes. (CNPq-FAPESP-FINEP).

MAG - 07

TRANSFERÊNCIA DE EXCITAÇÕES NO  $\text{CaNiF}_2$ . M. C. Terrile - Instituto de Física e Química de São Carlos - USP, Caixa Postal 369, 13560-São Carlos, SP.

Analisamos a transferência de excitações entre íons  $\text{Ni}^{2+}$  no ferromagneto unidimensional  $\text{CaNiF}_2$ . Considerando a simetria, a natureza dos estados envolvidos e regras de seleção, procuramos as interações que seriam efetivas nessa transferência.

MAG - 08

PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DE FERRITAS DE LÍTIO DILUIDAS POR ALUMÍNIO E GÁLIO ; Será examinado com detalhe os processos de interação entre pares de íons férricos situados em primeira e segunda vizinhanças cristalográficas. Outro objetivo deste trabalho é de desenvolver um formalismo empírico para descrever sistemas antiferromagnéticos diluídos.

EQUIPE : Julio Maria Neto, Paulo Henrique Domingues e Fernando de Souza Barros.  
Instituto de Física - UFRJ.

MAG - 09

DIAGRAMA DE FASES DO HAMILTONIANO DE HUBBARD COM CORRELAÇÃO ESPACIAL. P.H.Mora, J.R.Iglesias, Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, e E.V.Andá, Instituto de Física da Universidade Federal Fluminense.

O diagrama de fases do Hamiltoniano de Hubbard é obtido mediante uma aproximação de analogia de liga que leva em conta a correlação entre as ocupações de sítios vizinhos. No caso  $\langle n_i \rangle = 1$ , a transição para o magnetismo é acompanhada de uma transição metal-isolante. É discutida a forma da densidade de estados em função de  $\langle n_i \rangle$  e da correlação coulombiana  $U$ .

MAG - 10

MAGNONS DE SUPERFÍCIE E ESTRUTURA MAGNÉTICA DE SUPERFÍCIES EM FERROMAGNETOS DE HEISENBERG. Donizetti Aparecido dos Santos e Bernardo Laks (Departamento de Física Aplicada, Instituto de Física "Gleb Wataghin", UNICAMP)

Analisamos a estrutura magnética de ferromagnetos de Heisenberg em sistemas cúbico simples que apresentam competição entre a ordem ferromagnética e antiferromagnética. Devido a interação antiferromagnética entre segundos vizinhos pode ocorrer um rearranjo de spins na região próxima à superfície. A dispersão dos magnons de superfície é obtida através de um cálculo de filmes finos, evidenciando o aparecimento de 'soft modes' de magnons superficiais. Calculamos a densidade de magnons para o caso de filme, bem como para um sistema semi-infinito, via formalismo de função de Green de Zubarev. A solução da equação de Dyson é obtida pelo método de matriz transferência.

MAG - 11

MAGNETOELASTIC PROPERTIES OF  $\text{ErFe}_2$ . J.E.Schmidt, J.B.M. da Cunha and P.J.Viccare, Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

The intermetallic compound  $\text{ErFe}_2$  has a magnetic transition at 47 K which is the result of the competition of anisotropy fields of the atoms at different sites of the crystal structure. This transition is accompanied by a spin rotation which disturbs the magnetoelastic properties of the system. The measurement of the linear magnetostriction revealed a large peak at 47 K associated with the spin rotation. We are presently trying to interpret the data assuming that the energy of the system attains a new minimum which involves necessarily a deformation of the crystal. The results are going to be compared with the analysis made of Mössbauer effect\* on the same sample.

\*J.B.M. da Cunha, Thesis work.

MAG - 12

MAGNETIZAÇÃO DE  $\text{Cu-L-ALANINE}_2$  A MUITO BAIXAS TEMPERATURAS

R. Calvo-INTEC  
H.A. Novak-IF-UFRJ  
S. Useroff- S. Diego St  
D.G. Symko- U. Utah

Medidas de magnetização de  $\text{Cu-L-Alanine}_2$  foram feitas em função da temperatura entre 0,01 e 300 K em amostra policristalina na presença de um campo constante de 10 Oe (abaixo de 4K) e 1 KOe (acima de 4K). Dados de EPR na mesma amostra acima de 4K sugerem um comportamento magnético bidimensional, o que não está de acordo com os dados de magnetização abaixo de 4K. Estes indicam um comportamento de cadeia linear antiferromagnética com o fator  $g=2,12$  (de acordo com EPR) e  $J/k=0,515$  K. Abaixo de 0,4 K há um desvio deste comportamento com uma anomalia em 0,09 K e um crescimento da magnetização abaixo de 0,03K. Algumas interpretações são sugeridas.

MAG - 13

## COMPORTAMENTO CAÓTICO MULTIDIMENSIONAL DE MAGNONS PARAMÉTRICOS

Flávio Menezes de Aguiar e Sergio Machado Rezende

Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco

O estágio não linear da excitação paramétrica de ondas de spin (magnons) em isolantes ferromagnéticos é estudado teoricamente. Baseados no modelo de dois modos de Nakamura e outros (1), observamos, com o aumento do campo de bombeamento, uma sequência onde um ciclo - 2 perde estabilidade e dá lugar a um regime caótico diretamente, em acordo qualitativo com resultados recentes obtidos em nosso laboratório (2). Mapas de retorno resultantes apresentam ramificações indicativas de uma dimensionalidade superior (3).

(1) K.Nakamura, S.Ohta, K.Kawasaki; J.Phys.C 15 (1982) L143.

(2) F.M.de Aguiar, S.M.Rezende; Phys.Rev.Letters (1986), a ser publicado.

(3) E.R.Hunt, R.W.Rollins; Phys.Rev.A 29 (1984) 1000.

MAG - 14

DIAGRAMA DE FASE DO ANTIFERROMAGNETO  $\text{Ni}(\text{BrO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ . Valdir Bindilatti (IFUSP),

L.Puech (CNRS-Grenoble, França) e Nei Fernandes Oliveira Junior (IFUSP).

Estamos determinando experimentalmente o diagrama de fase deste antiferromagneto através de medidas de susceptibilidade em função do campo magnético e da temperatura. Estudos anteriores indicam que este material (estrutura f.c.c.) apresenta um ordenamento ( $T_N = 0,21\text{K}$ ) do tipo tetraédrico devido a uma forte anisotropia do campo cristalino de simetria bastante peculiar. Utilizamos a aproximação de campo médio em um modelo com anisotropia infinita, e simetria apropriada, com interações antiferromagnéticas entre primeiros e segundos vizinhos para fazer uma previsão do diagrama de fase. Esta previsão apresenta possibilidades interessantes como "critical e bicritical end point" para uma direção específica do campo magnético. (FAPESP, CNPq, FINEP)

MAG - 15

MAGNETIZAÇÃO E SUSCEPTIBILIDADE MAGNÉTICA NO ANTIFERROMAGNETO DILUÍDO  $\text{Fe}_{0.69}\text{Zn}_{0.31}\text{F}_2$  SOB FORTES CAMPOS MAGNÉTICOSFrederico C. Montanegro e Sergio M. Rezende

Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco 50000, Recife Pe

Medidas preliminares de magnetização e susceptibilidade magnética (dc) foram efetuadas no sistema Ising com campo magnético aleatório  $\text{Fe}_{0.69}\text{Zn}_{0.31}\text{F}_2$  (d=3), em campos  $0 < H < 5\text{T}$ . É mostrado o comportamento da magnetização nas proximidades da temperatura crítica  $T_c(H)$ , onde a ocorrência de efeitos de histerese e metaestabilidade são esperados, usando procedimentos de resfriamento a campo nulo (ZFC) e com campo magnético aplicado (FC).

MAG - 16

ESTUDOS EXPERIMENTAIS DE SISTEMAS COM BAIXA E DIMENSÃO MAGNÉTICA : Serão apresentados as propriedades físico-químicas e estruturais de alguns compostos apropriados para estes estudos. Os compostos selecionados são sulfetos de bário (ou potássio) e ferro, além de outros sulfetos diluídos por lítio.

EQUIPE : Paulo Henrique Domingues e Julio Maria Neto - Instituto de Física, UFRJ.

MAG - 17

ESPECTROSCOPIA ISOCROMÁTICA DE BREMSSTRAHLUNG NO  
MODELO DE ANDERSON  
Hidembergue O. da Frota e Luiz N. de Oliveira  
Dept. de Física-ICE(UA) / IFQSC - USP

A espectroscopia isocromática de bremsstrahlung (BIS) e o seu reverso, a fotoemissão por raios-X (XPS), têm sido largamente aplicadas a compostos de terras raras com valência flutuante. Essas aplicações experimentais despertaram interesse pelas propriedades dinâmicas do Hamiltoniano de Anderson, sugerido inicialmente para ligas metálicas diluídas e que descreve também as propriedades locais desses compostos.

Recentemente desenvolvemos um algoritmo numérico que, para qualquer ponto do espaço paramétrico e degenerescência de spin dois, permitiu-nos calcular, pela primeira vez, uma propriedade dinâmica daquele hamiltoniano - a XPS.

Motivados por esse sucesso, no presente trabalho calculamos os espectros de BIS, que comparados com os espectros de XPS, servem para formularmos regras quantitativas que interpretam os resultados experimentais.

- (1) Hidembergue O. da Frota, Tese de Doutorado - IFQSC- USP (1985)
- (2) H.O.Frota e L.N.Oliveira, submetido a publicação

MAG - 18

EFEITO DE PROXIMIDADE EM UMA INTERFACE MAGNÉTICA. Silvia Selsar e Norberto Majlis - Instituto de Física - UFF

Estuda-se a interface (111) entre dois ferromagnetos anisotrópicos de Heisenberg f.c.c., pelo método da função de Green na aproximação RPA. No caso de uma diferença grande entre as temperaturas de transição  $T_c$  de ambos lados, encontra-se que o ferromagneto de maior  $T_c$  induz magnetização permanente no de menor  $T_c$ , a temperaturas contidas no intervalo entre ambas temperaturas críticas. Encontra-se vários ramos de mágnons localizados na região da interface.

MAG - 19

**BANDA MAGNÉTICA DE IMPUREZAS EM CADEIAS DE HEISENBERG.** Horberto Majlis e Silvia Salzer - Universidade Federal Fluminense (UFF)

Considerou-se a perturbação de uma cadeia ferromagnética Heisenberg pela presença de impurezas magnéticas substitucionais. Mediante procedimento perturbatório análogo aos de Suhi-Nakamura e Ruderman e Kittel, obteve-se uma interação efetiva de Heisenberg isotrópica, por troca de mágnons entre impurezas, cuja integral efetiva de troca resulta exponencialmente decrescente com a distância, para uma matriz ferromagnética com anisotropia. Calculou-se, seguindo o método de Matsubara e Toyozawa, a média sobre as configurações aleatórias das impurezas, da função de Green de um mágnon de impurezas, e a densidade de estados da banda magnética de impurezas.

MAG - 20

**SUSCEPTIBILIDADE DINÂMICA DE UM SISTEMA DE VALÊNCIA INTERMEDIÁRIA.**

A.S.R. Simões e J.R. Iglesias, Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Consideramos um sistema de valência intermediária caracterizado por uma banda estreita ( $f$ ) e uma banda de condução ( $c$ ). Incluem-se  $V$ , a hibridização  $c-f$ ,  $U$ , a repulsão Coulombiana  $f-f$  e  $G$ , a repulsão  $c-f$ . A susceptibilidade dinâmica é determinada em função destes parâmetros. A partir dela é possível determinar as propriedades magnéticas e de transporte.

**VI.10 - CIÊNCIA DOS MATERIAIS/PROPRIEDADES MECÂNICAS**

**Coord.:- Prof. José Manoel V.Martins (IFUSP)**

MAT - 01

## FADIGA DE JUNTA SOLDADA DO AÇO INOXIDÁVEL AUSTENÍTICO

Neide K. Kuroboto, Ari Sauer Guimarães, Paulo Emílio V. de Miranda, COPPE/UFRJ  
 Roberto Pascual, INE-RJ

Foram testadas amostras fabricadas a partir de chapas de aço inoxidável austenítico, tipo AISI 304 L, com 4 mm de espessura em fadiga por flexão, à temperatura ambiente.

Os corpos de prova para os ensaios de fadiga e as amostras para medidas de microdureza e teor de ferrita delta das juntas soldadas foram lixadas e polidas mecanicamente até a alumina, com posterior polimento eletrolítico. As medidas de microdureza foram realizadas desde a região soldada até o metal de base. As soldas foram feitas pelo processo MIG automatizado, com arame 308 L, sob proteção da mistura Ar-2% O<sub>2</sub> em ambas as faces. Chanfro reto e passe único.

Obtiveram-se curvas de vida em fadiga para o aço recosido e para juntas soldadas pelo processo MIG. Caracterizou-se a junta soldada metalográfica e mecanicamente, tendo também sido analisada a morfologia da superfície de fratura por microscopia eletrônica de varredura. As diferenças na vida em fadiga foram avaliadas com base nas informações obtidas por microscopia ótica e eletrônica de varredura.

MAT - 02

## A TENSÃO DE ESCOAMENTO EM SOLUÇÕES SÓLIDAS

R. Pascual

Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro

Serão apresentados resultados experimentais e modelos teóricos relativos à tensão de escoamento em soluções sólidas diluídas de estrutura c.f.c e h.c. Os temas que serão discutidos são: a variação da tensão de escoamento com a concentração e a temperatura, o comportamento da tensão de escoamento a baixas temperaturas e o conceito de endurecimento equivalente.

MAT - 03

INFLUÊNCIA DA DENSIDADE DE TRINCAS NA TENACIDADE À FRATURA DE ALUMINAS,  
 Tullio Pinaud Madruga, INE.

A medição de tenacidade à fratura em materiais cerâmicos é feita, via de regra, introduzindo-se um entalhe na amostra a ensaiar. Uma técnica muito difundida consiste em produzir este entalhe através de um disco de corte diamantado. Vários autores mencionaram que o valor da tenacidade à fratura, uma propriedade do material, apresenta um acréscimo com o aumento da largura do entalhe. Em recente trabalho constatamos a mesma variação. Explicações fundadas em concentrações de tensões foram encontradas na literatura.

A presente exposição pretende discutir a influência da largura do entalhe no valor da tenacidade à fratura em termos de variação de densidade de trincas. Uma maior densidade de trincas, absorvendo mais energia no decorrer do ensaio, seria responsável pelo valor experimental de propriedade medida. Tem-se tentado quantificar a densidade de trincas visando relacioná-la com a largura do entalhe, no entanto existe dificuldade em visualizar as trincas. Medidas ainda não muito confiáveis mostram uma tendência para aumentar a densidade de trincas com o aumento da largura do entalhe.

MAT - 04

MICRODUREZA DE MONOCRISTAIS COM ANISOTROPIA PLÁSTICA  
VICENTE ROBERTO DUMKE - UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

As medidas das impressões produzidas por uma ponta Vickers são afetadas pela orientação das faces da pirâmide em relação às direções de deslizamento dos monocristais. Foram aplicadas cargas de diversas magnitudes e feitas análises fotoelásticas das tensões residuais nos cristais transparentes, além de "etching" para revelar padrões de discordâncias. Fica evidente que a carga se distribui em diferentes áreas efetivas, produzindo deformações - plásticas e campos elásticos residuais dependentes da orientação do penetrador. Foram feitas observações em LiF, KCl e Si e as influências de algumas impurezas são discutidas. No caso de silício as experiências foram feitas acima de 450°C que é a temperatura de transição frágil-plástica.

MAT - 05

ANÁLISE POR DIFRAÇÃO DE RAIOS-X DOS EFEITOS SUPERFICIAIS PRODUZIDOS POR  
HIDROGENAÇÃO CATÓDICA EM AÇOS INOXIDÁVEIS

Alvaro Saavedra - Seção de Engenharia e Ciência dos Materiais, Instituto Militar de Engenharia - Rio de Janeiro.

São revisados os diferentes métodos, por difração de raios-X, de determinação de parâmetros que caracterizam as mudanças que ocorrem em camadas finas do aço inoxidável austenítico durante a hidrogenação catódica e posterior degaseificação. Esses parâmetros permitem acompanhar a cinética da transformação e a distribuição das fases, assim como as deformações que podem chegar a provocar microtrincas na superfície da amostra.

MAT - 06

REAÇÕES ENTRE GASES E METAIS: José de Anchieta Rodrigues; Maria I. B. Bernardi; Marta B. de Moraes; Walter J. Botta Filho; Kazuyuki Akune. Departamento de Engenharia de Materiais - UFSCar.

Vários aspectos da reação metal-gás serão enfocados: cinética de absorção e degaseificação de hidrogênio por ligas Nb-Ti, (equipamento); permeação de hidrogênio através de folhas delgadas de aço inoxidável, desenvolvido em célula dupla eletrolítica; nitretação de ligas e metais refratários. São utilizadas para a investigação nesta área, técnicas de reação metal-gás em câmaras com pressão e temperatura controladas, célula eletrolítica, microscopia óptica, microscopia eletrônica de transmissão e resistividade elétrica.

MAT - 07

SOLUBILIDADE DO HIDROGÊNIO NA LIGA NbTi46X-p: Odila Florêncio; Universidade Estadual de Maringá; José Roberto Gonçalves da Silva; José da Anchieta Rodrigues; Universidade Federal de São Carlos.

Amostras Policristalinas da liga supercondutora NbTi46X-p., de alta pureza, foram dopadas com hidrogênio, em equilíbrio com a atmosfera gasosa, nas pressões parciais de 40, 60 e 80 Torr, em diferentes temperaturas. Estes dados permitem calcular grandezas termodinâmicas, como a entalpia e a entropia parciais molares, da reação metal-gás.

MAT - 08

ESTUDO DA LUDLAMITA OXIDADA

Ligia de F. Moreira, Hélio Salim de Amorim e E. Mattievich; Instituto de Física da UFRJ.

Foram estudadas seis amostras em pó de ludlamita sintética,  $Fe_3^{2+}(PO_4)_2(H_2O)_4$ , em diferentes graus de oxidação, por espectroscopia Mössbauer e difração de raios-X.

O objetivo do presente estudo é verificar o comportamento deste fosfato frente a oxidação em fase sólida, e compará-lo com a vivianita,

$Fe_3^{2+}(PO_4)_2(H_2O)_8$ , previamente estudada\*.

Neste caso verifica-se que, no processo de oxidação em fase sólida (oxidação espontânea dos cristais expostos ao ar, sob aquecimento controlado a temperatura máxima de 120°C), os valores dos parâmetros de célula unitária são modificados, porém sem variações de simetria no cristal. Para concentrações superiores a 50% de ions  $Fe^{3+}$  nota-se mudanças marcantes, tanto nos valores dos parâmetros Mössbauer, como nos espectros de difração de raios-X. Estas mudanças indicam que a partir de um certo grau de oxidação (em torno de 50%) ocorrem alterações estruturais análogas as observadas na vivianita.

Financiado pela FINEP e CNPq.

\* Poullen, Jean François - Tese Doutorado - Universidade Pierre et Marie Curie - Paris - França (1982).

MAT - 09

SUSCEPTIBILIDADE DIELETRICA DE SÍLICA AMORFA POROSA. Ervino Carlos Ziemath, Dayse Iara dos Santos, Heitor Cury Basso e Michel André Aegerter, Instituto de Física e Química de São Carlos - Universidade de São Paulo.

Sílica amorfa porosa (aerogel) foi preparada pelo método sol-gel a partir de solução organo-metalica TMOS, tendo uma densidade mínima de 0,3 g/cm<sup>3</sup> e uma área superficial de até 750 m<sup>2</sup>/g. A susceptibilidade dielétrica ( $\epsilon'$ ,  $\epsilon''$  e  $\text{tg}\delta$ ) foi medida entre 1.5 e 300 K, variando a frequência de 10<sup>-3</sup> até 10<sup>6</sup> Hz. Os resultados são discutidos com teorias atuais.

MAT - 10

CONDUTIVIDADE ELÉTRICA EM FILMES FINOS FORMADOS POR UMA SUSPENSÃO DE PARTÍCULAS DE COBRE NO ACETILENO POLIMERIZADO.

Rogério Pinto Mota - UNICAMP

Medições da condutividade elétrica em função da temperatura apresentaram um comportamento linear para  $\ln \sigma$  e  $(1/T)^{1/2}$ , evidenciando uma concordância com o comportamento da condutividade elétrica em materiais formados por uma mistura metal-isolante, com a condutividade mostrando acentuado acréscimo conforme se aumenta o teor de cobre na matriz formada pelo acetileno polimerizado, cujos resultados serão discutidos.

MAT - 11

FENÔMENOS DE TRANSPORTE EM COMPOSTOS DE GRAFITE INTERCALADOS.

M.P. da Silva; A.A. Bernussi; C. Santos e G.M. Gualberto. Instituto de Física "Clélio Wataghin" - UNICAMP.

São apresentadas medidas da Resistividade e da Magnetoresistência em função da temperatura e do campo magnético em amostras de Grafite pirolítico e de Grafite intercalado com  $\text{FeCl}_3$  para diferentes estágios. Os intercalados foram preparados pelo método de Fase Gasosa a Duas Temperaturas e caracterizados por Difração de Raió-X. A partir dos resultados, estuda-se o comportamento da condutividade elétrica e da magnetoresistência dos intercalados em função do estágio, relacionando-as com aqueles obtidos para o Grafite puro.

MAT - 12

ALCANÇE E DIFUSÃO DE IONS DE BI IMPLANTADOS EM POLÍMEROS

R.B. Guimarães, L. Amarel, M. Behar, J.P. Souza e F. Zawislak - Instituto de Física, UFRGS.

Neste trabalho estudou-se o alcance e distribuição de íons de  $\text{Bi}_{209}$  implantados em polímero AZ111 (composição nominal poli  $(\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2)$ ). As energias de implantação utilizadas foram de 10 a 400 KeV para doses fixas de  $10^{14}$  íons/cm<sup>2</sup>. Alcances e perfis de distribuição foram medidos com a técnica de RES (Rutherford Backscattering) e os resultados analisados em termos de previsões do TRIM (TRANsport of Ions in Matter - computer simulation). Investigou-se também a difusão do Bi em função de tratamentos térmicos na faixa de temperatura entre 40°C e 200°C.

MAT - 13

METAESTABILIDADE DA FASE DE ALTA PRESSÃO EM  $ZrO_2$ 

J.A.R. da Jornada, Instituto de Física da UFRGS - Porto Alegre.

S.Bloch e C.J.Piermarini, National Bureau of Standards, Washington DC.

Através de medidas de difração de raios-X na cela de pressão tipo bigorna de diamante, foi estudado o efeito de tratamentos térmicos a diferentes pressões sobre a estabilidade das fases monoclinica e tetragonal II em  $ZrO_2$  sob pressões de até 100 kbar. O uso combinado de pressão e temperatura permitiu modificar consideravelmente a histerese na transformação de fase monoclinica-tetragonal II, indicando que os defeitos envolvidos na sua nucleação possuem energia de ativação relativamente pequena. Através de tratamentos térmicos adequados, conseguiu-se reter metaestavelmente a fase tetragonal II, que só é estável apenas a pressões maiores que 40 kbar.

MAT - 14

## FORMAÇÃO DE SILICETOS DE NI E DE TI INDUZIDA POR PROCESSO TÉRMICO RÁPIDO.

A. Avelino Passa, J.P. de Souza e I.J.R. Baumvol - Instituto de Física, UFRGS.

Estudou-se a formação de silicetos de níquel e de titânio por processo térmico rápido, em amostras de silício monocristalino contendo filme de metal depositado sobre sua superfície. Foram experimentados ciclos térmicos com temperaturas entre 450 e 1050 °C e duração entre 10 e 120 s. Empregando-se técnica RBS (Rutherford Backscattering) determinou-se a estequiometria e a espessura dos silicetos formados, assim como a redistribuição de dopantes de silício.

MAT - 15

MÉDIA DA CONDUTIVIDADE DO  $MnO_2$  IMPREGNADO EM POLÍMEROS - N.F.Leite - A.Rubira -

F.Galembeck - H.Vargas - IFGM - Unicamp

O objetivo do trabalho é estudar como varia a condutividade elétrica do Óxido de Manganês impregnado em polímeros (Polietileno e Teflon) em função da temperatura e na presença de gases. O interesse neste assunto é devido à utilização destes compostos como materiais catalíticos.

**VI.11 - METAIS E LIGAS**

**Coord.:- Prof. José d'Albuquerque e Castro (UFF)**

MET - 01

ESTUDO DE LIGAS MAGNÉTICAS DILUÍDAS Y-TERRA RARA E Sc-TERRA RARA.  
P. Puroeur Neto, Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Estuda-se as propriedades magnetoelásticas, magnéticas e de transporte de  $m_0$  monocristais de Y e Sc dopados com terras raras como impurezas magnéticas. Deriva-se os coeficientes magnetoelásticos da interação entre íons isolados e a rede. Medidas de magnetoresistência fornecem os coeficientes de exchange e de quadrupolo dos íons isolados com os elétrons de condução. As medidas magnéticas caracterizam as propriedades de vidro de spin em baixas temperaturas. As ligas são sistemas interessantes para comparações com as propriedades previstas na teoria do campo médio para vidros de spin com campo cristalino uniaxial.

MET - 02

ENERGIA DE QUASE-PARTÍCULA DE ESTADOS  $4f$ - EM SISTEMAS DE TERRAS RARAS: REGIME DE CORRELAÇÃO FRACA

A. Troper\*, I.C. da Cunha Lima\*\* (\* Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, \*\* Instituto de Pesquisas Espaciais)

A energia de quase-partícula para estados localizados  $4f$  de Terras Raras foi calculada usando o modelo de Ramirez-Falicov-Kimball. A correlação Coulombiana entre os estados localizados  $f$  e os estados itinerantes  $d$  é considerada no regime de correlação fraca, sendo no entanto numa hierarquia superior a aproximação Hartree-Fock usual.

Mostra-se que, para uma faixa de valores razoáveis dos parâmetros do modelo, obtém-se uma estrutura bimodal para as funções de Green  $f$ - $f$ .

MET - 03

FORMAÇÃO DE MOMENTOS LOCALIZADOS EM IMPUREZAS NOBRES NO CASO-LÍNIO: EFEITO DE PERÍODO.

Carlos Eduardo Leal\* e Amós Troper\*\* (\* Universidade do Estado do Rio de Janeiro, \*\* Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas)

Uma extensão do modelo Daniel-Friedel é utilizada para descrever os campos hiperfinos em impurezas nobres diluídas em matrix de Gd.

Este cálculo permite descrever a formação dos momentos magnéticos locais no sítio dessas impurezas isoeletrônicas, exibindo claramente o efeito de período. Os resultados numéricos obtidos estão em excelente acordo com a sistemática experimental.

MET - 04

INFLUÊNCIAS DA ADIÇÃO DE FERRO NO SISTEMA KONDO  $\text{CeAl}_2$  - A.Y. Ta-

keuchi e S.F. da Cunha - Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas. Medidas de Resistividade Elétrica do Sistema  $\text{Ce}(\text{Fe}_{1-x}\text{Al}_x)_2$ , na região rica em alumínio, em função da temperatura (1,5-300K) mostraram que para  $x \leq 0,90$  o sistema apresenta um comportamento semelhante ao extremo  $\text{CeAl}_2$ . A temperatura do mínimo varia pouco com a concentração de ferro. Para concentrações mais altas de ferro, a resistividade elétrica apresenta um comportamento totalmente distinto com o aparecimento de um mínimo à temperaturas intermediárias. A temperatura deste mínimo vai diminuindo gradativamente à medida que a quantidade de Fe aumenta. Análise do parâmetro de rede  $a_0$  até 30% de Fe na região rica em Al demonstraram que a estrutura cúbica C15 do tipo  $\text{MgCu}_2$  permanece a mesma do extremo  $\text{CeAl}_2$ . O comportamento linear de  $a_0$  versus  $x$  indica que a valência do estado normal  $\text{Ce}^{3+}$  também é preservada.

MET - 05

EXPANSÃO PERTURBATIVA PARA SISTEMAS DE VALÊNCIA INTERMEDIÁRIA

Gerardo Martínez e Mário E. Foglio

Instituto de Física - UNICAMP - Campinas - São Paulo

Nos modelos de valência intermediária que enfatizam o aspecto iônico das terras raras, são utilizados os operadores de transferência da carga de Hubbard (1), ou uma extensão deles (2) que permite variar a concentração de impurezas no sistema. O inconveniente destes operadores é que não se pode aplicar-lhes o teorema de Wick, e para contornar esse problema a expansão da energia livre em cumulantes tem sido usada. O problema de Ising e o ferromagneto clássico de Heisenberg tem sido estudado por este método, e Hubbard (1) o tem aplicado para a banda estreita. No trabalho que apresentamos, temos extendido o trabalho de Hubbard ao problema de valência intermediária, considerando o Hamiltoniano de hibridização como a perturbação. O nosso objetivo presente é introduzir renormalização de vértices e arestas no tratamento.

(1) J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. a285 (1965) 542(2) M.E. Foglio, phys. stat. sol. (b) 86 (1978) 459; 87 (1978) 87

MET - 06

RELAÇÃO DE IMPUREZA DE EUROPIO DE VALENCIA INTERMEDIARIA

Mário Eusebio Foglio, UNICAMP.

São conhecidos compostos (a.g.  $\text{EuSi}_2\text{Pd}_2$ ) onde a terra rara está num estado de valência intermediária. Os dois estados de carga são  $\text{Eu}^{2+}$  ( $4f^7, L=0, S=J=3,5$ ) e  $\text{Eu}^{3+}$  ( $4f^6, L=S=3, J=0, \dots, 6$ ). Para descrever uma impureza de Eu usamos um Hamiltoniano  $H = H_0 + H_V$ , onde  $H_0$  descreve os dois estados iônicos de Eu e os elétrons de condução. A interação  $H_V$  é uma extensão do Hamiltoniano de hibridação usado por Foglio e Schlottmann no caso do Tm (1).

Calculamos a função de autocorrelação da componente  $x$  da magnetização, empregando uma extensão do método usado pelos mesmos autores para calcular a relaxação do Ca em Cd metálico (2).

O objetivo do trabalho é comparar com as medições de Holland-Moritz (3) do espalhamento inelástico de neutrons em  $\text{EuPd}_2\text{Si}_2$ , e obter a constante de acoplamento que deve ser usada na interação  $H_V$ .

(1) M.E. Foglio e P. Schlottmann, Solid State Comm. 42 (1982) 423

(2) M.E. Foglio e P. Schlottmann IC/85/289, submetido a Physica Status Solidi.

(3) E. Holland-Moritz, J. Magnetism and Magn. Mat. 47s48 (1985) 127.

MET - 07

QUASI-PARTICLE SPECTRUM OF THE HUBBARD MODEL, R. Kishore, INPE - Instituto de Pesquisas Espaciais, C.P. 513, 12200 São José dos Campos, SP.

We study the quasi-particle spectrum of the Hubbard model by using a projection operator formalism of the Green's function. In weak electron correlation regime, we obtain the exact results upto the second order in the intraatomic interaction. For strong electron correlations, the quasi-particle spectrum consists of two Hubbard bands. For each Hubbard band, the quasi-particle energy is obtained exactly upto first order in the transfer integral. We also propose a semiclassical approximation which gives the above mentioned exact results in proper limits. Earlier approximations of Hubbard and Ikada et al are found to be the special cases of this approximation.

MET - 08

FATOR DE ESTRUTURA DE UM GÁS DE ELÉTRONS LIVRES. - J.B.Bastos Filho e N.M.Borges - Departamento de Física da Universidade Federal de Alagoas. 57000 Maceió - Al - Brasil.

Admitindo uma relação de dispersão, envolvendo energia  $\epsilon$  e momento linear  $p$ , do tipo  $\epsilon \sim p^2$ , estamos procedendo um estudo do fator de estrutura de um gás de elétrons livres, a  $T=0^\circ K$ , em várias representações a saber, (momento linear, energia), (espaço, energia), (momento linear, tempo) e (espaço, tempo). Alguns aspectos são transparentes, porém outros não nos parecem admitir interpretações diretas. Cogitamos também acerca da viabilidade de um estudo análogo no qual poderiam estar envolvidas outras relações de dispersão.

MET - 09

DETECÇÃO DE UMA SUPERESTRUTURA NO HIDRETO  $ZrV_2H_4$  PELA TÉCNICA DE RPE.

A.G.S.Cantó e J.F.Suassuna - IFGW - UNICAMP

Experiências de Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE) foram realizadas nos hidretos  $ZrV_2H_x$  ( $0 < x < 5$ ) dopados com íons de prova  $Gd^{3+}$  e  $Er^{3+}$ . Para baixas concentrações de hidrogênio, incluindo o composto puro ( $x=0$ ), não foram observadas linhas de RPE tanto para Gd como para Er. Isto pode ser explicado em termos de uma transição de fase estrutural cúbica-romboedral que ocorre a 120K no composto  $ZrV_2$ . Para concentrações intermediárias e altas de hidrogênio, a ressonância do Gd e os parâmetros de RPE (g-shift e Razão de Korringa) foram medidos em função da concentração de hidrogênio. Por outro lado, para o íon de Er, a ressonância foi observada apenas no hidreto  $ZrV_2H_4$ . O valor médio de g,  $6.7 \pm 0.1$ , foi encontrado próximo ao fator-g do estado fundamental  $F_7$  para o  $Er^{3+}$  em um campo cristalino de simetria cúbica. Assumindo uma superestrutura dos íons de hidrogênio, localizados nos 16 sítios intersticiais (2A, 2B) da rede  $ZrV_2H_4$ , calculamos os parâmetros de CEF ( $B_4$  e  $B_6$ ) baseado no modelo PCM. Este cálculo leva a um estado fundamental  $F_7$  para o íon de Er, assumindo uma carga efetiva negativa para os íons de hidrogênio, distribuídos tetraedricamente em torno dos íons de Er localizados nos sítios do Zr. Nossos resultados são consistentes com a observação prévia de uma superestrutura de hidrogênio no hidreto  $ZrV_2H_4$ , através da técnica de espalhamento inelástico de neutrons.

MET - 10

RESSONANCIA MAGNETICA NUCLEAR NOS HIDRETOS  $ZrV_2H_x$  E  $ZrCr_2H_x$   
 Nilson Brasil Filho e Jose Suassuna Filho - IPGW - UNICAMP

Experiências de RMN pulsada estão sendo conduzidas nos hidretos metálicos  $ZrV_2H_x$ ,  $ZrCr_2H_x$  em função da temperatura (180K T 480K) e da concentração de hidrogênio ( $2 \times 5$ ). Foram medidos os tempos de relaxação spin-rede,  $T_1$ , e spin-spin,  $T_2$ , e, a partir destes, as energias de ativação para o processo de difusão do hidrogênio nestes hidretos foram determinadas. No  $ZrCr_2H_x$ , nossos resultados evidenciam que apenas sítios intersticiais tipo (2Zr,2Cr) são ocupados, enquanto que no  $ZrV_2H_x$ , dois tipos de sítios (2Zr,2V) e (1Zr,3V) são preenchidos para concentrações de hidrogênio a partir de x igual a 2. É demonstrado que as contribuições à relaxação devido aos elétrons de condução (mecanismo de Korrington) podem ser obtidas em função da concentração de hidrogênio no hidreto. Os resultados experimentais nos hidretos  $ZrV_2H_x$  evidenciam também a formação de uma superestrutura de átomos de hidrogênio no hidreto  $ZrV_2H_4$ , detectada por outras técnicas. Os resultados preliminares deste estudo serão discutidos em termos do modelo de transferência de cargas, levando-se também em consideração resultados recentes de estrutura de bandas em hidretos metálicos.

MET - 11

RPE DO  $Gd^{3+}$  EM HIDRETOS METÁLICOS  $AB_2H_x$ .  
 M.V. Cantô e J.F. Suassuna - IPGW - UNICAMP  
 Experiências de Ressonância Paramagnética Eletrônica com hidretos dos compostos base de Laves  $LaRu_2$ ,  $CoRu_2$ ,  $ThRu_2$ , e  $YNi_2$ , dopados com íon de prova  $Gd^{3+}$ , foram realizadas a baixas temperaturas, em concentrações de hidrogênio entre  $x=0$  e  $x$  de saturação. Os seguintes efeitos foram observados: i) A supercondutividade do  $LaRu_2$ ,  $CoRu_2$  e  $ThRu_2$  foi parcialmente suprimida em concentrações intermediárias de hidrogênio ( $0 < x < 5$ ), onde as fases  $\alpha$  e  $\beta$  dos hidretos coexistem e foi totalmente suprimida para  $x=5$ , correspondente a uma única fase do hidreto. ii) Duas linhas de RPE foram observadas na região de coexistência das fases  $\alpha$  e  $\beta$  e foram associadas a ressonâncias do  $Gd^{3+}$  em cada fase. Para  $x=5$  somente a linha de RPE do  $Gd^{3+}$  associada a fase  $\beta$  foi observada. iii) Verificamos uma drástica variação no g-shift,  $\Delta g$ , da linha de RPE do  $Gd^{3+}$  na fase  $\beta$  dos hidretos com relação ao  $\Delta g$  medido nos compostos não hidrogenados. O valor de  $\Delta g$  varia de fortemente negativo para ligeiramente positivo. vi) Nos hidretos de Ni e Rh, ao contrário dos de Ru, não foram observadas mudanças significativas nos valores de g-shift,  $\Delta g$ , e Razão de Korrington,  $\Delta H/T$ . Uma análise detalhada de nossos resultados em termos do modelo de multibandas, recentemente proposto para explicar as propriedades de RPE em compostos intermetálicos de banda-d, será apresentada.

MET - 12

ESTIMATIVA DAS CONTRIBUIÇÕES PURAMENTE TÉRMICA E VOLUMÉTRICA PARA O GRADIENTE DE CAMPO ELÉTRICO (GCE) NOS COMPOSTOS  $In_3Bi$  E  $In_5Bi$ , S.G.Fries, A.Maciael e J.A.H. da Jornada, Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Através de um estudo sistemático da variação do GCE com a pressão em diversos metais, Butz\* extraiu a derivada logarítmica  $\alpha = (\partial \ln q / \partial \ln V)_{T,c/a}$ , que indica a contribuição volumétrica para o G.C.E. Como resultado encontrou uma forte dependência volumétrica uma vez que os valores de  $\alpha$  para os diversos metais estudados variaram entre -3 e -6, o que evidencia a importância dos elétrons de condução já que para uma compressão congruente espera-se  $\alpha = -1$  para a contribuição iônica.

Para verificar se para compostos intermetálicos esta contribuição também é importante, estimou-se, para os compostos  $In_3Bi$  e  $In_5Bi$ , os valores de  $\alpha$  que são respectivamente -2,8 (1,5) e -3,4 (1,1). Tal resultado faz com que os dois compostos intermetálicos sejam incluídos na sistemática de Butz evidenciando mais uma vez a importância dos elétrons de condução para a contribuição volumétrica.

O conhecimento de  $\alpha$  permite avaliar a importância dos efeitos não harmônicos no GCE através da estimativa puramente térmica. Os resultados mostraram que os efeitos não harmônicos são importantes principalmente para o composto  $In_3Bi$ , onde esta contribuição é majoritária. Estes resultados alertam para a aplicabilidade de modelos que consideram somente efeitos harmônicos para a dependência do GCE com a temperatura. (FINEP, CNPq)

\*Butz, T. Physica Scripta, 17:445-59, 1958.

MET - 13

INFLUÊNCIA DA PRESSÃO EM TRATAMENTOS TÉRMICOS NA EVOLUÇÃO DE COMPOSTOS Fe-C OBTIDOS POR IMPLANTAÇÃO IÔNICA. L.S. de Oliveira (Instituto de Física da Universidade Federal de Santa Catarina), M.T.K. Silva e J.A.H. da Jornada (Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul).

Uma lâmina de Fe implantada com C foi separada em várias amostras e, cada uma delas, submetida a tratamento térmico, sob 3D kb de pressão, a uma dada temperatura. A evolução do sistema foi acompanhada através da espectroscopia Mössbauer por elétrons de conversão, e comparada com resultados obtidos em amostras tratadas termicamente sem a influência da pressão. Observa-se que a pressão tende a adiantar, na escala de temperatura, os processos evolutivos do sistema.

MET - 14

ESTUDO DA CONTRIBUIÇÃO ELETRÔNICA PARA O GRADIENTE DE CAMPO ELÉTRICO NO NÚCLEO DE UMA IMPUREZA DE Fe EM hcp Zr SEM FAZER USO DE SIMETRIA AXIAL. Helena Maria Petrilli e Sônia Frota-Pessoa (Instituto de Física da Universidade de São Paulo).

Num trabalho anterior calculamos, através do método de recorrência, a contribuição eletrônica para o gradiente de campo elétrico no núcleo (GCE) de uma impureza de Fe colocada substitucionalmente numa matriz hcp de Zr; neste caso o sistema de eixos foi convenientemente escolhido de forma a tornar o tensor GCE diagonal (eixo  $\hat{z}$  do sistema coincidente com a aresta c da hcp).

Investigamos agora a possibilidade de estender este procedimento para calcular a distribuição dos GCE em ligas de ZrFe. O tensor GCE, no caso do amorfo, não é diagonal (pois não possui simetria axial) e o problema se concentra, assim, na determinação explícita dos termos não diagonais. Como primeiro passo para o entendimento desta problema, recalculamos o GCE para a impureza de Fe, agora numa matriz hcp de Zr que sofreu uma rotação com relação ao sistema de eixos adotado; neste caso, assim como no do amorfo, o tensor GCE deixa de ser diagonal. (FAPESP, CNPq, FINEP).

MET - 15

APLICAÇÃO DA ESPECTROSCOPIA MÖSSBAUER AO ESTUDO DO MAGNETISMO DO SISTEMA

$Ti_{1+x}Fe_{2-x}$  NOS LIMITES DA FASE DE LAVES. - M.F. Satuf Rezende e R.A. Mansur - Departamento de Física, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Minas Gerais.

As propriedades magnéticas do sistema  $Ti_{1+x}Fe_{2-x}$  foram estudadas por Nakamichi<sup>(1)</sup> através de medidas de susceptibilidade magnética. Neste trabalho, o autor propõe que as ligas ricas em ferro têm um arranjo ferromagnético, enquanto as ricas em titânio são anti-ferromagnéticas. Além disso, estabelece os limites de existência da Fase de Laves como 26,9 e 35,4 at.% Ti.

Para o presente trabalho, foram preparadas 8 amostras deste sistema, com  $25,7 \leq 1-x \leq 38,3$ , com o objetivo de verificar os limites da Fase de Laves e estudar a variação da distribuição de campos magnéticos hiperfinos nas amostras ricas em Fe. Resultados preliminares indicam que os limites propostos por Nakamichi não coincidem com os obtidos por Espectroscopia Mössbauer.

1 - Nakamichi, T.; J. Phys. Soc. Japan; 25 (1968) 1541.

MET - 16

FORMAÇÃO E EVOLUÇÃO TÉRMICA DE COMPOSTOS  $Fe_{1-x}C_x$  EM Fe IMPLANTADO COM C. L.S. de Oliveira (Instituto de Física da Universidade Federal de Santa Catarina), M.T.X. Silva e P.J. Viccaro (Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grã de do Sul).

Uma lâmina de ferro implantada com alta dose de carbono foi submetida a sucessivos tratamentos térmicos a várias temperaturas e analisada através da espectroscopia Mössbauer por elétrons da conversão. Observou-se a predominância, nos estágios iniciais, de  $\epsilon-Fe_3C$ , composto instável que desaparece acima de 230 C, originando fases estáveis menos densas em C.

MET - 17

ANÁLISE DO COMPORTAMENTO DOS CAMPOS HIPERFINOS NAS LIGAS DE HEUSLER DO TIPO  $Ni_2MnSn$  COM IMPUREZA DE In NO ISÓTOPO MÖSSBAUER DE  $^{119}Sn$

S.N.M. Ramos, G.L. Fraga, A. Vasquez, D.E. Brandão, Instituto de Física-UFMG

Neste trabalho estudamos por espectroscopia Mössbauer o comportamento dos campos hiperfinos no sítio do metal sp frente à presença de impureza de In neste sítio. As ligas estudadas são  $Ni_2MnSn$ ,  $Ni_2MnSn_{.98}In_{.02}$ ,  $Ni_2MnSn_{.95}In_{.05}$ ,  $Ni_2MnSn_{.90}In_{.10}$  e  $Ni_2MnSn_{.85}In_{.15}$ .

Medidas de magnetização e difração de raios-X nos permitiram determinar as características magnéticas e estruturais da série.

As medidas Mössbauer foram realizadas à temperatura ambiente e seus resultados são discutidos em termos dos modelos teóricos de Jena-Geldart e Standin-Campbell.

MET - 18

MEDIDAS DE INTERAÇÕES HIPERFINAS EM COMPOSTOS C15 - E. PANAROTTO, H. SAIKOVITCH; CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS-CBPF/CNPq, RJ.

O composto C15  $HfV_2$  passa a supercondutor em  $T_c \sim 9K$ ; além do que apresenta uma transformação estrutural em  $\sim 120 K$ , passando de cúbico a ortorrômbico, transformação que vem acompanhada por um comportamento anômalo na resistividade, suscetibilidade magnética e outras propriedades físicas; daí a sugestão que a transformação estrutural no  $HfV_2$  seja induzida por instabilidades eletrônicas da rede e que as duas transições, supercondutora e estrutural, estão relacionadas. Por outro lado foi observado, recentemente, que a adição de Nióbio ao  $HfV_2$ ,  $(Hf_{.9}Nb_{.1})V_2$  aumenta a temperatura de transição supercondutora ao mesmo tempo que quase desaparece a anomalia na resistividade.

Estamos realizando medidas de interações quadrupolares, através das correlações angulares diferenciais, em compostos do tipo  $(Hf_{1-x}M_x)V_2$ . Medidas preliminares em  $(Hf_{.9}Nb_{.1})V_2$  mostram, até  $\sim 100 K$ , a existência de estrutura cúbica com ponderável distribuição de baixas frequências de interação quadrupolar; abaixo de 100 K aparece a preponderância de uma distribuição de altas frequências, denotando provável transição estrutural.

MET - 19

**ENERGIAS DE ONDAS DE SPIN EM LIGAS METÁLICAS FERROMAGNÉTICAS: APLICAÇÃO A LIGAS DE NIQUEL.** R. Bachara Muniz e J. d'Albuquerque e Castro. (Universidade Federal Fluminense).

No modelo de ligações fortes (tight-binding) multi-orbital obtém-se uma expressão para a constante de rigidez  $D$  para ondas de spin em ligas metálicas ferromagnéticas. O cálculo dessa expressão requer o conhecimento da estrutura eletrônica do estado fundamental da liga, o qual é obtido autoconsistente com base na aproximação de potencial coerente (CPA). São efetuados cálculos para algumas ligas de Níquel.

MET - 20

**FORMA DE LINHA AUGER DO PD EM LIGAS DE HEUSLER** (Flavio

Djanikian, V. S. Sundaram, George Gershon Kleiman, Bernardo Laks, Sandra G. C. de Castro (Departamento de Física Aplicada, Instituto de Física "Gleb Wataghin", UNICAMP).

Medidas sistemáticas em ligas de metal de transição (Pd) feitas através de XPS evidenciam que em ligas de Heusler (Pd<sub>2</sub>MnSn) a banda  $3d$  do metal de transição encontra-se completamente preenchida, contrariamente aos resultados obtidos em ligas binárias. A linha Auger do metal apresenta um comportamento intermediário entre o caso tipo quasi-atômico e o tipo banda. Estudos teóricos feitos em analogia com o modelo de Cini, levando-se em conta a repulsão coulombiana entre os buracos, permite analisar a forma das linhas Auger  $MSN45N45$  e  $M4N45N45$  do Paládio.

MET - 21

**ESTUDO DA ESTRUTURA ELETRÔNICA DE Pd<sub>x</sub>Au<sub>1-x</sub> POR XPS.** Pedro A.P. Nascante e Sandra G.C. de Castro. IFGW - UNICAMP.

Analisamos uma série de ligas Pd<sub>x</sub>Au<sub>1-x</sub> através de XPS ("X-ray Photoelectron Spectroscopy"), objetivando verificar se ocorrem ou não transferências de carga entre os componentes das ligas. Medidas da variação da energia cinética da linha Auger  $MNN$  de Au levaram à diferença entre os níveis de Fermi da liga e de Au. O estudo dos deslocamentos de energia de ligação dos níveis internos, considerando-se correções devidas às mudanças dos níveis de Fermi, indica que essas transferências de carga são desprezíveis.

**MEY - 22**      **ORDEN DESORDEN NO Pd<sub>3</sub>Fe, C.A. KUHNEN E E.Z. DA SILVA.** Instituto de Física - UNICAMP - CAMPINAS.

Neste trabalho estudamos o efeito da Estrutura Eletrônica em Propriedades como o ordenamento (Pd<sub>0,75</sub>Fe<sub>0,25</sub>-Pd<sub>3</sub>Fe ordenado) e como este ordenamento influencia os momentos magnéticos. Estes estudos são feitos usando métodos de primeiros princípios, o LMTO (Linear Muffin-Tin Orbital Method) para a fase ordenada e KKR - CPA (Korringa-Kohn Rostoker Coherent Potential Method) para a liga desordenada. Apresentamos alguns resultados para a fase ordenada e alguns resultados preliminares da fase desordenada.

**MEY - 23**

**ESTRUTURA ELETRÔNICA DA LIGA CU-PD VIA O MÉTODO CPA**

**H. N. Nazareno e P. S. C. Alencar**

Departamento de Física, Universidade de Brasília. 70910 - Brasília - DF

Resultados preliminares de cálculos da estrutura eletrônica da liga Cu<sub>x</sub>Pd<sub>1-x</sub>, para diferentes concentrações, através do método CPA são apresentados. Consideram-se orbitais do tipo "s" e "d" em cada sítio da liga. Além disso assume-se que as densidades de estado do cristal correspondentes aos orbitais "s" e "d" sejam proporcionais. Foram feitos cálculos para diferentes valores desta constante de proporcionalidade, obtendo-se assim as densidades de estado eletrônicas da liga para cada tipo de orbital.

**MEY - 24**

**PROBABILIDADE DE ADESÃO A SUPERFÍCIE METÁLICA.** Makoto Yoshida e Luiz N. Oliveira  
Departamento de Física e Ciência dos Materiais do Instituto de Física e Química de São Carlos da Universidade de São Paulo.

Propõe-se um modelo quântico que descreve o processo de adsorção química em superfícies metálicas. Este modelo leva em consideração a dinâmica de troca de elétrons entre o orbital atômico incidente e os estados eletrônicos da superfície do metal, assim como o efeito do potencial de carga-imagem durante a evolução do processo de adsorção química. Calcula-se a probabilidade de adsorção de um átomo que incide normalmente sobre o metal.

MET - 25

ESPECTRO DE EXCITAÇÃO VIBRACIONAL DE GASES ADSORVIDOS EM METAIS DE TRANSIÇÃO. Francisco Carlos Lavarde e Bernardo Laks (Departamento de Física Aplicada, Instituto de Física "Gleb Wataghin", UNICAMP)

O espectro de fonons e a correlação dos movimentos de átomos de gases ( $H_2$  e  $N_2$ ) adsorvidos em substratos metálico (W) é investigado via formalismo de função de Green. A análise do espectro vibracional para as superfícies (100) e (110) do tungstênio é feita através do método de fração continuada em conjugação com o método de matriz transferência. As frequências e o número de modos vibracionais obtidos experimentalmente por espalhamento inelástico de elétrons de baixa energia (EELS) permitem inferir a estrutura de ligação e, quando comparado com os resultados teóricos, as constantes de força entre o substrato e o adsorvente. O efeito sobre o espectro de fonons devido a diferentes coberturas é investigado.

MET - 26

TEXTURA DE RECRISTALIZAÇÃO EM TUBOS DE ALUMÍNIO COMERCIAL TIPO 3003 E 1100, Melson Batista de Lima, Fernando Angelo Padilha e Kengo Imakuma (IPEN-CHEN/SF).

Dois tubos de alumínio comercial tipo 3003 e 1100 foram trefilados a frio e recozidos a temperatura de 500°C por 1 hora. As transformações ocorridas na textura da deformação após a recristalização foram determinadas utilizando medidas de figura de polo. A influência dos precipitados na eliminação da textura após a recristalização é discutida.

MET - 27

ESTUDO DA CINÉTICA DA REAÇÃO E FORMAÇÃO DO NbC. SERGIO GAMA. Instituto de Física "Gleb Wataghin" - UNICAMP.

O método experimental geralmente usado para a obtenção do carboneto de nióbio (NbC) é a reação em estado sólido entre o óxido  $Nb_2O_5$  e carbono, usualmente na forma de negro de fumo. A literatura sobre essa reação indica que o  $Nb_2O_5$  é reduzido a  $NbO_2$ , este a NbO, resultando finalmente NbC. Literatura mais recente (Sbimada et al, J. Mater. Sci, 18, 1291 (1983)) sugere que o  $NbO_2$  se transforma diretamente em NbC. Medidas de Raios X em produtos de experiências feitas para a obtenção de NbC a partir do  $NbO_2$  comercial e negro de fumo mostram evidência de que o NbO participa da reação. Com o objetivo de se estudar a cinética da reação de formação do NbC está em desenvolvimento um forno de reação de RF com temperatura controlada e foram planejadas medidas quantitativas de RX dos produtos de reação em função do tempo e temperatura, no intervalo 1100°C - 1500°C.

## **VI.12 - ÓTICA**

**Coord.:- Prof. Michel André Aegerter (IFQSão Carlos-USP)**

OTI - 01

**EXPANSÃO NO POTENCIAL INTRA-ATÔMICO PARA IONIZAÇÃO EM CAMPOS ULTRA-INTENSOS DE LASER: APLICAÇÃO EM UM MODELO UNI-DIMENSIONAL.** L. Davidovich, J.C. Garreau e R. Toddling (Depto. de Física da PUC/RJ). Usando uma expansão no potencial intra-atômico recentemente proposta para tratar o problema de ionização atômica em campos ultra-intensos de laser [H.S. Antunes Neto e L. Davidovich, Phys. Rev. Lett. 53, 2238 (1984)], são obtidas expressões para a taxa de ionização e a corrente eletrônica, no contexto de um modelo uni-dimensional. Os resultados obtidos, que permitem prever a distribuição de energia dos elétrons ejetados, são comparados com uma solução numérica do modelo estudado.

OTI - 02

**"DESENVOLVIMENTO DE LED DE ALTA RADIÂNCIA EM GaAlAs".**

F. Rudge Barbosa - CPQD-Telebrás

Estamos dando continuidade ao desenvolvimento de diodos emissores de luz em GaAlAs. Sensíveis melhoras a nível de eficiência quântica e resistências térmica e elétrica estão sendo implementadas, a partir do projeto apresentado anteriormente. A ampla caracterização física, ótica e elétrica em técnicas como fotoluminescência, EBIC, catodoluminescência, curva do diodo e outras, permitem bom conhecimento das várias camadas epitaxiais de semicondutores envolvidas.

OTI - 03

**"CORRELAÇÃO DO PERFIL DE INTENSIDADE DE CAMPO PRÓXIMO E DE CAMPO AFASTADO DE LEDs E LASERS SEMICONDUCTORES".** F. Rudge Barbosa,

I.F. Faria Jr., CPQD-TELEBRÁS

O padrão de emissão de radiação na superfície dos espelhos de lasers semicondutores (campo próximo) relaciona-se com o padrão de campo afastado por uma relação de transformada de Fourier do campo de radiação. Apresentamos as medidas do campo próximo e afastado e correlacionamos a transformada do campo afastado medida com o perfil de intensidade de campo próximo medido. Observamos que o acordo teórico-experimental é excelente para perfis gaussianos e razoável para perfis que diferem do ideal gaussiano para os lasers de guiamento por ganho considerados. Estes dados comprovam a relação esperada entre campo próximo e campo afastado, e permitem que se trabalhe na maioria dos lasers apenas com perfis de campo afastado, que são de obtenção simples. As medidas de campo próximo são então utilizadas em estudos específicos na superfície do espelho do laser. A extensão desse trabalho a diodos emissores de luz (LEDs) está em andamento, com alguns resultados preliminares de campo afastado.

OTI - 04

## EFEITO DA POTENCIA DE BOMBEIO NO COMPORTAMENTO UNIDIRECIONAL DO LASER DE CORANTE EM RPM

Glória B. Jacobovitz, C.H. Brito Cruz, M. Scarparo

Estudamos a oscilação em regime unidirecional do laser de corante com vavidade em anel em regime de ML<sup>2</sup>. Quando a distância entre o amplificador e o absorvedor saturável ( $\delta$ ) é diferente de um quarto do perímetro da cavidade ( $U$ ) os pulsos contrapropagantes não são amplificados igualmente. Neste caso o laser pode oscilar em dois regimes diferentes no bidirecional (acoplamento por colisão de pulsos CPM) e no unidirecional. O regime de oscilação pode ser controlado através da variação da potência de bombeio no amplificador. Para altas potências de bombeio a recuperação do amplificador se torna mais rápida devido a saturação da inversão de população e os pulsos contrapropagantes são amplificados igualmente. Desta forma mesmo para cavidades onde  $\delta \neq U/4$  pode ser evitada a existência do regime unidirecional.

\*Acoplamento de modos.

OTI - 05

## TEORIA QUÂNTICA DE UM LASER COM ACOPLAMENTO EXTERNO

AUTORES: J.C.PENAFORTE e B: BASEIA

Num modelo de cavidade óptica com uma janela transmissora - utilizado para desenvolver tratamento quântico de um laser onde as soluções, na aproximação linear, para o campo dentro e fora da cavidade são exibidas (Phys.Rev:A30,1401(1984) e Phys.Lett.107A,250(1985)), bem como na teoria não-linear (PREPRINT-DF/UFPB) - serão incluídos os termos de flutuação atômica que permitirão investigar a evolução do laser a partir do vácuo como também calcular as funções de correlação dentro e fora da cavidade.

OTI - 06

"BIESTABILIDADE ÓTICA EM LASERS DE CO<sub>2</sub>", J.W.R.Tabosa e J.R.Rios Leite, Departamento de Física, UFPE, 50000 - Recife-PE.

A observação da biestabilidade ótica na operação de um Laser de CO<sub>2</sub> contínuo foi obtida entre linhas das bandas regulares e da banda sequencial [1]. Serão discutidos os resultados obtidos para ciclos de histerese da potência do Laser em função da corrente elétrica na mistura gasosa e da pressão de CO<sub>2</sub> quente numa célula colocada na cavidade. Teoricamente os resultados são explicados por um modelo de equações de taxas com transferência de população entre níveis de energia que participam da emissão do Laser. Encontram-se em andamento estudos relacionando os modelos de quatro temperaturas, as taxas de relaxação nos Lasers de CO<sub>2</sub> [2] e o comportamento de biestabilidade.

[1] J.W.Tabosa e J.R.Rios Leite, Optics.Lett. 10, 544, 1985

[2] K.J.Siensen, J.Reid e C.Dang. IEEE QE-16, 668, 1980.

OTI - 07

**ESTATÍSTICA DA LUZ NO REGIME DE AUTO-PULSAÇÃO EM BIESTABILIDADE ÓTICA DISPERSIVA.** C.R. de Carvalho e L. Davidovich (Depto. de Física da PUC/RJ). Pretende-se calcular o espectro e a estatística do campo na região de instabilidade de auto-pulsação, para a biestabilidade ótica dispersiva no limite de campo médio. Essa instabilidade foi observada experimentalmente por L.A. Orozco, A.T. Rosenberger e H.J. Kimble [Phys. Rev. Lett. 53, 2547 (1984)]. O espectro e a estatística serão calculados a partir de uma equação de Fokker-Planck nos variáveis do campo e da inversão, obtida através da eliminação adiabática da variável de polarização, e válida inclusive na região de instabilidade (C.R. de Carvalho, Tese de Mestrado, PUC/RJ, 1985).

OTI - 08

**Biestabilidade óptica e histerese num laser de corante com acoplamento por colisão de pulsos contrapropagantes**

Gloria R. Jacobovitz, Carlos H. Brito Cruz, Newton P. Mansur, M. Scarpa ro.

Descrevemos a biestabilidade óptica observada no laser de corante com acoplamento por colisão de pulsos contra propagantes. Dois estados de oscilação podem ocorrer, um em 616 nm, com formação de pulsos com duração de fentosegundos e outro em 570 nm com saída contínua. Uma curva de histerese pode ser obtida, traçando a potência de bombeio do laser. A extensão da região biestável pode ser controlada através da variação do foco de feixe sobre o absorvedor saturável.

OTI - 09

**DEFORMAÇÃO DE PULSOS DE FENTOSEGUNDOS DEVIDO A DISPERSÃO.** Susana Planas, C.H. Brito Cruz, Alvin Kiel - INSTITUTO DE FÍSICA - UNICAMP.

Corantes orgânicos, usados normalmente como meio laser ou absorvedor saturável, podem ser usados para obter dispersão de velocidade de grupo negativo em certas regiões espectrais. Desta forma consegue-se compensar ou aumentar a varredura em frequência (Chirp) do laser, comprimindo ou alargando o pulso. Medimos a duração do pulso do laser de corante ao atravessar uma cela contendo DODCI. Cálculos teóricos e experiências mudando o solvente e a concentração do corante, mostraram claramente o papel relevante da dispersão na deformação dos pulsos. (FAPESP).

**OII - 10** CONSTRUÇÃO DE UM LASER DE CENTRO DE COR LINEAR. Ricardo A. Buriti da Costa & Máximo Siu Li (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP).

Esta sendo desenvolvido no IFQSC um laser de centro de cor (LCC) usando como meio ativo um cristal de  $KCl:Li^+$  (com  $\sim 1 \times 10^{16}$   $cm^{-3}$  de centros F) e bombeamento com laser de Argônio (514 nm) onde a emissão esperada está na faixa de 2,4 a 2,8  $\mu m$ . Todo conjunto do LCC foi construído nas oficinas do próprio instituto, sendo assim, uma alta percentagem de tecnologia nacional.

A cavidade ótica do LCC é linear, consistindo de 3 espelhos astigmaticamente compensados. Esta cavidade fica sob vácuo ( $\sim 10^{-5}$  Torr) e o cristal numa temperatura de 77K, tudo isto para prolongar a vida útil do meio ativo que pode chegar até 4 semanas ou mais. Com este LCC ( $KCl:Li^+$ ) podemos estudar o modo de estiramento do  $OH^+$  (2,7  $\mu m$ ) em diferentes matrizes hospedeiras. A mudança do meio ativo anterior, para  $KCl:Na^+$ , e dos espelhos dão condições de estudar o segundo harmônico do  $CM^+$  (2,4  $\mu m$ ).

O LCC pode ser usado, também, em estudos de fotodissociações em reações químicas induzidas por laser, polarização nuclear de  $^3He$  por bombeamento ótico de LCC, comunicações através de fibra ótica, memória ótica, etc.

Os cristais de  $KCl:Li^+$  estão sendo fornecidos pelo laboratório de crescimento de cristais deste Instituto, os quais são submetidos à coloração aditiva em vapor de Potássio. A sintonia é feita inicialmente por um prisma de safira construído na oficina de ótica do IFQSC e posteriormente usa remos uma rede de difração.

Outras perspectivas são o estudo de outros possíveis meios ativos tais como  $KCl:Ti^+$  (bombeado com laser Nd:YAG),  $KCl:Na^+$ ,  $RbCl:Li^+$  e outros. Desta maneira pretendemos abranger um intervalo espectral de 0,8 a 4  $\mu m$ .

(Projeto financiado pelo CNPq, FAPESP, FINEP).

**OII - 11** DESENVOLVIMENTO DE UM LASER DE CENTRO DE COR. Germano Woehl Júnior & Máximo Siu Li (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP).

Tomos desenvolvido para aplicações em espectroscopia um laser de centro de cor sintonizável que opera no infravermelho próximo. A cavidade é composta internamente por dois espelhos esféricos astigmaticamente compensados. Os espelhos extremos são arranjados de maneira a possibilitar a conversão para a configuração em anel. Já foi obtida a ação laser em torno de 2,7  $\mu m$  usando como meio ativo cristais de  $KCl:Li^+$  com centros  $F_A(II)$ . Como fonte de bombeamento foi usado um laser de  $Ar^+$  em 514 nm. A eficiência energética foi de 3,8% e o limiar de potência do bombeamento foi de 100 mW.

A sintonia está sendo feita intracavidade com um prisma de safira em ângulo de Brewster.

(Apoio financeiro da FAPESP, CNPq)

**OII - 12** CONSTRUÇÃO DE UM RING DYE LASER. Luiz A.O. Nunes & Jerbas C. Castro Neto (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP).

Atualmente desenvolve-se um Ring Dye Laser genuinamente nacional. Este laser está sendo construído à partir de um desenho que nos foi fornecido pelo Prof. Claude Guy da Universidade de Paris IV, resoluções melhores que MHz serão obtidas. Nesta conferência descrevemos o estado atual do projeto.

Os componentes óticos como lyot filter, etalon, lâminas de compensação, espelhos, foram desenvolvidos na Oficina de Componentes Óticos de Alta Precisão do IFQSC. O laser operará com uma potência de saída entre 1 a 6 Watts em modo simples de frequência.

Com este laser poderemos observar fenômenos como "hole burning" e "fluorescence line narrowing" nos estados metaestáveis do  $Cr^{+3}$  em  $GdAlO_3$ . Os resultados obtidos nos experimentos darão indicações sobre a possível aplicação desses defeitos com meio para armazenamento de informações por processos óticos, ou seja, sua utilização como memória ótica.

(Projeto financiado pela FAPESP e CNPq).

OTI - 13

**OPERAÇÃO DE UM LASER PULSADO DE Nd:YLF COM CHAVEAMENTO PASSIVO, Nilson Dias Vieira Junior, Eliseu Augusto Vicente, Wagner de Rossi e Spero Penha Morato IPEN-CNEN/SP.**

O presente trabalho descreve o chaveamento passivo de um laser pulsado de Nd:YLF com a utilização de um absorvedor saturável. Centros de  $F_2$  em LiF são obtidos com cristais ultrapurificados crescidos pela técnica de refino por zona sob atmosfera de HF. Esses cristais são então irradiados com feixe de elétrons, sendo que um dos produtos de irradiação são os centros  $F_2$ . Esses centros possuem uma banda de absorção larga, centrada em 940 nm e uma emissão rápida centrada em 1,12  $\mu$ m. Controlando a dose de radiação e a espessura óptica dos cristais pode-se utilizá-lo como absorvedor saturável dentro do ressonador óptico. Resultados preliminares mostram que é possível a obtenção de ação laser com chaveamento passivo e até agora obtivemos pulsos com duração de 80 ns e potência pico de 75 kW. Não se detectou um decaimento significativo dessas centros durante a operação laser.

OTI - 14

**NOVAS LINHAS LASER NAS MOLÉCULAS  $CH_2F_2$  E  $CHD_2OH$**

O trabalho consiste da procura de linhas laser no infravermelho longínquo (IVL) produzidas quando moléculas polares são bombeadas ópticamente. O dispositivo é formado por um laser de  $CO_2$ , o qual bombeia moléculas que formam o meio ativo do laser IVL. O fato da emissão laser ocorrer em transições rotacionais dentro de um estado vibracional excitado permite futuramente a tentativa de caracterização desse estado. O interesse é devido a quase ausência de fontes coerentes conhecidas no intervalo de frequência que corresponde ao IVL. A importância está no fato de descobrir linhas em moléculas pouco ou ainda não estudadas.

OTI - 15

**LASER DE  $N_2$  DE 3% DE EFICIÊNCIA . B. Oliveira dos Santos, C. E. Fellows e C. A. Massone, Instituto de Física, UFF.**

Em 1976, R. Polloni (1) publicou um desenho de um laser de  $N_2$ , simples, de potência e vida útil elevada, com eficiência de funcionamento de 0,075%. Sobre este circuito foram realizadas várias modificações procurando um aumento do valor de eficiência. A linha de transmissão utilizada por Polloni (1) foi substituída por um par de tubos metálicos coaxiais entre si e com o tubo de descarga. Isto minimizou dimensões e valores de impedância do circuito. Além disto foram variados os valores do capacitor de carga de modo a se estudar os efeitos no laser de diferentes frequências de primário (determinadas pelo valor de  $C$  = capacitor de carga) frente ao valor fixo de frequência do secundário (determinado pelo valor do capacitor  $C'$  = modelo coaxial). Foram observadas variações significativas nos valores de energia, potência e largura do pulso, alcançando-se o valor recorde de 3% de eficiência de funcionamento.

(1) R. Polloni, Opt. & Quant. Electr. Lett. 8, 565 (1976)

Trabalho parcialmente financiado por CNPq e FINEP.

OTI - 16

ANALISE DA PROPORÇÃO DE  $\text{CO}_2$ - $\text{N}_2$  EM UM LASER DE  $\text{CO}_2$  DE CATODO ÓCO - R. de Macedo Mendes, J. L. de Souza Oliva e C. A. Massone - Instituto de Física, UFF.

A descarga do tipo catodo óco como meio de excitar lasers possui extremo interesse pelas aplicações a lasers de vapor de metal. Foi construído um laser de  $\text{CO}_2$  baseado neste princípio de excitação, seguindo em grande parte o modelo empregado por C. S. Willett (1). Com este modelo foram obtidas - em regime pulsado de excitação - emissão estimulada em  $10,6 \mu\text{m}$  cuja análise temporal mostrou uma estrutura múltipla de pulsos. Variando-se as energias de excitação e com 4 diferentes relações  $\text{CO}_2$ - $\text{N}_2$ -He (1-0-12, 1-2-12, 1-4-12 e 1-6-12, respectivamente), o que tornou possível determinar experimentalmente a relação  $\text{CO}_2$ - $\text{N}_2$  que maximiza o funcionamento do laser.

(1) C. S. Willett, IEEE J. Quant. Electr. (Correspondence) 568 (1970)  
Trabalho parcialmente financiado por FINEP e CNPq.

OTI - 17

EMIÇÃO ESTIMULADA EM  $\text{CO}_2$  E CO GERADA COM UM LASER AXIAL PULSADO DE  $\text{CO}_2$ . C. E. Fellows, J. L. de Souza Oliva e C. A. Massone. Instituto de Física - Universidade Federal Fluminense.

Empregando um laser axial pulsado de  $\text{CO}_2$  (1), foi obtida emissão estimulada em  $10,6 \mu\text{m}$  ( $\text{CO}_2$ ) e de  $4,87$  a  $6,7 \mu\text{m}$  (CO). Estas emissões foram obtidas variando criteriosamente a energia de excitação aplicada sobre o tubo de descarga laser. Realizada a análise da estrutura temporal do pulso de radiação, estudou-se a variação da estrutura múltipla deste pulso em função da pressão do gás. Foram analisadas diferentes proporções de  $\text{CO}_2$ ,  $\text{N}_2$  e He, e se estudaram os comportamentos temporais diferentes das transições atribuídas ao  $\text{CO}_2$  e CO. Finalmente, considera-se a emissão estimulada gerada em CO como produto de



(1) A. Hill, Appl. Phys. Letts. 12, 324 (1968)

Trabalho parcialmente financiado pela FINEP e pelo CNPq.

OTI - 18

TRATAMENTOS ALTERNATIVOS PARA A DISSIPACÃO NUMA CAVIDADE ÓPTICA.

A. Liberato e B. Basela

Universidade Federal da Paraíba, Depto. de Física, J. Pessoa

Obtém-se a evolução do campo de radiação quantizado numa cavidade óptica, que se acopla ao exterior por meio de uma janela parcialmente transmissora, em duas descrições distintas: uma delas, perturbativa, utiliza a Hamiltoniana

$H = H_{\text{int}} + H_{\text{ext}} + \lambda V$ . A outra, não perturbativa, utiliza as condições de contorno do problema para deduzir a Hamiltoniana definida no espaço interno. Algumas comparações são discutidas.

OTI - 19

**LASER DE METANOL E SEUS ISÓTOPOS: NOVAS LINHAS E ESPECTROSCOPIA**

Artemio Scalabrin e Daniel Pereira - Departamento de Eletrônica Quântica, Instituto de Física - Unicamp

Serão relatados os resultados obtidos e os estudos em andamento sobre o laser de álcool metílico,  $\text{CH}_3\text{OH}$  e seus isótopos, em particular  $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$  e  $\text{CD}_3\text{OH}$ . Presentemente estamos estudando a espectroscopia dessas moléculas a fim de determinar os números quânticos dos estados vibracionais-rotacionais envolvidos nas transições laser.

Trabalho financiado pelo CNPq, FINEP e FAPESP.

OTI - 20

**PULSAÇÕES REGULARES/IRRREGULARES EM LASERS DE MODO ÚNICO E ALARGADOS HOMOGENEAMENTE (MODELO DE LORENZ)**

Jason Alfredo Carlson Gallias  
Departamento de Física da UFSC - Florianópolis

É bem sabido que as equações de um Laser de modo único são isomorfas ao modelo de Lorenz de convecção turbulenta em fluidos. Porém, apesar da enorme variedade de comportamento que se pode obter através de soluções numéricas das equações de Lorenz, a busca de um meio Laser apropriado em que se possa observar uma série de instabilidades preditas tem sido longa e infrutífera. A situação parece agora prestes a mudar: existem vários resultados experimentais que indicam ser possível o estudo do modelo Lorenz-Laser em laboratório.

O objetivo da presente comunicação é apresentar os resultados de uma investigação da possibilidade de se estudar experimentalmente (com Lasers) regiões no espaço de parâmetros do modelo de Lorenz em que existam integrais de movimento. É óbvio que a existência de (algumas) integrais de movimento tornam o modelo (pelo menos parcialmente) integrável, permitindo supor que seja possível simplificar-se aproximações analíticas que vêm sendo obtidas em profusão na literatura.

(Parcialmente financiado pelo CNPq)

OTI - 21

**EFEITOS SOBRE A FREQUENCIA DO PULSO DE EXCITAÇÃO DEVIDOS A MODIFICAÇÕES NA SEÇÃO NORMAL DE UM ELETRODO DE DESCARGA, PARA LASERS GASOSOS DE PRESSÃO ATMOSFERICA. A. Dias Tavares Jr. e C. A. Massone, Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense.**

Foram publicados recentemente (1-2) trabalhos sobre um modelo de laser de  $\text{N}_2$  de pressão atmosférica que entrega potências de 6 MWatts, com larguras temporais do pulso de radiação de 55 picosegundos, em função de uma modificação na geometria do eletrodo de descarga. Montou-se um modelo do circuito excitador e fez-se a análise da propagação de ondas para uma ampla faixa de frequências. Os resultados mostraram modificações na forma e/ou frequência para diferentes características da seção normal do eletrodo de descarga, dando como resultado pulsos de excitação mais estreitos. As razões para este comportamento são analisadas com base na existência de uma cavidade ressonante em série com a guia de onda, formada pelo eletrodo.

Trabalho parcialmente financiado pela FINEP e CNPq.

- (1) A. Dias Tavares Jr., C. E. Fellows e C. A. Massone; WII 15, XIII International Quantum Electronics Conference, USA (1984)
- (2) A. Dias Tavares Jr., C. E. Fellows e C. A. Massone; Applied Physics B (a ser publicado em 1986)

**OTI - 22**      **MODIFICAÇÕES NAS CARACTERÍSTICAS DE EMISSÃO DE UM LASER GASOSO EM FUNÇÃO DE PARÂMETROS GEOMÉTRICOS DA DESCARGA.** N. Mendes Alves, A. Dias Tavares Jr. e C. A. Massone. Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense.

Tomando como base um modelo de laser recentemente desenvolvido (1) foram analisados os diferentes parâmetros geométricos do canal de descarga e estudadas as modificações que os mesmos geram na emissão estimulada. Modificou-se geometria de eletrodos, distância intereletrodica, ângulo entre a frente de onda e o canal de descarga, etc.; medindo-se simultaneamente a potência de emissão, energia por pulso de radiação, pulso de voltagem aplicado sobre o tubo laser e pulso de descarga gerado na câmara de disparo. Apresenta-se um análise comparativa dos resultados que permitem inferir perfis e distâncias intereletrodos para diferentes características de emissão estimulada.

(1) N. da Silva Reis, A. Dias Tavares Jr., C. A. Massone e M. S. Z. Chaghtai, A ser publicado no J. Phys. E:Scient. Instr. (1986)

Trabalho parcialmente financiado pela FINEP e CNPq.

**OTI - 23**      **CONJUGAÇÃO DE FASE E MEDIDA DE ÍNDICE DE REFRAÇÃO NÃO LINEAR EM CRISTAIS DOPADOS COM  $Cr^{+3}$  E  $Nd^{+3}$ .** Tomaz Catunda, Eduardo C. Ruvoletto Junior e Jarbas C. Castro (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP).

Neste trabalho fazemos medidas do índice de refração não linear e da eficiência do efeito de conjugação de fase usando um laser de Ar CW. Os resultados destas duas experiências estão em bom acordo utilizando-se o modelo teórico adequado. Os trabalhos em  $Rubi$  e  $GdAlO_3:Cr^{+3}$  estão sendo submetidos à publicação<sup>(1-2)</sup> e atualmente estamos estudando a Alexandrita,  $SrAlF_5:Cr^{+3}$ , vidro com  $Nd^{+3}$  e  $YAG:Nd^{+3}$ .

(1) T. Catunda, J.P. Andreeta e J.C. Castro - The differential interferometric technique for the measurement of the nonlinear index of refraction of Ruby and  $GdAlO_3:Cr^{+3}$ . Submetido ao Applied Optics.

(2) T. Catunda e J.C. Castro - a ser submetido ao Opt. Communications.

**OTI - 24**      **ÓTICA NÃO LINEAR EM ÁTOMOS DE RYDBERG. YARA C. COBATO, TOMAZ CATUNDA e JARBAS C. CASTRO** (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP).

Neste trabalho descrevemos experimentos de conjugação de fase por mistura degenerada de quatro ondas de luz azul (420 nm) e de  $CO_2$  em átomos de Rydberg. Os efeitos não lineares em átomos de Rydberg são acentuados devido a dois fatores:

- i) a baixa intensidade de saturação para transição entre níveis de Rydberg.
- ii) a enorme polarizabilidade dos átomos de Rydberg e conseqüentemente um grande índice de refração não linear.

OTI - 25

**ÓPTICA NÃO-LINEAR COM CORANTES ORGÂNICOS-** Hugo L. Fragnito, A.Kiel S.F.Pereira e J.M. Martín Rios, UNICAMP-IFGW.

Estamos realizando estudos sobre propriedades ópticas lineares e não-lineares de corantes orgânicos em solução. Estes estudos incluem (a) cálculos de espectros de dispersão e absorção em soluções concentradas levando em consideração efeitos de campo local e de formação de dímeros, (b) Espectroscopia de estados excitados usando a técnica de grades de população, (c) caracterização do efeito "lambda-tempo", i.e., dependência do tempo de crescimento do pulso de um laser de corante com do comprimento de onda, (d) grades de população e mistura de quatro ondas no regime de forte saturação.

OTI - 26

**EXCITAÇÃO POR DOIS FOTONS DA BANDA 4f5d do Pr<sup>3+</sup> E TRANSFERÊNCIA DE ENERGIA INTERCONFIGURACIONAL EM LaF<sub>3</sub>(Pr<sup>3+</sup>, Gd<sup>3+</sup>),** Arturo Lezama e Cid B.de Araújo, Depto de Física, UFPE

O estudo das configurações excitadas das terras raras em cristais iônicos vem despertando crescente interesse nos últimos anos. Em este trabalho apresentamos a excitação por dois ftons da banda 4f5d do Pr<sup>3+</sup> usando como nível intermediário real o estado <sup>1</sup>D<sub>2</sub> em um cristal de LaF<sub>3</sub> contendo impurezas de Pr e Gd. Ao mesmo tempo a observação de uma intensa fluorescência proveniente do nível <sup>6</sup>P<sub>7/2</sub> do Gd<sup>3+</sup> fornece a evidência de transferência de energia entre distintas configurações do Pr<sup>3+</sup> para o Gd<sup>3+</sup>. Os mecanismos envolvidos nesta transferência de energia são analisados.

OTI - 27

**ESPECTROSCOPIA NÃO LINEAR DE MISTURA DE ONDAS EM SÓLIDOS**

(Cid B. de Araújo, S.S.Vianna, A.S.Sombra - Departamento de Física - UFPE)

Serão apresentados resultados de duas experiências de mistura de ondas em sólidos.

Em uma das experiências estudamos a geração de luz por mistura de QUATRO ondas no cristal centrosimétrico: TiO<sub>2</sub>. Neste caso serão discutidos os comportamentos observados da energia e larguras da linha dos polaritons associados ao fonon - Au. A excitação destes polaritons é analisada levando-se em conta a susceptibilidade quadrupolar elétrica de segunda ordem.

Na segunda experiência apresentaremos um novo método de obtenção da conjugação da fase ótica associada à conversão de frequência. A conjugação de fase é baseada na mistura de SEIS ondas no semicondutor CdS. Serão discutidas aplicações tais como correção de frente de onda e processamento temporal de informação com conversão ascendente de frequência.

OTI - 28

ESTADOS PRÓPRIOS DE VIBRAÇÃO NO ESPALHAMENTO DE ONDAS ELETROMAGNÉTICAS POR UM PLANO DE DIPOLOS - W.A.Keller - Instituto de Física da UFPA.

A existência de estados próprios de vibração no espalhamento de ondas planas por um plano de dipolos induzidos é verificada como resultado da auto-consistência. Esta, exige que o "forcing field" para as vibrações dos dipolos deve incluir, além do campo externo, aquele devido às vibrações dos próprios dipolos. Quando estes vibram sem perda de energia, a auto-consistência assegura que a energia das ondas espalhadas é exatamente igual àquela das ondas incidentes. O problema é tratado de modo mais geral considerando duas ondas incidentes com vetores de polarização arbitrários. Como resultado, foi possível mostrar que os dois estados de polarização,  $\sigma$  e  $\pi$ , tornam-se independentes.

OTI - 29

## INVARIANTES PARA O SISTEMA DE LORENZ

Jason A.C. Gallias (Departamento de Física da UFSC - Florianópolis)  
Ibéré L. Caldas (Instituto de Física da USP - São Paulo)

A integrabilidade do sistema de Lorenz tem sido recentemente objeto de estudos. Isto porque foram identificados alguns casos em que o sistema de Lorenz possui uma ou mais integrais de movimento sendo portanto (pelo menos parcialmente) integrável. Os invariantes conhecidos possuem a forma geral

$$I = P(x, y, z) e^{ct}, \quad P(x, y, z) = \sum_k a_{kln} x^k y^l z^n, \quad i = k+l+n \leq s$$

onde  $s$  é chamado de ordem do invariante. Utilizando um resultado de geometria diferencial Steeb [J. Phys. A 15, L389 (1982)] reobteve todos invariantes conhecidos até então. Por outro lado, usando uma técnica conhecida como "Cartesian embedding", Kus [J. Phys. A 16, L689 (1983)] determinou todos invariantes de ordem menor que cinco. No presente trabalho mostramos que todos invariantes podem ser obtidos facilmente através da condição (bem conhecida) de que os invariantes  $I$  devem satisfazer  $dI/dt=0$ .

(Parcialmente financiado pela FAPESP e CNPq)

OTI - 30

## ESTADOS COMPRIMIDOS E HAMILTONIANAS DEPENDENTES DO TEMPO

I.A. PEDROSA e B. BASEIA

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA  
 DEPARTAMENTO DE FÍSICA - CCEN  
 58.000 - JOÃO PESSOA - PB.

Mostramos que Hamiltonianas dependentes do tempo, tipo oscilador harmônico, pertence à classe de Hamiltonianas quadráticas que geram estados comprimidos (squeezed states). Para este propósito, usamos operadores dependentes do tempo cujos estados associados são estados comprimidos. Um exemplo explícito é apresentado.

OTI - 31

**DETEÇÃO DE RAIOS X ATRAVÉS DO EFEITO FOTOACÚSTICO.** Manoel Marcos Freire d'Aguiar Neto e Helion Vargas. Instituto de Física da UFPA e Instituto de Física Gleb Wataghin-UNICAMP.

O efeito foto acústico tem sido utilizado para se obter informações sobre as propriedades óticas e térmicas dos materiais.

Uma vez que o efeito pode ser aplicado em qualquer região do espectro eletromagnético, do raio X à região de micro onda, o nosso objetivo é a sua utilização na região dos raios X. Devido à dependência da intensidade do sinal fotoacústico com a frequência de modulação da radiação incidente ( $I/\omega$ ), pretendemos estudar propriedades localizadas em diferentes camadas na amostra. Como o método é calorimétrico, pretendemos ainda verificar a possibilidade de sua utilização no estudo das transições estruturais de fase.

OTI - 32

**CARACTERIZAÇÃO DE AMOSTRAS DE GASES POR EFEITO FOTOACÚSTICO.** Gilson Alberto Rosa Lima e Carlos Alberto Ferrari, Instituto de Física, Universidade Estadual de Campinas.

Estudaremos a possibilidade de caracterizar, por efeito fotoacústico, amostras de gases de baixa concentração misturada com outros gases. Estaremos interessados em estudar estes gases fluindo pela cavidade fotoacústica. A razão deste estudo é viabilizar uma cavidade fotoacústica que nos permita caracterizar traços de amostras de  $\text{CH}_3\text{OH}$  resultante de uma combustão. Tentativas serão feitas para fazer este estudo com chama produzida dentro da cavidade. Para isto montaremos uma cavidade ressonante de r.f. que excitará o gás He, depois este em contacto com vapor de  $\text{CH}_3\text{OH}$  dentro da cavidade, reagirá com o mesmo. Ter-se-á assim uma maneira de monitorizar a queima de  $\text{CH}_3\text{OH}$  numa combustão. A excitação do  $\text{CH}_3\text{OH}$  numa combustão. A excitação do  $\text{CH}_3\text{OH}$  na cavidade fotoacústica será feito com Laser- $\text{CO}_2$ .

OTI - 33

**Estudo de Transições de Fase em cristais mistos pelo Método Fotoacústico;** Alcides José de Paula Braga, Carlos Lenz Cesar, Josué Mendes Filho, Adherbal Carlos de Oliveira ; Universidade Estadual de Campinas

Estamos desenvolvendo uma célula fotoacústica para baixas temperaturas afim de estudar transições de fase em cristais mistos do tipo  $\text{KLiSO}_4$ ,  $\text{NaLiSO}_4$ ,  $\text{LiNH}_4\text{SO}_4$  e  $\text{RbLiSO}_4$ , através de suas propriedades térmicas. Para tal desenvolvemos dois métodos de medidas de difusividade térmica, utilizando um feixe de Laser. Ambos já foram testados à temperatura ambiente, apresentando ótimos resultados. A teoria básica desenvolvida, tratando a equação de difusão térmica em três dimensões, provou que os resultados simples obtidos em uma dimensão são adequados para interpretação das medidas fotoacústicas.

OTI - 34

FORMAÇÃO DE  $O(^1S)$  PELA REAÇÃO ENTRE  $N_2(A)$  E  $O(^3P)$ .

A.R. de Souza (Departamento de Física - UFSC - Florianópolis) e  
M. Touzeau (Labo. de Physique des Gaz et des Plasmas-Orsay-França).

A eficiência da reação  $N_2(A) + O(^3P)$  para a formação de oxigênio no estado metastável  $O(^1S)$  (fonte da "raia verde" auroral 558 nm) é determinada na pós-descarga em fluxo. As espécies ativas  $N_2(A)$  são formadas pela transferência de energia entre  $Ar(^1P_{0,2})$  e  $N_2$ . Átomos de oxigênio são obtidos, a partir de uma descarga HF (2450 MHz) numa mistura  $He/O_2$ . As análises são feitas por espectroscopia de emissão, medindo-se a razão entre as intensidades correspondentes, da raia 558 nm ( $O(^1S) \rightarrow O(^1D)$ ) e da banda Vegard-Kaplan 276 nm ( $N_2(A, v=0) \rightarrow N_2(X, v=6)$ ) em função da concentração de átomos de oxigênio.

Os resultados mostram que esta reação, pode ser uma das origens principais da "raia verde" das auroras, desde que a eficiência para a produção de  $O(^1S)$  é de (80 - 20)% independente da temperatura entre 190 e 360 K.

OTI - 35

DEPOSIÇÃO DE FILMES FINOS ÓPTICOS PELO MÉTODO SOL-GEL. Nelcy Della Santina Mohallen e Michel André Aegerter, Instituto de Física e Química de São Carlos - Universidade de São Paulo.

Filmes finos de  $TiO_2$  e  $SiO_2$  de espessuras controladas foram depositadas sobre substratos de vidros pela técnica dip-coating em uma solução organo-metálica (método sol-gel). Descreveremos o processo de fabricação, as suas vantagens e desvantagens, assim como as futuras possibilidades de realizações industriais para a preparação de espelhos refletores e antireflectores e superfícies refletores de calor.

OTI - 36

ELETRODEPOSIÇÃO DE FILMES SEMICONDUTORES DE Cd Se SOBRE VIDRO CONDUTOR. Suzana A. Planas, João R. Moro e Franco Decker Instituto de Física. UNICAMP.

Filmes semicondutores de Cd Se foram eletrodepositados sobre vidro condutor. Estas amostras analisadas por transmissão revelaram que a energia de 'band gap' encontrada está de acordo com os valores publicados na literatura. O comportamento fotoeletroquímico desses filmes foi estudado tanto com iluminação frontal como com retro-iluminação em solução de polisulfetos. Os resultados obtidos são semelhantes em ambos os casos. Atualmente está sendo desenvolvido um estudo sistemático de tratamentos térmicos e químicos que aumentem a cristalinidade do filme semicondutor e diminuam seus centros de recombinação.

OTI - 37

**ANISOTROPIAS EM FILMES FINOS.** Flavio Horowitz e Ricardo Franche Sandoval, Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

O aperfeiçoamento dos processos de monitoramento de espessuras e controle de parâmetros de deposição de filmes finos nos últimos anos tem implicado na crescente relevância dos estudos de sua microestrutura. Em particular, desvios de isotropia estrutural podem influir significativamente na performance ótica dos filmes. Bi-refringências da ordem de 0.06 em Óxido de zircônio e dielétricos de 1.4 em alumínio, depositados em substratos de vidro a 65° e 85°, respectivamente, foram observados em trabalhos anteriores para luz em incidência normal. A presença de uma microestrutura colunar na grande maioria dos filmes depositados a vácuo indica fortemente que devemos esperar comportamento anisotrópico semelhante em filmes de praticamente qualquer material. No sentido de investigar efeitos desta natureza e suas potenciais aplicações, está sendo implantado no novo Campus do Vale da UFRGS o Laboratório de Óptica e Filmes Finos. Os primeiros passos para a consolidação deste Laboratório serão brevemente descritos.

OTI - 38

**FILMES DE KCN.** L. C. Guedes Valente, Sidnei Paciornik, Raul A. Nunes e L. C. Scavarda do Carmo. Departamento de Física, PUC/RJ

Filmes de KCN foram produzidos sobre diversos substratos e suas características estão sendo analisadas, incluindo as diversas fases de cristalização por que passam esses filmes na faixa de temperatura entre 77K - 300K.

OTI - 39

**BATIMENTO ÓPTICO EM GUIAS ACOPLADOS.** José Tadeu de Jesus e Sérgio Celaschi. CAFQ/CPQD/Telebrás, 13100, Campinas, SP.

Desde o início do desenvolvimento da tecnologia de comunicações ópticas, esforços foram concentrados na obtenção de dispositivos capazes de combinar sinais luminosos de várias fibras em uma única, de modo a separá-los quando e onde desejado. Estes acopladores representam em comunicações ópticas, papel equivalente aos conectores em Y e T utilizados em sistemas eletrônicos e de micro-ondas. Resultados experimentais sobre o estudo destes acopladores bidirecionais serão discutidos com base na teoria eletromagnética para guias de onda ópticos. Detalhes de técnica experimental são apresentados comparando suas principais vantagens com outros métodos utilizados para a fabricação de tais dispositivos. Resultados de medidas da variação da potência óptica acoplada com o índice de refração externo e com o comprimento de onda da radiação incidente são interpretados por um modelo de batimento óptico dos modos de propagação de mais baixa ordem existentes na região de acoplamento. Algumas aplicações destes dispositivos em sistemas de multiplexação e em chaveamento óptico serão apresentadas.

OTI - 40

ACOPLAMENTO ÓPTICO POR APROXIMAÇÃO MECÂNICA. Horicléa Sampaio Monteiro, CAFO, CPQD/Telebrás, 13100, Campinas, SP.

Os acopladores direcionais são componentes importantes na área de comunicações e de sensores ópticos pois permitem o entroncamento e separação de linhas ópticas em uma rede de comunicações. Para obter o acoplamento entre duas fibras, uma das técnicas utilizadas é a técnica de aproximação mecânica obtida através do polimento das fibras. Neste processo, duas fibras são polidas numa determinada região as quais são posteriormente colocadas em contacto físico. Neste caso, o acoplamento decorre através do campo evanescente desde que a separação entre os núcleos seja menor do que o comprimento de penetração do campo fora de região de quiamento. Este trabalho descreve o procedimento seguido para a obtenção de tais acopladores, suas vantagens e desvantagens sobre outros métodos. Serão apresentados, em linhas gerais, os modelos teóricos nos quais o processo de acoplamento óptico está fundamentado.

OTI - 41

EFICIÊNCIA DE DIFRAÇÃO DE UMA GRADE DE POPULAÇÃO - H.L.Franzito, S.F.Pareira, A.E.Kiel - UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, Campinas, S.P.

Neste trabalho, analisamos a eficiência de difração de uma grade de população transiente formada a partir da interferência de dois pulsos de Laser de alta intensidade incidentes num corante orgânico. Juntamente com estas pulsos, fizemos incidir uma onda de prova fraca neste meio e resolvemos a equação de onda, com a qual obtivemos o gráfico da eficiência de difração no ângulo de Bragg em função do comprimento da célula de corante, tendo como parâmetros as intensidades e comprimento de onda dos pulsos incidentes que geram a grade, concentração do corante e comprimento de onda da onda de prova.

OTI - 42

"ESTUDO DE ACOPLAMENTO DE LASER DE SEMICONDUTOR EM FIBRA ÓTICA MONOMODO", Ildefonso F.Faria Jr. e Felipe R.Barbosa (TELEBRÁS)

Temos utilizado laser emitindo em 0,85  $\mu\text{m}$  e fibras com microlente formada na extremidade previamente atacada com HF. Os resultados preliminares apresentam uma eficiência média de 35% de acoplamento. Está em andamento um estudo teórico experimental para a determinação do raio ideal da microlente para um casamento otimizado entre os campos do laser e da fibra. Além da eficiência do acoplamento também serão objetos de estudo outros fatores importantes como a realimentação provocada pela luz refletida na superfície da microlente dentro da cavidade do laser, assim como a tolerância ao desalinhamento: deslocamentos lineares e angulares.

OTI - 43

**SÍLICA AMORFA OBTIDA PELO PROCESSO SOL-GEL.** Dayse Iara dos Santos e Michel André Aegerter, Instituto de Física e Química de São Carlos - Universidade de São Paulo.

Através do processo sol-gel, atualmente de grande interesse tecnológico e científico, obtivemos diversos tipos de sílica amorfa porosa (aerogel) e vítrea (aerogel densificado). Apresentamos o processo utilizado e alguns resultados de espectroscopia ótica (UV-infravermelho).

OTI - 44

**REFLETÂNCIA DE LUZ EM CÉLULAS FOTOELETRÓQUÍMICAS.** Franco Decker e Mariastella Freccastoro-Decker, Instituto de Física, UNICAMP, 13.100 Campinas, SP.

Uma célula fotoeletroquímica é constituída por uma cuba contendo uma solução na qual estão colocados um eletrodo semiconductor e um contra-eletrodo metálico. O eletrodo é atingido pela luz e criam-se assim pares elétron-buraco que podem ser separados e dar origem a uma corrente elétrica. O eletrodo semiconductor monocristalino pode ser substituído, com grande vantagem econômica, por um filme semiconductor, eletrodepositado sobre um substrato a partir de uma solução adequada. O crescimento do filme pode ser acompanhado através do estudo da refletância óptica do sistema atingido pela luz. O raio luminoso passa através da solução, do filme e do substrato, sendo em parte refletido e em parte refratado em cada interface, e ocorre interferência entre os raios emergentes do sistema. Enquanto o filme eletrodepositado for muito fino (da ordem do comprimento de onda da luz incidente) é possível observar o fenômeno da interferência. Teoricamente se as superfícies de todos os meios forem perfeitamente planas e paralelas a interferência pode ser descrita pelas equações de Fresnel. Mesmo no caso em que a superfície do filme apresenta uma certa irregularidade, é possível modificar as equações de Fresnel segundo um modelo simples e obter um bom acordo entre as curvas de refletância experimental e calculada. O estudo da refletância da luz em uma célula fotoeletroquímica pode fornecer, então, várias informações sobre o filme eletrodepositado, tais como sua taxa de crescimento, dispersão de seu índice de refração, sua espessura óptica e seu grau de uniformidade. Aplicando este método é possível também avaliar as perdas ópticas por refletância em células fotoeletroquímicas na configuração ordinária, descrita acima, e retro-iluminadas.

OTI - 45

**MICROESTRUTURAS ESTRATIFICADAS SINTÉTICA PARA ÓTICA DE RAIOS-X**  
A. RICARDO D. RODRIGUES E LIU LIN - DFCM - IFQSC - USP

Resultados preliminares das primeiras microestruturas estratificadas sintéticas (MES) feitas no DFCM serão apresentados, incluindo o dimensionamento, processo de fabricação e caracterização. Essas MES estão sendo desenvolvidas para aplicações em ótica de raios-x ("espelhos, monocromadores e interferômetros), principalmente na região de raios-x moles ( $10$  a  $100$  Å). A caracterização preliminar das primeiras MES, a ser apresentada, foi feita com raios-x duros ( $1,54$ Å) em um difratômetro de pó e em um difratômetro duplo-eixo construído no DF-USP.

OTI - 46

**SOLDA METAL CERÂMICA, Guilherme Mascaro da Silva, Instituto de Física e Química de São Carlos**

Este é um trabalho experimental, onde estamos desenvolvendo um processo que possibilite a solda satisfatória entre metal e cerâmica em materiais que serão utilizados em processos de evacuação para baixas pressões ( $\approx 10^{-9}$  mbar).

O processo consiste na pintura do substrato cerâmico com um agente metálico, que posteriormente é sinterizado a 1.500°C, permitindo assim que se realize de forma convencional a solda entre a cerâmica e o metal.

OTI - 47

**INSTRUMENTAÇÃO ÓTICA NA OPTO ELETRÔNICA SÃO CARLOS, Antonio Fontana, Milton Ferreira de Souza, Opto Eletrônica São Carlos.**

Neste trabalho descreveremos o desenvolvimento de instrumentos óticos e Lasers na Opto Eletrônica, uma indústria de alta tecnologia recém-criada em São Carlos a partir do IFQSC-USP e da Fundação Parque de Alta tecnologia.

OTI - 48

**P R O J E T O S E M C E S E N V O L V I M E N T O  
S O B R E H O L O G R A F I A****José J. Lunazzi - UNICAMP**

Serão comentados três projetos abrangendo:

- A geração de infraestrutura básica (componentes, referências técnicas).
- A aplicação de técnicas para a determinação de esforços em peças mecânicas.
- A divulgação ao nível didático e artístico.

O primeiro vai produzir suportes mecânicos, espelhos, filtros espaciais, fotômetro e referências sobre mesas antivibratórias com um máximo de tecnologia nacional. O segundo está experimentando uma técnica original para a determinação das componentes angulares das deformações, visando facilitar o processo de interpretação de uma deformação geral. O terceiro treina alunos nas técnicas de holografia para luz branca, desenvolve cursos de óptica para professores de 1º e 2º grau, cursos de extensão universitária, material para jornais e revistas não especializadas e a difusão de novas técnicas artísticas. Estarão disponíveis para projeção dois vídeo-filmes de realização própria.

**OTI - 49** CRISTAL FOTOBIRREFRINGENTE PARA MEDIDA DE VARIAÇÕES NA DIFERENÇA DE CAMINHO ÓPTICO NUMA MONTAGEM HOLOGRÁFICA. JAIMÉ FREJLICH, Instituto de Física "Gleb Wataghin" - UNICAMP.

Um experimento de mistura de duas ondas num cristal de  $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$  pode ser utilizado para medir com precisão as variações rápidas que ocorrem na diferença de caminho óptico entre os dois feixes numa montagem holográfica. Este arranjo é uma das alternativas que estão sendo desenvolvidas para fazer parte de um sistema ativo de estabilização holográfica. Suas características o fazem particularmente interessante para aplicações em processamento óptico. O arranjo atualmente utilizado em tretanto usa um holograma elementar em lugar do cristal e é mais apropriado para fabricação de componentes holográficos. Apresentamos uma análise teórica e alguns resultados experimentais.

**OTI - 50** LITOGRAFIA DE ALTA RESOLUÇÃO APLICADA A REDES DE DIFRAÇÃO HOLOGRÁFICAS. GERALDO NENDES, Instituto de Física "Gleb Wataghin" - Laboratório de Óptica UNICAMP.

Trata-se da gravação de um padrão holográfico em um filme de fotorresista e sua transparência para o substrato ou camada onde o fotorresista esteja aplicado. Nosso estudo visa a caracterização dos principais parâmetros de processo para litografar redes holográficas sobre substratos de vidro e de semicondutores. As principais aplicações deste trabalho são, confecção de matrizes para redes de difração de luz e confecção de Laser de Semicondutores com realimentação distribuída.

**OTI - 51** CARACTERIZAÇÃO DE UM SISTEMA DE ESTABILIZAÇÃO ATIVO PARA UMA MONTAGEM HOLOGRÁFICA. LUCILA CESCATO, Instituto de Física "Gleb Wataghin" - UNICAMP.

Para se obter franjas de interferência de alto contraste em montagens holográficas, principalmente quando se envolve exposições de longa duração, é necessário garantir a estabilidade das franjas. Uma forma de garantir esta estabilidade é através de um sistema de realimentação ativa, que utiliza uma variação de fase provocada num dos braços do interferômetro (podendo ser através de um espelho sobre piezoelétricas) para compensar as variações de fase aleatórias. Nosso objetivo é avaliar quantitativamente o desempenho de um desses sistemas, a partir de medidas da relação "sinal-ruído" (SNR) realizadas no sistema não estabilizado. Através destas medidas pretende-se fornecer elementos para a comparação de diferentes sistemas de estabilização bem como encontrar as melhores condições para seu funcionamento.

OTI - 52

**CERA DE CARNAÚBA: COMPARAÇÃO DE RESULTADOS DE MEDIDAS POR IMPEDÂNCIA COMPLEXA E POR CORRELAÇÃO DE FÓTONS.** - A.L. de Oliveira, O.O. Damasceno, J. de Oliveira e E.J.L. Schouler  
Departamento de Física - ICEX - UFMG.

Nossas medidas fornecem pela primeira vez uma evidência direta de que o mecanismo de condução da Cera de Carnaúba na fase líquida é único.

O valor relativamente alto da energia de ativação da polarização (0,86 e V) indica claramente que os valores muito baixos dos coeficientes de difusão rotacional (2,5 Hz - 7,0 Hz) encontrados em medidas de Correlação de Fótons feitas a diferentes temperaturas são plausíveis.

Os valores muito distintos das energias de ativação da condutividade na fase sólida (0,91 e V), pastosa (3,72 e V) e líquida (0,295 e V) mostram que diferentes modelos de condução devem ser sugeridos para cada uma daquelas fases.

OTI - 53

**ESPALHAMENTO FORÇADO DE LUZ, EM ÂNGULO ZERO, NA FASE LÍQUIDA DA CERA DE CARNAÚBA.** Carlos Henrique Monken, Geraldo Alexandre Barbosa - Dept. de Física - ICEX - UFMG.

A intensidade de luz espalhada em ângulo zero pela fase líquida da cera de Carnaúba varia com a aplicação de um campo elétrico externo. Quando a amostra é colocada entre dois polarizadores cruzados, o gráfico intensidade X tempo apresenta, para campos da ordem de 15kV/cm, ondulações que sugerem um movimento harmônico amortecido de espalhadores de luz supostamente aglomerados (micelas) cilíndricos polares em torno da direção do campo elétrico. Foram feitos cálculos supondo que os aglomerados são ópticamente isotrópicos e ajustes pelo método de mínimos quadrados.

OTI - 54

**ESTUDO DA DIFUSÃO MOLECULAR DE IODO EM GLICERINA POR CORRELAÇÃO DE FÓTONS** - Miguel Tostes Ribeiro, Geraldo Alexandre Barbosa - Dept. de Física - Universidade Federal de Minas Gerais.

O coeficiente de difusão achado através da lei de Stokes-Einstein admite como princípio objetos macroscópicos que difundem em um meio contínuo e fluido. É interessante esta lei também fornecer, dentro de erros razoáveis, o coeficiente de difusão de objetos microscópicos em meios que não podem mais ser considerados como contínuos. Por exemplo, medidas do coeficiente de difusão do  $\text{FeCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$  em glicerina foram feitas neste laboratório e descritas no Chem.Phys.Lett. 112 (1984)456, por R. L. Moreira, A. Abras e G.A. Barbosa. Serão apresentadas medidas do coeficiente de difusão do iodo neste solvente por Análise da Correlação temporal de Fótons de luz espalhada, como uma contribuição ao entendimento deste problema.

**OTI - 55** MODULAÇÃO DE REFLETIVIDADE E TRANSMITÂNCIA EM SEMICONDUTORES POR EXCITAÇÃO ÓTICA. Valéria Loureiro e C.E. de Brito Cruz - UNICAMP

Neste trabalho apresentamos uma técnica para modulação da refletividade e transmitância em semicondutores através da geração de portadores por absorção de luz com frequência maior que a de gap. Usando um laser de  $N_2$  com 1 mJ de energia e 8 ns de duração conseguimos aumentar a refletividade do Ge em 10,6  $\mu\text{m}$  em até 70%. A refletividade inicial era de 13% enquanto a transmitância era de 51%. Com a incidência do laser de  $N_2$  a refletividade ficou entre 17% e 22% enquanto a transmissão caiu para valores entre 29% a 33%. (FAPESP)

**OTI - 56** TRANSIÇÕES DE FASE INDUZIDAS POR PRESSÃO EM  $\text{LiXSO}_4$ . FRANCISCO ERIVAN DE ABREU MELO, JOSUÉ MENDES FILHO, JOSÉ EVANGELISTA C. MOREIRA E FRANCISCO ALCIDES GERMANO DEPTO. DE FÍSICA DA UFPA, VOLTA LEMOS E FERNANDO CERDEIRA. INSTITUTO DE FÍSICA - UNICAMP.

O Cristal de  $\text{LiXSO}_4$  tem sido objeto de interesse recente por apresentar uma fase incommensurada<sup>1</sup> na região  $160\text{K} < T < 240\text{K}$ . Abaixo de 160K o cristal estabiliza numa fase commensurada (Lock-In Phase) cuja estrutura não está ainda bem estabelecida. Recentemente<sup>2</sup>, uma nova fase foi detectada para  $T < 30\text{K}$ . Com o intuito de entender melhor o diagrama de fase deste material, começamos um estudo de espalhamento Raman em Cristais de  $\text{LiXSO}_4$  em função da pressão. Encontramos uma região entre 10 Kbar  $< P < 30$  Kbar cujo espectro Raman é compatível com a existência de uma fase incommensurada. Acima desta pressão, o espectro Raman não apresenta mudanças qualitativas até  $P \sim 70$  Kbar. Medidas preliminares acima desta pressão sugerem a existência de uma nova transição de fase em altas pressões.

1. C.E.A. Fonseca, G.M. Ribeiro, R. Gazzinelli and A.S. Chaves. Solid State Communications, V.46, N3, PP 221 - 225 (1983).
2. J.Mendes Filho, J.E. Moreira, F.E.A. Melo, F.A. Germano and A.S.B. Sombra - Submetido para publicação. Prof. Visitante do Instituto de Física - UNICAMP

**OTI - 57** TRANSIÇÃO DE FASE INCOMMENSURÁVEL NO  $\text{KLiSO}_4$ . Antonio José de Oliveira, Josue Mendes Filho, Francisco Erivan de Abreu Melo, José Evangelista C. Moreira, Francisco Alcides Germano; Depto. de Física da UFPA.

Medidas de constante dielétrica mostraram que o  $\text{KLiSO}_4$  exibe três transições de fase nas temperaturas de 20K, 160K e 240K no resfriamento e 30K, 192K e 290K no aquecimento, acompanhadas por uma longa histerese<sup>1</sup>. Comportamento semelhante é também observado por espalhamento Raman com a temperatura. Das medidas de constante dielétrica concluímos que o  $\text{KLiSO}_4$  experimenta uma transição incommensurável, exibindo comportamento semelhante ao do  $\text{RbLiSO}_4$ , que experimenta uma transição de fase incommensurável<sup>2</sup>. Do estudo de espalhamento Raman concluímos que os modos de representação  $E_2(XY, X^2-Y^2)$  são os modos que se acoplam gerando a modulação na direção x.

1. J. Mendes Filho, J.E. Moreira, F.E.A. Melo, F.A. Germano and A.S.B. Sombra; submetido ao Solid State Commun.

OTI - 58

UMA TRANSIÇÃO DE ORDEM-DESORDEM NO  $\text{BaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ . José Arimatéia e Silva, Josua Mendes Filho, Francisco Erivan de Abreu Melo, José Evangelista C. Moreira e Francisco Alcides Germano. Depto. de Física UFC.

Através de estudos de espalhamento Raman e medidas de constantes dielétricas feitas no intervalo de 12k a 300k no  $\text{BaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ , observamos que este material sofre uma transição de fase de segunda ordem em torno da temperatura de 200k envolvendo ordenamento de metade das moléculas de água de cristalização em sítios  $\text{C}_s$ .

O  $\text{BaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  é um cristal monoclinico<sup>1</sup> do grupo  $\text{C}_{2h}^5$  com quatro moléculas por célula unitária.

1. Jain, Y.S., Kapoor, V.K., and Bist, H.D., Applied Spectrosc. 30, 440 (1976)

OTI - 59

CARACTERÍSTICAS FOTOELÁSTICAS DE CIANETOS ALCALINOS. Sidnei Paciorkik e Luiz Carlos Scavarda de Carmo, PUC/RJ.

O estudo de características fotoelásticas de cristais de cianetos alcalinos a través da técnica de birrefringência com modulação permite a determinação precisa da resposta elástica dos sistemas em quantão e sua variação com a temperatura. Esta técnica é sensível e suficiente para determinar a resposta fotoelástica de amostras de pequenas espessuras tais como filmes.

OTI - 60

LUMINESCENCIA VISIVEL INDUZIDA MECANICAMENTE EM  $\text{KZnF}_3 : \text{Ni}$  e  $\text{KZnF}_3 : \text{Mn}$ .

G.A. Barbosa, Ana M. de Paula, O.M. Mesquita, A.G. Oliveira. Departamento de Física - ICEX/ Universidade Federal de Minas Gerais

Serão apresentados espectros das emissões luminescentes na faixa visível, a temperatura ambiente, provocadas pela clivagem de monocristais das fluorperovskitas  $\text{KZnF}_3 : \text{Ni}$ ,  $\text{Mn}$ .

OTI - 61      CRISTAIS FOTOREFRATIVOS (BSO) PARA PROCESSAMENTO ÓPTICO DE IMAGENS  
 PAULO A.M. DOS SANTOS, Instituto de Física "Gleb Wataghin" - UNICAMP.

Estes cristais possuem capacidade de registro em tempo real, o que é particularmente interessante para o processamento óptico. Apesar de alguns destes materiais serem muito sensíveis, sua eficiência de difração é geralmente baixa, o que constitui uma limitação de ordem prática na utilização destes cristais. Numa fase inicial, analisamos a eficiência de difração (técnicas de medição e possibilidades de maximização), e num passo seguinte uma possível aplicação de interesse prático.

OTI - 62      ESPECTRO DE ABSORÇÃO E LUMINESCÊNCIA EM  $\text{Eu}^{+3}$  COMO DEFEITO EM  $\text{GdAlO}_3$ . Sebastião J. Nascimento de Pádua, Luiz A. de Oliveira Nunes & Jurbas C. Castro (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP).

O trabalho em andamento trata-se do estudo de  $\text{Eu}^{+3}$  como impureza em  $\text{GdAlO}_3$ . O íon trivalente de Európio substitui o Gadolínio neste cristal e está submetido a um campo cristalino de simetria  $C_2$ . Em trabalhos anteriores<sup>(1)</sup> foi mostrado, através de espectroscopia no infravermelho, que a simetria local  $C_2$  no  $\text{GdAlO}_3$  pode ser estudada como uma simetria cúbica ( $O_h$ ) submetida a uma ligeira distorção (uma perturbação de ordem superior). Medidas de absorção de  $\text{Eu}^{+3}$  em  $\text{GdAlO}_3$  na região do visível mostraram as transições eletrônicas do estado fundamental  $^7F_0$  para os estados  $^5D_0$ ,  $^3D_1$  e  $^3D_2$ , bem como, o split do estado fundamental e dos níveis  $^5D_0$ ,  $^3D_1$  e  $^3D_2$ . O split do estado fundamental pode ser suposto, pelo desaparecimento de algumas linhas quando se abaixa a temperatura do cristal. Fizemos também medidas de luminescência que pretendemos discutir no Encontro.

(1) Bagnato, V.S.; Nunes, L.A.O.; Zilio, S.C.; Scheel, H.J. & Castro, J.C. - Infrared electronic transitions of  $\text{Eu}^{+3}$  in  $\text{GdAlO}_3$ . Sol. Stat. Commun. 49(1):27-30, 1984.

OTI - 63      EMISSÃO VIBRACIONAL DE  $\text{CN}^-$  EM CRISTAIS IÔNICOS SOB APLICAÇÃO DE CAMPO EXTERNO. Guillermo Guzmán Martel & Máximo Siu Li (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP). O  $\text{CN}^-$ , caso simples de molécula diatômica, possui modo de estiramento. Na maioria dos halogenetos alcalinos, o  $\text{CN}^-$  reorienta-se rapidamente ( $10^{-9}$  seg) num mínimo de potencial na direção  $\langle 111 \rangle$  e pode ser observada emissão vibracional em  $4,8 \mu\text{m}$  exibindo longos tempos de decaimento ( $10^{-3}$  seg). Esta molécula pode ser excitada diretamente com radiação externa incidente (corpo negro ou laser) e assim observar emissão vibracional, porém, existe clara evidência de que esta molécula pode ser excitada por acoplamento com centros F, excitado na sua banda de absorção (Y. Yang, F. Lüty. Phys. Rev. Lett. 51, 419, 1983). As características apresentadas pelo  $\text{CN}^-$  são surpreendentes, observou-se um crescimento na intensidade de emissão de 12 vezes após o acoplamento. Neste trabalho foi excitado o segundo harmônico ( $2,4 \mu\text{m}$ ) do  $\text{CN}^-$  com radiação de corpo negro e aplicando pressão uniaxial em temperaturas do hélio líquido pode ser observada novamente emissão vibracional em  $4,8 \mu\text{m}$ . A pressão uniaxial foi aplicada em várias orientações cristalográficas,  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$ . Este estudo orientacional permitiu observar características reorientacionais da molécula na emissão vibracional (polarização da emissão). (Projeto financiado pelo CNPq, FAPESP, FINEP).

OTI - 64

"DESLOCAMENTO DA BANDA DE PLASMON ( $Ag^0$ ) EM FUNÇÃO DA POSIÇÃO DOS NÍVEIS

$4f(Eu^{3+})$  ATRAVÉS DE AGENTES REDUTORES EM VIDROS", O.L.Malta, P.A.Santa-Cruz and G.F.de Sã. Departamento de Química Fundamental e Departamento de Física - UPPE.

Aumentos consideráveis na fluorescência do íon  $Eu^{3+}$  ( $\sim \times 6$ ) já foram detectados e discutidos em função das interações eletromagnéticas entre plasmons (em partículas  $\sim 40\text{Å } Ag^0$ ) e íons terras raras ( $Eu^{3+}$ ) em vidros<sup>1,2</sup>.

Para que esta amplificação na fluorescência ocorra com eficiência, é necessário que haja ressonância entre a banda de plasmon e níveis energéticos dos íons terras-raras. Com o objetivo de deslocar a banda de absorção (plasmon) da prata em direção aos níveis eletrônicos  $4f$ , foram utilizados meios redutores, inicialmente óxido de cálcio, em materiais vítreos<sup>1</sup>. Através da variação da concentração deste agente redutor, conseguiu-se o controle da posição da banda de plasmon, cuja monitoração fez-se através da espectroscopia de absorção. Medidas de tamanho e concentração de aglomerados são acompanhadas por microscopia eletrônica - STEM.

Outros meios redutores serão discutidos, no sentido de se encontrar um "reductor ideal", que reduza a prata iônica do meio sem interferir no espectro ótico da matriz.

1 - O.L.Malta, P.A.Santa-Cruz, G.F.de Sã and F.Auzel, J.of Luminescence 33 (1985) 261.

2 - O.L.Malta, P.A.Santa-Cruz, G.F.de Sã and F.Auzel, Chem.Phys.Letters 116 (1985) 396.

OTI - 65

PROPRIEDADES ÓTICAS DE  $LiAl_5O_8:Fe^{3+}$  e  $LiGa_5O_8:Fe^{3+}$ .

EQUIPE : Toécrito Abritta, Julio Maria Neto e Fernando de Souza Barros.  
Instituto de Física - UFRJ.

Estes sistemas foram intensamente estudados no nosso laboratório, desde baixas concentrações da impureza  $Fe^{3+}$  até o limite que ocasiona a extinção da fluorescência. Apresentaremos um resumo das propriedades espectrais determinadas e analisaremos os processos físicos responsáveis.

OTI - 66

PROPRIEDADES ÓTICAS DE ESTRUTURAS FRACTAIS A.Kiel - UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, Campinas, SP.

Serão apresentados estudos preliminares sobre sistemas fractais ('fractal') e os reflexos das dimensões fracionárias nas propriedades ópticas tais como espalhamento, emissão, etc..

OTI - 67

CONSTRUÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE UM DETETOR DE METAL-ISOLANTE-METAL PARA LASERS NO INFRAVERMELHO LONGÍNQUO.- Maria Cristina Hellmeister  
Departamento de Física-UFAL.

Este trabalho é o resultado de um estudo que teve por finalidade dominar a tecnologia envolvida na construção e caracterização de um detetor de contato pontual, do tipo metal-isolante-metal, para detecção de radiação de laser infravermelho longínquo. A escolha desse tipo de detetor foi motivada pelas seguintes exigências: operação à temperatura ambiente, factibilidade tecnológica sem uso de técnicas sofisticadas e baixo custo. Todos esses atributos são encontrados no detetor de W-Ni, objeto desse estudo, com a vantagem adicional de possuir um tempo de resposta muito rápido ( $\sim 10^{-14}$ s). O estudo paramétrico do detetor foi feito com laser de álcool metílico operando na linha de  $118.8\mu\text{m}$ . Os resultados experimentais são interpretados usando teorias de antenas e um modelo de túnelamento para junção.

OTI - 68

FOTO-DETECTORES COM TEMPO DE SUBIDA DE SUB-NAOSEGUNDOS. Franklin  
Masami Marinaga, Carlos Henrique de Brito Cruz, Unicamp-IPGW

Construímos um foto-detector baseado na foto-condutividade dos semicondutores (GaAs, Si...), servindo para detectar luz com energia maior que o "gap" do semicondutor. O detector é formado por um semicondutor de GaAs ( $3 \times 2 \times 0.5 \text{mm}^3$ ), colado na interrupção de uma linha de transmissão de  $50 \Omega$ , sendo ligada à linha com tinta de prata. Para uma geometria simples obtivemos uma resolução menor do que um ns, comparado à do foto-diodo a vácuo ITL 1850 (100ps). Esta resolução pode chegar a um ps, melhorando-se a geometria do "Gap" da linha de transmissão. Além da simplicidade, o detector também se caracteriza pelo baixo custo (< \$ 50). (FA-FESP).

**VI.13 - RESSONÂNCIA MAGNÉTICA**

**Coord.:- Alberto Passos Guimarães Filho (CBPF)**

RES - 01

ESTUDO DE CENTROS DE VALÊNCIA DIVALENTE PRODUZIDOS POR IRRADIAÇÃO EM XÍDIDO DE MAGNÉSIO POLICRISTALINO.

S. de Biasi e Antonio A. R. Fernandes (Seção de Engenharia e Ciência dos Materiais, Instituto Militar de Engenharia).

O espectro de  $V^{2+}$  em centros de simetria cúbica foi observado por R.P.E. em amostra de  $H_2O$  policristalino irradiadas com raios-X. Verificouse que para baixas doses de irradiação, a concentração de centros aumenta linearmente com o tempo de irradiação. Os centros são instáveis, decaindo com uma meia-vida de aproximadamente 23 dias a temperatura ambiente.

RES - 02

DEPENDÊNCIA COM AS SUB-REDES, TEMPERATURA E CAMPO MAGNÉTICO APLICADO DO TEMPO DE RELAXAÇÃO SPIN NUCLEAR-REDE ( $T_1$ ) PARA  $^{55}Mn$  EM  $MnCl_2 \cdot 4H_2O$ . M.A.B. de Araújo - Departamento de Física (UFCA) e N.J.Stone - Clarendon Laboratory-Oxford-UK.

Através da ressonância magnética de núcleos orientados (NMR/OR), é feito um estudo da dependência do tempo de relaxação spin-nuclear rede ( $T_1$ ) com as sub-redes magnéticas, campo magnético aplicado e temperatura, nas vizinhanças da transição de fase magnética, antiferromagnética-spin flop (AF-SF).

RES - 03

ANISOTROPIA NO SEMICONDUTOR FERROMAGNÉTICO  $HgCr_2Se_4$  DOPADO COM  $1.3mol\%Ag$ ., J.M.Ferreira, M.D.Coutinho-Filho e S.M.Rezende, Deptº de Física, UFPE

Analizamos a forma da linha da ressonância ferromagnética e a anisotropia no semicondutor de alta condutividade  $HgCr_2Se_4-1.3mol\%Ag$ . Os resultados são interpretados utilizando-se um modelo de ressonância tipo superfície onde incluímos efeitos de anisotropia. Utilizando a teoria de campo cristalino, a contribuição para a anisotropia de um único ion dos ions de Cr de diferentes valências ( $Cr^{2+}$ ,  $Cr^{3+}$  e  $Cr^{4+}$ ) é apresentada e comparada com os resultados experimentais.

RES - 04

## RELAXAÇÃO SPIN NUCLEAR-REDE NO SISTEMA MAGNÉTICO DILUÍDO

$\text{KNi}_x\text{Mg}_{1-x}\text{F}_3$ . M.Engelsberg, J.Albino O.de Aquiar e A.Franco Jr.,  
Departamento de Física, UPPE.

Apresentamos medidas da taxa de relaxação spin nuclear-rede,  $1/T_1$ , do  $^{19}\text{F}$  no sistema magnético aleatoriamente diluído  $\text{KNi}_x\text{Mg}_{1-x}\text{F}_3$ . As medidas referem-se a relaxação do  $\text{F}^{(0)}$ , fluor que não tem nenhum primeiro vizinho magnético. A dependência de  $1/T_1$  com a temperatura, e com a concentração de íons magnéticos na faixa  $0,1 \leq x \leq 0,9$ , apresenta diferenças significativas quando comparada com o sistema isoestrutural  $\text{KMn}_x\text{Mg}_{1-x}\text{F}_3$ . O papel desempenhado pela interação de exchange entre segundos vizinhos magnéticos ( $J_2$ ) na taxa de relaxação, é discutido a luz da teoria de Thayamballi e Hone<sup>(1)</sup>. Embora a contribuição de  $J_2$  para  $1/T_1$  pareça ser desprezível no composto contendo  $\text{Mn}^{(1)}$ , os nossos resultados indicam que esta contribuição deve suplantaráquela proveniente da interação dipolar entre segundos vizinhos magnéticos. Este trabalho foi parcialmente financiado pela FINEP, CNPq e CAPES.

1) P.Thayamballi and D.Hone. *Phys.Rev.* B21, 1766 (1980)

RES - 05

NUCLEAR SPIN-LATTICE RELAXATION OF THE RANDOMLY DILUTED ANTIFERROMAGNETS  $\text{Mn}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$ 

AND  $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$ . C. J. Magon<sup>a</sup>, V. Jaccarino, A. R. King, H. Yasuoka, F. C. Aica-  
raz (\*Instituto de Física e Química de São Carlos - USP, Caixa Postal 369, 13560 - São Carlos, S.P.

The nuclear spin-lattice relaxation rates ( $1/T_1$ ) of those  $^{19}\text{F}$  nuclei, which are not transfer hyperfine coupled to magnetic near neighbours, in diluted antiferromagnets  $\text{Mn}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$  and  $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$  have been measured over a large temperature range as a function of the concentration  $x$ . The high (room) temperature data is in good agreement with the theoretical results, which have been obtained in the concentration range  $0.1 \leq x \leq 0.8$ . The temperature dependence of  $1/T_1$  for  $T_c \leq T \leq 300 \text{ K}$  is qualitatively understood, including the differences in the behavior of the  $\text{Fe}^{2+}$  and  $\text{Mn}^{2+}$  systems.

RES - 06

NMR LINEWIDTHS IN D=3 RANDOM FIELD ISING SYSTEMS:  $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$ . C. J. Magon<sup>a</sup>, J. Sartorelli, A. R. King, V. Jaccarino, M. Itoh, H. Yasuoka, P. Heller (\*Institu-

to de Física e Química de São Carlos, USP, Caixa Postal 369, 13560 - São Carlos, SP).

The critical divergence of the inhomogeneously broadened  $^{19}\text{F}$  NMR was studied in  $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$  ( $x=0.46$ ;  $0.60$ ) above  $T_c$ . The second moment of the line profile  $I(H)$  behaves as  $M_2^{1/2} \sim T^{-p}$  with  $p=0.27$  and is to be compared with Heller's prediction of  $p = 1/2 - 7\gamma$  (0.32: random exchange; 0.25: random field). With  $H \parallel c$ ,  $I(H)$  changes from Gaussian towards Lorentzian for  $t \leq 10^{-2}$ .

RES - 07

ESTUDO POR RPE DOS SISTEMAS HEAVY-FERMIONS  $UBe_{13}$  E  $UPt_3$ 

Flávio G. Gandra - UNICAMP - IFGW

Foram estudados os espectros de RPE de  $Er^{3+}$ ,  $Gd^{3+}$  diluídos entre 1000 e 10.000ppm em  $UBe_{13}$  e em  $UPt_3$ . A alta densidade de estados no nível de Fermi medida por calor específico em ambos os compostos não se evidenciou nos parâmetros de RPE (razão de Korringa e deslocamento de g) e principalmente não se observou a dependência destes parâmetros com a temperatura.

Estes resultados indicam que o processo de relaxação do momento localizado da terra-rara não está diretamente acoplado ao "sistema heavy fermion" ao contrário do que sugerem os resultados da NMR do núcleo de Be.

RES - 08

## EFEITO DE CAMPO CRISTALINO NO ESPECTRO DE RESSONÂNCIA DE COMPOSTOS DE VALENCIA INTERMEDIÁRIA (VI).

P. Venegas e G. E. Barberis. UNICAMP, 13100 Campinas, S.P.

Neste trabalho apresentamos a simulação do espectro de ressonância de impurezas ( $Gd$ ,  $Er$ ,  $Dy$ ) em  $CePd_3$  e em compostos que não são de VI. Foi possível reproduzir completamente os espectros monocristalinos e policristalinos de amostras de  $CePd_3:Gd$ . No cálculo teórico incluímos o efeito de estreitamento da estrutura fina, alargamento térmico das linhas de ressonância e a energia de excitação entre as configurações  $4f^0 + 4f^1$  em  $Ce$ . Apartir do ajuste do espectro, achamos que a energia de excitação e de aproximadamente 400K resultado que coincide com o obtido através de outras técnicas. Também foi possível fazer a simulação e ajuste de  $CePd_3:Er,Dy$  usando teoria de campo cristalino e achamos que o efeito de VI nos espectros é pequeno. Comparamos e discutimos em detalhes estes resultados com os obtidos em outros compostos que não são de VI tais como  $CeRh_3$  e  $CeIr_2$ .

RES - 09

ESTUDO DE RMN E RELAXAÇÃO NUCLEAR MAGNÉTICA DO  $Y_2Co_7$ , H.Figiel<sup>1</sup>, A.C.Barata<sup>2</sup>, A.P.Guimarães<sup>3</sup>, Academia de Minas e Metalurgia, Cracóvia, Polônia, Departamento de Física e Química, UFES, e CBPF

O supercondutor magnético  $Y_2Co_7$  apresenta átomos de cobalto magnéticos e não-magnéticos. Trabalhos anteriores atribuem aos átomos de Co magnéticos uma linha de RMN que não pôde ser detetada no presente trabalho.

Para a intensa linha de RMN do  $^{59}Co$  associada aos cobaltos não-magnéticos foram medidos os tempos de relaxação  $T_1$  e  $T_2$  em função da temperatura. Resulta que  $T_2$  é dependente da magnetização da amostra;  $T_1$  pode ser atribuído a interações com elétrons de condução, flutuações de spin e atenuação de ondas de spin.

RES - 10

DETALHES DA ORGANIZAÇÃO E DO PROGRAMA CIENTÍFICO PRELIMINAR DO 9th ISMAR MEETING - Ney Vernon Vugman - Instituto de Física - UFRJ

O Nono Encontro da Sociedade Internacional de Ressonância Magnética será realizado no Rio de Janeiro, de 29 de junho a 5 de julho de 1986, no Hotel Glória e cobrirá aplicações de Ressonância Magnética em Física, Química, Biologia e Medicina.

O programa incluirá os mais recentes avanços na área, tais como espectroscopia a múltiplos quanta, NMR a campo nulo, polarização nuclear induzida por microondas, ressonância magnética em sistemas incomensuráveis, semicondutores de sordenados, sistemas fractais, física e química de superfícies e interfaces, estrutura de membranas e dinâmica molecular, estrutura tri-dimensional de polipeptídeos, estudos de proteínas e ácidos nucleicos, anti-corpos, cristais líquidos e outros. Estarão incluídos também os mais recentes avanços em campos correlacionados tais como fenômenos de acoplamento de spin induzidos por lasers, técnica de imagens e microscopia por NMR.

As sessões da manhã e da tarde serão abertas por uma "Plenary Talk" e divididas em quatro sessões simultâneas: Física, Química, Biologia e Medicina. Cada uma destas será aberta por uma "Keynote Talk", seguida pelas comunicações orais. Ao final da tarde iniciam-se as sessões de painéis, seguidas por Simpósios Especiais à noite.

RES - 11

ESTUDO POR RPE DE COMPLEXOS PARAMAGNÉTICOS DE PALÁDIO EM NaCl e KCl DOPADOS COM  $\text{Pd}(\text{CN})_4^{2-}$ . Maria Lúcia Netto Grillo-UERJ e Ney Vernon Vugman - UFRJ.

O estudo por RPE dos efeitos causados pela irradiação com raios-X no complexo diamagnético  $\text{K}_2\text{Pd}(\text{CN})_4$  em redes de NaCl e KCl indica a formação de duas espécies paramagnéticas. Baseando-nos em estudos anteriores feitos com o complexo  $\text{K}_2\text{Ni}(\text{CN})_4$  em rede de KCl, (S.I. Zanette; A.O. Caride e J. Danon - J.Chem. Phys. 64,8 (1976)) pudemos identificar as duas espécies como sendo o complexo  $(\text{Pd}(\text{CN})_4)^{3-}$ , formado pela captura de 1 elétron em um orbital  $d_{x^2-y^2}$  e o complexo  $(\text{Pd}(\text{CN})_4\text{Cl}_2)^{1-}$ , formado pela perda de 1 elétron, ficando 1 elétron não emparelhado em um orbital  $d_{z^2}$ .

A variação da temperatura controlada das amostras irradiadas, desde 12K até 300K mostrou a variação do fator g das duas espécies, e da interação hiperfina da 2ª espécie indicando a influência de modos localizados anarmônicos de vibração.

RES - 12

ESTUDO POR EPR DOS DEFECTOS INDUZIDOS POR RADIAÇÃO  $\beta$  E  $\gamma$  EM CALCITAS NATURAIS: IMPLICAÇÕES NA DATAÇÃO POR EPR.  
Alexandro M. Rossi, Gerard Poupeau, Jacques Danon (Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas)

Estudamos neste trabalho as linhas de absorção de EPR de calcitas de espeleotemas, em pó e monocristais, quando irradiadas com raios  $\beta$  e  $\gamma$ . Ambos os tipos de radiações produzem as mesmas espécies paramagnéticas. Estudo de variações angulares em monocristais revela a formação de 4 (quatro) espécies paramagnéticas estáveis a temperatura ambiente. Três delas são atribuídas aos grupos  $\text{CO}_2^-$  com simetria axial e  $\text{CO}_2^-$  com simetria axial e ortorrômbica. A quarta espécie pode ser interpretada como sendo um grupo do tipo  $\text{CO}_2^-$ . Interações hiperfinas com íons de impurezas da rede, responsáveis provavelmente pela estabilização destes radicais com valência não usual, são analisadas.

Para a datação destes materiais por EPR utiliza-se amostras em pó. Por esta razão espectros de pó de amostras irradiadas e naturais foram estudadas. Discutimos o comportamento das linhas de ressonância com a dose de irradiação, estabilidade térmica e tribo efeitos. Comparando os espectros de pó conclui-se que as espécies ativadas por irradiação em todos os espeleotemas que estudamos estão igualmente presentes nos espectros de calcitas naturais. Das características dos espectros das amostras irradiadas e das naturais e de sua relação discutimos o método de datação de materiais geológicos por EPR.

RES - 13

**DETECÇÃO POR ESR DAS TRANSFORMAÇÕES CAUSADAS POR AQUECIMENTO EM HIDROXOACETATO DE FERRO (III) AMORFO.** Edson Correa da Silva, Marco Iacovacci, Helton Vargas, Eduardo Antonio Pinheiro e Fernando Calenbeck.

Amostras em pó de hidroxacetato de ferro (III) amorfo foram tratadas por aquecimento isotérmico e as modificações foram acompanhadas por medidas de ESR através de um espectrômetro da banda X. Para cada temperatura os parâmetros das linhas ESR foram obtidos para diversos tempos. Detectou-se a existência de um patamar de temperatura (190°C) acima do qual um processo de reorganização, crescimento e cristalização é iniciado. O material sai de um estado sólido amorfo vítreo e vai para um estado de maior mobilidade das partículas (como em uma transição sol-gel). Em termos magnéticos o material que apresenta-se paramagnético passa a conter partículas ferromagnéticas identificadas como  $Fe_3O_4$ , isto é, magnética, por medidas de difração de raios X e pelos resultados da ESR.

RES - 14

**CINÉTICA DE ORDENAMENTO EM GRAFITE-SbCl<sub>5</sub> ESTUDADA POR RPE**

S. Rolla, L. Walsley e C. Rettori

Instituto de Física - UNICAMP

Experimentos de ressonância paramagnética eletrônica permitiram o estudo da cinética de ordenamento numa transição ordem-desordem quase bi-dimensional observada a  $T_c=210K$  no grafite-SbCl<sub>5</sub> estágio 4.

"Quenching" da fase desordenada ( $T > T_c$ ) mostra um alargamento da linha de ressonância com o tempo com um comportamento da forma ( $\sim t^n$ ) que nós atribuímos ao crescimento no tempo do tamanho linear médio do domínio de uma rede fracamente incomensurável. O ajuste dos dados experimentais dá  $n=0.45 \pm 0.02$  que corresponde a um crescimento lento de domínios em uma rede altamente degenerada. Evidências de uma cinética mais lenta se observa depois de aproximadamente 40 minutos, e a baixas temperaturas ( $T < T_c$ ) há evidências da existência de um estado tipo "Glass".

RES - 15

**FORMA DA LINHA DE RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA DA DEXTROSE CARBONIZADA.** Wanda C. Las (Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares-CNEN/SP), Walter H. Pontuschka, Jarbas T. dos Santos (Instituto de Física da USP), Ronaldo S. de Biasi (Instituto Militar de Engenharia-RJ).

Amostras de dextrose carbonizada foram preparadas de acordo com o método de Pastor e Hoskins (1). Foram utilizadas quatro amostras, sendo uma pura e duas diluídas em KCl em pó em diferentes concentrações. Medidas da ressonância paramagnética eletrônica (RPE) foram realizadas com as amostras antes e após serem seladas a vácuo.

O valor de g e a largura de linha obtidos,  $(2,00236 \pm 0,00005)$  e  $(0,982 \pm 0,024)$  G, respectivamente, foram comparados com os valores da literatura (1). Foram feitas comparações com uma amostra padrão da VARIAN com o objetivo de caracterizar as amostras de dextrose como padrões estáveis de RPE.

Como a selagem a vácuo foi efetuada por um tempo relativamente curto, observou-se uma assimetria semelhante à existente na linha de RPE do  $\alpha$ -Si, atribuída às ligações pendentes do Si. Sugere-se que mecanismos análogos são operantes nas ligações pendentes do carbono na dextrose carbonizada.

(1) R.C.Pastor and R.H.Hoskins - The Journal of Chem. Phys. 32 (1), 264-269 (1960)

RES - 16

## ESTUDO DA LUDLAMITA OXIDADA

Lígia de F. Moreira, Hélio Salim de Amorim e E. Mattievich; Instituto de Física da UFRJ.

Foram estudadas seis amostras de ludlamita sintética,  $Fe_2^{2+}(PO_4)_2 \cdot 2H_2O$ , em diferentes graus de oxidação, por espectroscopia Mössbauer e difração de raios-X em amostras em pó.

O objetivo do presente estudo é verificar o comportamento deste fosfato frente a oxidação em fase sólida, e compará-lo com a vivianita\*,  $Fe_3^{2+}(PO_4)_2 \cdot 8H_2O$ , previamente estudada.

Neste caso verifica-se que, no processo de oxidação em fase sólida, (oxidação espontânea dos cristais expostos ao ar, sob aquecimento controlado a temperatura máxima de 120°C) os valores dos parâmetros de célula unitária são modificados, porém sem observar variações de simetria no cristal. Para concentrações superiores 50% de ions  $Fe^{3+}$  nota-se mudanças marcantes, tanto nos valores dos parâmetros Mössbauer, como nos espectros de difração de raios-X. Estas mudanças indicam que a partir de um certo grau de oxidação (em torno de 50%) ocorrem alterações estruturais análogas às observadas na vivianita.

Financiado pela FINEP e CNPq.

\* Poullien, Jean François. Tese Doutorado - Universidade Pierre et Marie Curie - Paris - França (1982).

RES - 17

## RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA DE CENTROS DE HIDROGÊNIO ATÔMICO NA TURMALINA ROSA DO BRASIL.

Marly Bueno de Camargo e Walter Maigon Pontuschka (Instituto de Física, Universidade de São Paulo). Estudamos o hidrogênio atômico ( $H^0$ ) na turmalina rosa irradiada com raios  $\gamma$  pela técnica de ressonância paramagnética eletrônica (RPE). As linhas de RPE do  $H^0$  são largas ( $\approx 15$  Gauss) em comparação com as do  $H^0$  livre ( $< 1$  Gauss). O alargamento das linhas de  $H^0$  na turmalina ocorre principalmente devido a variações locais dos parâmetros  $g$  e  $A$  da Hamiltoniana de spin por efeito da distribuição dos cátions  $Mn^{3+}$ ,  $Mn^{2+}$ ,  $Li$ ,  $Fe^{2+}$  e  $Fe^{3+}$  que fazem parte da solução sólida. Como a largura observada não muda com a temperatura, segue-se que o  $H^0$  não se difunde pelo cristal. Os valores de  $g$  e  $A$  foram medidos com precisão e determinados com a diagonalização da matriz da Hamiltoniana de spin num espaço vetorial de 4 dimensões, seguida de um cálculo iterativo rapidamente convergente.

Admitindo-se que o campo local seja o único agente perturbador sobre a constante de estrutura hiperfina  $A$ , haverá uma mistura dos orbitais  $1s$  e  $2p$  do  $H^0$  resultando num valor estimado para o campo elétrico da ordem de  $8,5 \cdot 10^7$  V/cm. O cálculo teórico do campo elétrico produzido pelas cargas da rede, resultou em  $E = 26,9 \cdot 10^7$  V/cm. Este valor, 3,2 vezes maior do que o esperado, mostra que não podemos desprezar o efeito da repulsão de Pauli devido à superposição de orbitais, uma vez que o  $H^0$  está comprimido entre ions  $O^{2-}$  e  $Na^+$ , que se atraem fortemente. O modelo proposto para o dano de radiação é o aparecimento do  $H^0$  pela radiólise da hidroxila localizada no sítio  $O_1$  da brucita:  $OH \cdot hv \rightarrow O^{\cdot -} + H^0 + \text{calor}$

Propomos que o processo de recombinação do  $H^0$  na rede é do tipo Arrhenius, mostrando uma cinética de primeira ordem. A energia de ativação do mesmo é  $E = 1,1(1)$  eV.

RES - 18

## "MEDIDAS DE TEMPO DE RELAXAÇÃO TRANSVERSAL E LONGITUDINAL DE TECIDOS DE FÍGADO

DE RATO COM SOBRECARGA DE FERRO". O. Baffa, A. Tannus<sup>1</sup>, M.A. Zago<sup>2</sup>, M.S. Figueiredo<sup>2</sup> e H. Paragucci<sup>1</sup>, Dept<sup>o</sup> de Física, UFCL Ribeirão Preto- USP, 14100 - Ribeirão Preto- SP, 1) Grupo de Imagem, Laboratório de Ressonância, IPQSC-USP, CP 369, 13560 - São Carlos- SP, 2) Dept<sup>o</sup> de Clínica Médica, Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto- USP, 14100 - Ribeirão Preto- SP.

A sobrecarga orgânica de ferro pode ser resultante de várias condições clínicas, e provocar lesão de numerosos órgãos, especialmente coração, fígado e glândulas endócrinas. O ferro deposita-se na forma de complexos proteicos paramagnéticos (ferritina e hemossiderina).

Nesta comunicação é apresentado um estudo dos tempos de relaxação dos prótons da água presente no tecido do fígado de rato com altas concentrações de ferro. A sobrecarga de ferro foi obtida através de repetidas injeções intramusculares de um complexo de ferro. Os tempos de relaxação  $T_1$  e  $T_2$  foram medidos in vitro usando-se um espectrômetro pulsado de NMR pela técnica de inversão-recuperação e spin-eco para diferentes concentrações de ferro. Os resultados mostram uma relação linear entre as taxas de relaxação  $T_1^{-1}$  e  $T_2^{-2}$  e a concentração de ferro medida quimicamente. Observa-se também que para sobrecargas acima de 1.5 mg/100g. de tecido, as curvas da amplitude do eco são bifásicas com pelo menos dois tempos de relaxação  $T_2$ , sugerindo sítios diferentes de sobrecarga.

Apoio financeiro CNPq, FINEP/PADCT.

RES - 19

FORMAS DE LINHA DE RMN NO SISTEMA MAGNÉTICO DILUÍDO ALEATORIAMENTE

TE  $KNi_xMg_{1-x}F_3$ . Adolfo Franco Jr. e Mario Engelsberg, Departamento de Física - UFPE.

São apresentados resultados experimentais de RMN sobre as formas de linha de  $^{19}F$  no sistema magnético diluído aleatoriamente  $KNi_xMg_{1-x}F_3$ . A deriva da do espectro de absorção apresenta uma "estrutura" peculiar para uma orientação particular de campo magnético. Usando o método de frações contínuas construímos simulações das formas de linha que nos permitem extrair alguns momentos. Estes momentos são comparados com as predições de teorias existentes.

RES - 20

ANÁLISE DOS EFEITOS DA NÃO-LINEARIDADE NA SELEÇÃO DE PLANOS EM TOMOGRAFIA POR RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR. Tito José Bonagamba, Nicolau Beckmann, Alberto Tannus, Horacio Carlos Panepucci, Claudio José Magon - Instituto de Física e Química de São Carlos/USP.

Em Tomografia por Ressonância Magnética Nuclear, a seleção de um plano se obtém excitando seletivamente uma fatia do objeto com um pulso de radiofrequência (RF) na presença de um gradiente de campo. Tal pulso de RF contém uma largura espectral muito menor que a distribuição de frequências de Larmor do objeto, sob a ação do gradiente de seleção aplicado. Idealmente, deseja-se obter uma magnetização transversal tal que  $M_x$  seja nula e  $M_y$  seja constante e diferente de zero na região escolhida, o que exige a utilização de algum mecanismo de refocalização dos spins após a excitação. A resposta não-linear do sistema de spins e a duração finita dos pulsos de RF são as principais dificuldades para a obtenção do resultado ideal. Aqui fazemos uma análise das várias alternativas possíveis para contornar estas dificuldades e, a partir desta, apontamos as sequências de pulsos mais convenientes para a geração de imagens.

RES - 21

IMAGENS POR NMR EMPREGANDO ECOS DE HAHN ESTIMULADOS. Beckmann, N., Bonagamba, T.

J., Tannus, A., Panepucci, H., Neto, A.T., Martins, M.J. - \*Instituto de Física e Química de São Carlos, USP, Caixa Postal 369, 13560-São Carlos, SP.

Ecos de spin são facilmente produzidos em experimentos de NMR quando múltiplos pulsos de RF são aplicados em sequência. Descreve-se com métodos de imagens empregando uma sequência de três pulsos de  $90^\circ$ , gerando ecos de HAHN estimulados e secundários. Os ecos de HAHN estimulados permitem respectivamente a geração simultânea de imagens pesadas por  $T_2$  e  $T_1$ , cada uma das quais possui uma particular dependência com respeito aos parâmetros da sequência. A sequência descrita permite também a geração de imagens com diferentes resoluções espaciais, o que é conseguido aplicando-se os gradientes de codificação de fase em diferentes instâncias, para cada eco.

RES - 22

**TOMOGRAFIA POR RMN: ARQUITETURA DE UMA MÁQUINA DE 2.0 TESLA.** Tennus, A., Marting, R.J., Neto, A.T., Bonagamba, T.J., Beckmann, N., Panepucci, M. (Instituto de Física e Química de São Carlos, Caixa Postal 369, 13560 - São Carlos, SP).

Um tomógrafo de Ressonância Magnética Nuclear (RMN), que está sendo construído no Instituto de Física e Química de São Carlos é um sofisticado espectrômetro de Fourier de RMN pulsada. O sistema que descrevemos neste trabalho foi projetado para operar com um magneto supercondutor solenoidal de 30 cm de diâmetro interno, capaz de gerar campos magnéticos com intensidade até 2 Tesla, adquirido da OXFORD Instr. Este magneto permite, além da geração do campo magnético estático de alta estabilidade e grande homogeneidade, a geração de gradientes de campo com orientação e dependência temporal totalmente controladas. Desenvolvemos um espectrômetro e um sistema de controle constituído de periféricos destinados a geração de envoltórias, sincronismo de eventos, digitalização/aquisição/promediação de transientes, dispositivos de visualização de imagens, geração e detecção de Radiofrequência, transdutores, todos com flexibilidade de operar com grande variedade de computadores. O sistema de controle opera atualmente com um microcomputador MicroLE (desenvolvido nesta Instituição), e está sendo testado com um protótipo de espectrômetro construído em torno de um magneto resistivo (VARIAN, 12"), operando em 0.6 Tesla (23 MHz). Os resultados obtidos com o protótipo resistivo serão mostrados em fotografias. As técnicas utilizadas na obtenção das imagens são: reconstrução a partir de projeções (convolução/retroprojeção) e transformada de Fourier bidimensional direta (2DFT).

RES - 23

**ECOS DE SPIN EM RMN PULSADA: EFEITOS DE INTERAÇÕES QUADRUPOLES ELÉTRICAS.** R.R. Sobral, X.A. da Silva e A.P. Guimarães, CBPF

Em sistemas ferromagnéticos onde o espectro RMN apresenta interações quadrupolares elétricas não resolvidas a amplitude de eco de spin apresenta um comportamento oscilatório em função de separação  $\tau$  entre os pulsos de excitação. Estas oscilações são em alguns casos atenuadas.

Neste trabalho as amplitudes dos ecos de spin são computadas numericamente, usando um algoritmo simples. Estas são calculadas para diferentes valores do spin nuclear e para diferentes condições de excitação. O acordo com os cálculos analíticos disponíveis é bom. As amplitudes dos ecos de spin múltiplos (para  $I > 1/2$ ) são também obtidas.

Os cálculos são estendidos para o caso de gradientes de campo não axialmente simétricos, e se verifica que esta situação não corresponde às oscilações atenuadas observadas experimentalmente.

**VI.14 - SEMICONDUCTORES**

**Coord.:- Prof. Nelson Studart Filho (UFSão Carlos)**

SEM - 01

APLICAÇÃO DO MÉTODO HONDO-5 A AGLOMERADOS MOLECULARES. Arnaldo Dal Pino Junior, José Silvério Edmundo Germano e Abel Rosato. Departamento de Física do Instituto Tecnológico de Aeronáutica.

Nosso trabalho consiste em testar a utilização do método HONDO-5 para cálculo da estrutura eletrônica de semicondutores. Os semicondutores são tratados segundo o modelo de aglomerado molecular. As ligações da superfície são saturadas por átomos de hidrogênio. Utilizamos aglomerados de 17 átomos em simetria tetraédrica para simular os cristais perfeitos de silício e diamante bem como os defeitos substitucionais de nitrogênio e oxigênio em diamante. Estes cálculos são realizados com diversos conjuntos de base do tipo gaussiana e em cada caso analisado, o desempenho do método é discutido. Os resultados são comparados com outros métodos teóricos de cálculo e também com resultados experimentais.

SEM - 02

#### APLICAÇÕES DO MÉTODO DE ONDAS ESFÉRICAS AUMENTADAS AO ESTUDO DE METAIS E DE SEMICONDUCTORES

O método de ondas esféricas aumentadas (ASW) é um método de cálculo de bandas de primeiros princípios que foi desenvolvido para estudos de coesão em metais. Desde sua publicação tem sido usado para analisar diferentes propriedades de metais e semicondutores. Apresentamos neste trabalho diversas aplicações do método: cálculo de calores de formação de hidretos metálicos, parâmetros de rede de metais e semicondutores, e duas versões de sua aplicação a semicondutores: cálculos de defeitos intersticiais e substitucionais pelos métodos de "clusters" e funções de Green.

SEM - 03

A VALIDADE DO MÉTODO DE AGREGADO PARA CRISTAIS: DEPENDÊNCIA DO TAMANHO DO AGREGADO, Paulo S. Guimarães, INPE - Instituto de Pesquisas Espaciais, C.P. 515, 12200 São José dos Campos, SP.

Pequenos agregados de átomos podem ser usados para descrever propriedades eletrônicas de cristais infinitos como, por exemplo, os estados associados a defeitos profundos em semicondutores. Dentre os métodos de agregado citados na literatura, o método de agregado cristalino tem, como mostraram Guimarães e Ferreira, a vantagem de se poder demonstrar formalmente quais as condições em que o agregado pode ser usado para descrever o cristal e quais as propriedades cristalinas que podem ser descritas por ele. Agora, mesmo estas condições de validade não são suficientes para afirmar quão próximos os resultados obtidos por meio de um agregado estão daqueles que seriam obtidos se em lugar do agregado se pudesse usar o cristal infinito. Por outro lado, seria inviável fazer um estudo mais criterioso da dependência da qualidade dos resultados obtidos com as dimensões do agregado, em vista do tamanho dos agregados, que necessariamente teriam de ser usados. Desse modo, propomos neste trabalho um procedimento simplificado para estudar esta convergência com o tamanho do agregado, o qual é baseado em um cálculo de bandas obtido por meio do método do pseudo-potencial semi-empírico.

SEM - 04

ESTRUTURA ELETRÔNICA DE LIGAS METAESTÁVEIS DE  $(\text{GaAs})_{1-x}\text{Ge}_x$ . Belita Koiller(a);

Mária Augusta Davidovich(a); Roberto Osório(b). (a) Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, (b) Departamento de Física, Universidade de Brasília.

O mínimo pronunciado na curva de energia do gap  $\times$  concentração das ligas do  $(\text{GaAs})_{1-x}\text{Ge}_x$  tem sido interpretado como o efeito de uma transição de fase ordem-desordem em  $x_c=0.3$ , entre a estrutura do sulfato de zinco (própria do GaAs) e a do diamante (própria do Ge). Modelos nesta linha levam a uma boa concordância teórica com resultados experimentais, embora até agora tenham admitido a existência de pares de átomos GaGa e AsAs, na realidade não observados. Neste trabalho levamos em conta a ausência destes pares e incorporamos médias estatísticas de uma maneira melhor que na aproximação de cristal virtual usada anteriormente.

SEM - 05

MÉTODOS NUMÉRICOS DE PROLONGAÇÃO ANALÍTICA NO ESTUDO DE LIGAS AMORFAS SEMICONDUTORAS. S.S. Makler e E.V. Anda (Instituto de Física da Universidade Federal Fluminense, Outeiro de São João Batista s/n, NITERÓI, RJ).

A largura do gap das ligas amorfas semicondutoras pode ser controlada variando a concentração dos seus componentes, permitindo a construção de janelas ópticas e de super-redes amorfas, além de materiais solares econômicos de gap otimizado.

Estes materiais apresentam desordem estrutural e substitucional. Não é possível a aplicação de aproximações de meio efetivo (como CPA) pois o número de coordenação é pequeno. Usamos então um formalismo de renormalização no espaço real para a rede de Bethe que produz resultados notadamente superiores. Este método de cálculo é normalmente demorado para energias próximas às bordas de banda ou picos estreitos. Este problema é resolvido implementando numericamente a prolongação analítica sobre o eixo real do cálculo feito bem acima deste, onde as autoenergias são bem mais comportadas.

Discutimos especificamente o caso do  $\alpha\text{-Si}_{1-x}\text{N}_x\text{H}$ , calculando as densidades de estados localizadas no Si e no N e as configurações de ligações pendentes  $=\text{N}$ ,  $=\text{Si}$ ,  $=\text{N}=\text{Si}$ , para toda a faixa de concentrações. Obtem-se uma boa concordância com os resultados experimentais.

SEM - 06

ESTUDO DE LIGAS SEMICONDUTORAS SOB PRESSÃO. VÓLIA LEMOS, PAULO MO

FISIQUE E JOÃO ROBERTO MORO - Instituto de Física, UNICAMP - 13.100 Campinas, SP.

O comportamento da ligas semicondutoras tipo MF<sub>3</sub>G é descrito em geral em termos de um potencial médio que é a diferença entre  $1-x$   $\times$  os potenciais dos átomos substitucionais na liga. Na teoria de eletronegatividade de Phillips o potencial médio é escrito como a soma de duas contribuições, uma homopolar para o caso de distribuição covalente ideal e outra anti-simétrica para levar em consideração a presença de ionicidade no material. O estudo da dependência da parte anti-simétrica da energia C, com a pressão P, permite obter informação sobre conseqüentes mudanças no caráter iônico. Isto pode ser feito experimentalmente com pequena complexibilidade tecnológica para algumas ligas. O método envolve medidas de dependência do gap fundamental E, com a fração molar x para cada valor de P. A energia do gap tem dependência quadrática com x e o coeficiente do termo não linear é o característico parâmetro de curvatura da liga. Esta pode ser relacionado com C e portanto estudar a dependência de parâmetros de curvatura com pressão é obter informação sobre a variação de C.

J.J.A. Van Vechten and T.K. Bergstresser, Phys. Rev. B1, 3351 (1970)

SEM - 07

## EFEITOS DE INTERFACES ORDEN-DESORDEM EM UMA DIMENSÃO

R. JAINE RAMIREZ IBANEZ

IFGW - UNICAMP e IFQSC-USP

Alguns efeitos associados a presença de uma interface orden-desordem em cadeias caracterizadas por um Hamiltoniano de ligação forte, são estudados através das densidades locais de estados eletrônicos. A região desordenada (desordem diagonal) é resolvida por diagonalização sequencial aproximada (DSA) e a região ordenada via matriz de transferência. Agregados ordenados (imersos em um meio desordenado) são resolvidos por simples diagonalização após o uso de DSA. São analisadas também a relação entre a força da desordem e a concentração de impurezas com a penetração dos efeitos da desordem na região ordenada.

SEM - 08

BANDA DE ESTADOS MOLECULARES DE IMPUREZA EM DUAS E TRÊS DIMENSÕES - E.A. de

Amorim e Silva, I.C. da Cunha Lima e A. Ferreira da Silva, Instituto de Pesquisas Espaciais - INPE, C.P. 515, São José dos Campos, SP.

Calculamos a densidade de estados eletrônicos de um semicondutor dopado com impurezas hidrogênicas. Supomos a formação de "moléculas de H<sub>2</sub>" entre vizinhos próximos com uma distribuição de Poisson para as distâncias interatômicas (R). Obtivemos as auto-energias da molécula de hidrogênio em função de R através do Método Variacional dos Orbitais Moleculares Alternantes (VAMO), também descrito no trabalho. Calculamos então as bandas em duas e três dimensões para concentrações de impurezas dentro da faixa experimental dos sistemas realizáveis e analisamos a influência desses estados nestes sistemas (MOB-2D; SI:P-3D).

SEM - 09

## CÁLCULOS DE BANDAS E IMPUREZAS EM SEMICONDUTORES: O MÉTODO "TIGHT BINDING"

G. Balstar Martins, D. Fernandes de Mello e G. E. Barberis, UNICAMP.

A inclusão de um estado excitado s na base mínima LCAO permite calcular as 10 primeiras bandas dos semicondutores tipo zinblenda, com precisão comparável ao método de pseudopotenciais empíricos. A aplicação do método da função de Green a esta base dá resultados que se ajustam a realidade experimental. Apresentamos estes cálculos para alguns defeitos e as bandas de todos os semicondutores zinblenda. Comparamos os resultados com os de pseudopotencial.

**SEM - 10** BANDAS DE IMPUREZA E DE CONDUÇÃO EM SEMICONDUTORES DOPADOS, Leonel Fernando Perondi, INPE - Instituto de Pesquisas Espaciais, C.P. 515, 12200 São José dos Campos, SP.

É estudado o espectro de auto-energias do Hamiltoniano de um elétron associado a um semicondutor dopado com impurezas rasas. O conjunto de funções-base utilizado é constituído pelas funções de Bloch cujos vetores de onda se situam em torno dos mínimos da banda de condução não-perturbada. O potencial de impurezas é modelado por um potencial Thomas-Fermi. Os efeitos de desordem são tratados através do formalismo de Matsubara-Toyosawa. Os resultados obtidos para a densidade de estados são comparados com os correspondentes resultados obtidos por Serra e Ghazali (Phys. Rev. B28, 4704 (1983)) através de uma técnica de múltiplo-espalhamento. Os resultados obtidos para o calor específico eletrônico a baixas temperaturas e a susceptibilidade de spin a  $T = 0K$  do Si:P são comparados com os respectivos resultados experimentais.

**SEM - 11** BANDA DE IMPUREZAS EM SEMICONDUTORES DOPADOS A CONCENTRAÇÕES INTERMEDIÁRIAS E ALTAS  
WANDA DA CONCEIÇÃO DE OLIVEIRA E ENRIQUE VICTORIANO ANDA  
INSTITUTO DE FÍSICA - UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE

Estuda-se a densidade de estados eletrônicos correspondente a bandas de impurezas em semicondutores dopados.

Sabe-se que a concentrações intermediárias e altas, a não ortogonalidade da base hidrogenoide usada para representar o Hamiltoniano, a desordem não diagonal e diagonal e a blindagem dos potenciais efetivos devido as cargas móveis são efeitos muito importantes.

Tem-se desenvolvido um formalismo que permite determinar a influência destes efeitos e a hibridação dos níveis de impurezas com a banda de condução sobre as propriedades eletrônicas deste sistema.

**SEM - 12** BANDAS DE IMPUREZAS EM SEMICONDUTORES DOPADOS  
F.A.M.Cezar e E.V.Andá, UFF

Calcula-se a densidade de estado para bandas de impurezas em semicondutores dopados. Descrevemos o sistema por um formalismo que inclui tanto correlação eletrônica local como não local. O Hamiltoniano será representado numa base "Tight Binding" composta de 4 estados por sítio. No novo formalismo usamos os operadores criação e destruição de impurezas (CAOI)<sup>1</sup>. O uso desses operadores permite a inclusão simultânea da correlação eletrônica local e não local, é como uma descrição do alargamento da banda  $D^-$  devido a relaxação do raio de Bohr efetivo devido a repulsão coulombiana. O método usado é o da função de Green. A desordem é tratada supondo uma distribuição gaussiana<sup>2</sup> para os elementos da matriz não diagonal.

Referências :

- 1 - M. E. Foglio, Phys. Stat. Sol. (6) 85, 439 (1976)
- 2 - B. Makler and E. V. Andá, J. Phy. C: Solid State Phys. 16 457 (1983)

**SEM - 13** IMPUREZAS DE METAIS DE TRANSIÇÃO 3d EM SEMICONDUTORES. M.J. Caldas (Instituto de Física - UNICAMP), M. Makiuchi (Departamento de Física - UnB) e A. Fazzio (Instituto de Física USP).

Estudamos o comportamento de impurezas da série 3d-III, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt e Au - GaAs, utilizando modelos de aglomerados moleculares. Os cálculos foram realizados, na aproximação de uma partícula, incluindo efeitos relativísticos para os estados de caroço (massa-velocidade, Darwin, spin-órbita). Para os estados de valência a correção spin-órbita entra como perturbação. Os cálculos são feitos na aproximação de densidade local, e assim incluímos a correção de Zunger-Perdew de auto-interação. Para análise dos resultados incluímos efeitos de múltiplos através do método de Fazzio, Caldas e Zunger, embora os resultados experimentais sejam escassos. O "comportamento de série" é comparado ao dos metais 3d, e sugerimos que existem diferenças, e muito provavelmente os metais 3d se apresentam em regime de baixo spin.

**SEM - 14**

#### TRANSIÇÕES INDIRETAS EM SEMICONDUTORES

M. N. NAZARENO E MARCO A. AMATO

Departamento de Física - Universidade de Brasília - 70910 - Brasília - DF

No presente trabalho investigamos a influência da interação elétron-fonon em materiais semicondutores. Analisando o espectro de absorção próximo ao limiar, as frequências dos modos de vibração da rede envolvidos no processo de transição indireta podem ser obtidas. Finalmente apresenta-se uma expressão para o tempo de vida dos estados eletrônicos associados a tais processos.

**SEM - 15**

**MECANISMOS DE DIFUSÃO EM SEMICONDUTORES.** Euzi C.F. Silva, Arnaldo Dal Pino Jr., Maria D.F.M. Santos e J.R. Leite (Instituto de Física da Universidade de São Paulo) (\*ITA)

Nosso interesse é o estudo de mecanismos de autodifusão e de difusão de impurezas em semicondutores. Particularmente estamos realizando esses estudos para o Si.

Verifica-se experimentalmente que o coeficiente de autodifusão D para o Si segue uma relação do tipo Arrhenius.

$$D = C \left( \frac{S_P \cdot S_M}{K} \right) \exp \left( -\frac{E_P + E_M}{KT} \right)$$

onde C é uma constante,  $E_M$  e  $E_P$  são as energias de migração e formação de um determinado tipo de defeito na rede e  $S_P$  e  $S_M$  são respectivamente a entropia de formação e migração do defeito.

Portanto, para o estudo da difusão precisamos conhecer as funções termodinâmicas citadas. Para a resolução deste problema, estamos assumindo um modelo segundo o qual os átomos estão ligados aos seus vizinhos por molas (modelo de 2 parâmetros). Resolvendo-se a equação dinâmica da rede obtemos o espectro de fônons do cristal que nos permite calcular a função de Green ( $G^0$ ) do cristal perfeito. Em seguida colocamos o átomo de silício em uma posição que pode ser intersticial tetraédrica, hexagonal, etc. e calculamos a matriz de perturbação  $\delta L$ . Com as matrizes  $\delta L$  e  $G^0$  obtemos a função de Green do cristal com defeito, G.

Conhecendo-se  $G^0$  e G, obtemos facilmente a variação na densidade de estados no cristal devido ao defeito ( $\delta N(\omega^2)$ ) e com isto temos acesso às funções termodinâmicas procuradas, particularmente a entropia.

Até o presente momento já obtivemos as entropias de formação dos seguintes defeitos: vacância, interstício tetraédrico e split-interstício em silício. (VAPESP)

**SEM - 16** PROPRIEDADES DE TRANSPORTE DOS SEMICONDUTORES  $Cd_x Mn_{1-x} Se$  (PARA  $x = 0,01 ; 0,05 ; 0,10$ ) E PARA CONCENTRAÇÃO DE PORTADORES NAS VIZINHANÇAS DA TRANSIÇÃO METAL-ISOLANTE. Nei F. Oliveira Jr e Y. Shapira, IFUSP e MIT

As propriedades de transportes dos semicondutores acima pode ser drasticamente afetada por um campo magnético. Em particular, um grande pico de magnetoresistência positiva é observado em temperaturas do He líquido. Este pico ocorre para campos magnéticos da ordem de 1T. Para campos bem mais altos esta magnetoresistência pode se tornar negativa. As interpretações teóricas deste comportamento ainda não são definitivas.

**SEM - 17**

PROPRIEDADES ELÉTRICAS E DE TRANSPORTE EM SEMICONDUTORES COMPENSADOS.

DAISY MARIA LUZ E ENRIQUE VICTORIANO ANDA  
INSTITUTO DE FÍSICA - UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE

Neste trabalho estudam-se as propriedades eletrônicas e de transporte, em semicondutores dopados e compensados. Utilizando o formalismo das funções de Green, calcula-se a densidade de estados da banda de impurezas e a posição do nível de Fermi em função da concentração dos portadores e do grau de compensação. As energias de atividade para o transporte eletrônico  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$ , são calculadas e ajustam-se satisfatoriamente aos resultados experimentais.

**SEM - 18**

EFEITO DE CAMPOS MAGNÉTICOS PARALELOS A POÇOS QUÂNTICOS SOBRE AS BANDAS DE VALÊNCIA E CONDUÇÃO EM HETERO-ESTRUTURAS DE  $GaAs-AlGaAs$ . Cláudia M.G. Oliveira, Vivili M.S. Gomes, A.S. Chaves, J.R. Leite (Instituto de Física da Universidade de São Paulo) e J.W. Worlock ("Bell Communications Research-USA") (Departamento de Física da Universidade Federal de Minas Gerais).

As alterações nos estados quânticos de elétrons e buracos sob o efeito de campos magnéticos planares são investigadas em dois tipos de poços quânticos, em hetero-estruturas de  $GaAs-AlGaAs$ : (1) poço com fundo triangular e densidade eletrônica nula; (2) poço retangular com densidades eletrônicas,  $N_s$ , da ordem de  $10^{11} \text{ cm}^{-2}$ . Neste último caso, a interação Coulombiana entre os elétrons gera uma curvatura do fundo do poço que pode ser obtida pela solução auto-consistente das equações de Schrödinger e Poisson. Em ambos os casos o campo magnético afeta drasticamente as dispersões de energia  $\epsilon_e(k)$  e  $\epsilon_h(k)$  do elétron e do buraco, respectivamente, para o vetor de onda na direção planar, perpendicular ao campo. O gap de energia se torna indireto. Além disso, se o poço quântico não tem forma simétrica, as dispersões também se tornam assimétricas, ou seja,  $\epsilon_e(k) \neq \epsilon_e(-k)$  e  $\epsilon_h(k) \neq \epsilon_h(-k)$ . A importância e o interesse desses fenômenos são discutidos. São também investigados os efeitos do campo sobre a distribuição de carga dentro do poço, assim como sobre a energia de Fermi, para o caso  $N_s = D$ . (CAPES/FAPESP)

**SEM - 19** **CÁLCULOS AUTOCONSISTENTES DA DENSIDADE BIDDIMENSIONAL DE ELÉTRONS EM SUPER-REDES COM DOPAGEM.** Viviani M.S. Gomes, Alair S. Chaves, José Roberto Leite (Instituto de Física da Universidade de São Paulo) e John M. Worlock ("Bell Communications Research, Inc. USA") ("Departamento de Física da Universidade Federal de Minas Gerais)

Neste trabalho apresentamos cálculos da densidade bidimensional de elétrons ( $N_2$ ) confinados em poços quânticos em super-redes de  $GaAs-Al_xGa_{1-x}As$  com dopagem. Os valores de  $N_2$  são obtidos como função da largura do poço quântico, do espaçamento não dopado e da concentração  $x$  de alumínio. Os cálculos, feitos para o caso de super-rede com dopagem simétrica e assimétrica (esta última com  $x=0,25$ ), baseiam-se na solução numérica autoconsistente das equações de Schrödinger e Poisson para o sistema à temperatura 0K. Efeitos de exchange e correlação eletrônica não são considerados. Os valores calculados para  $N_2$  são comparados com resultados experimentais encontrados na literatura e em quase todos os casos a coincidência é muito boa. Nossos resultados, além disso, permitem previsões a respeito do efeito da fotocondutividade persistente observado nestes materiais. (FAPESP).

**SEM - 20** **CORRELAÇÕES DE ELÉTRONS EM POÇO QUÂNTICO DE SEMICONDUTORES -** Umbelino de Freitas, Departamento de Física e Ciências dos Materiais, IFQSC/USP e Departamento de Física, UFPB, Álvaro de Almeida Caparica e Nelson Studart Filho, Departamento de Física, UFSCar.

As propriedades estáticas e o espectro de excitação do gás de elétrons bidimensional confinado em um poço quântico isolado de semicondutores do tipo GaAs-AlGaAs são determinadas dentro de várias teorias de muitos corpos: aproximação das fases aleatórias (RPA), Hubbard e método do campo auto-consistente com correções de campo local.

**SEM - 21** **CÁLCULO DE SUB-BANDAS DE BURACOS EM SISTEMA DE POÇOS QUÂNTICOS**

Paulo Daniel Emmel e Gilmar Eugênio Marques, Universidade Federal de São Carlos

A banda de valência para compostos semicondutores do tipo Zinc-blende é decomposta, devido ao forte acoplamento spin-órbita, em três ramos: o de buracos leves, o de buracos pesados e o split-off. Em  $k=0$ , observa-se uma degenerescência entre os ramos de buracos leves e pesados. Para  $k \neq 0$  estes ramos apresentam anisotropia e não parabolicidade.

Em virtude do ramo split-off estar bem afastado dos demais, expandimos as funções de onda em termos das auto-funções dos buracos leves e pesados, utilizando a Hamiltoniana do tipo Luttinger. Através desta técnica são calculadas as sub-bandas de valência para sistemas de poços quânticos formados pelos semicondutores Ga(Al)As e GaAs.

SEM - 22

ENERGIAS DO ESTADO FUNDAMENTAL DO LÍQUIDO QUÂNTICO DE ELETRONS NO EFEITO HALL QUANTIZADO - Abraham M. Cohen, Depto. de Física e Ciência dos Materiais, IFQSC/USP e Depto. de Física, Univ. Fed. Amazonas e Nelson Studart, Depto. de Física, Univ. Federal de São Carlos.

Neste trabalho, exploramos a conexão entre o sistema quântico de elétrons bidimensional sob forte campo magnético (Efeito Hall Quantizado) e o plasma clássico Coulombiano bidimensional (2DOCP). A energia por elétron do estado fundamental do sistema quântico está relacionada com a função correlação dos pares do 2DOCP. Usando a teoria do campo autoconsistente para o 2DOCP, cujas equações integrais são resolvidas exatamente neste modelo, determinamos a energia do estado Hall para vários estados do fluido quântico.

(com apoio do CNPq e CAPES)

SEM - 23

POLARON LIGADO EM POÇOS QUÂNTICOS DE GaAs-GaAlAs. Marcos H. Degeni e Oscar Hipólito. Departamento de Física e Ciência dos Materiais do Instituto de Física e Química de São Carlos de Universidade de São Paulo.

Estudamos os efeitos da interação elétron-fonon no estado ligado de uma impureza hidrogênica em poços quânticos de GaAs-GaAlAs contendo portadoras livres, em função da densidade eletrônica para diferentes valores da espessura do poço. Os efeitos de blindagem tanto no potencial da impureza quanto na interação elétron-fonon são descritos na aproximação RPA.

SEM - 24

POLARONS RESSONANTES EM HETEROSTRUTURA DE GaAs-GaAlAs. Marcos H. Degeni e Oscar Hipólito. Departamento de Física e Ciência dos Materiais do Instituto de Física e Química de São Carlos de Universidade de São Paulo.

A massa efetiva de polarons ressonantes relativos à interação de elétrons na banda de GaAs com os fonons óticos na presença de um campo magnético é calculada e comparada com os recentes resultados experimentais em ressonância ciclotrônica em heteroestrutura de GaAs-GaAlAs. A não parabolicidade da banda de condução bem como os efeitos de blindagem da interação polar são levados em consideração nos cálculos. Nossos resultados concordam muito bem com as medidas experimentais.

SEM - 25

ESTADOS EVANESCENTES EM HETEROJUNÇÃO DE SEMICONDUTORES SEMIMAGNÉTICOS. Valmir A. Chitta, Instituto de Física e Química de São Carlos - USP e Gilmar E. Marques, Universidade Federal de São Carlos.

Estados evanescentes interfaciais podem existir em heterojunções de semicondutores semimagnéticos, desde que a estrutura eletrônica destes semicondutores sofra uma inversão na posição das bandas de elétrons e buracos. Em materiais do tipo Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te, Cd<sub>1-x</sub>Mn<sub>x</sub>Te, Hg<sub>1-x</sub>Mn<sub>x</sub>Te, etc. variando-se a concentração dos ions, estas inversões ocorrem devido ao aumento da energia de spin-órbita. Pretendemos discutir a existência destes estados evanescentes em heterojunções com interface abrupta ("step") e em heterojunções onde a interface varia suavemente ("grading"), usando para isto a Hamiltoniana 6x6 do tipo Kane, para descrever as bandas  $\Gamma_6$  e  $\Gamma_8$  dos compostos semicondutores na aproximação de massa-efetiva.

SEM - 26

PLASMON LOCALIZADO EM GÁS BIDIMENSIONAL DE ELÉTRONS. Jayme de Luca e Liderio Ioratti, Departamento de Física e Ciência dos Materiais do Instituto de Física e Química de São Carlos da Universidade de São Paulo. Recentemente foi produzido por técnica de fotolitografia um gás de elétrons com densidade eletrônica modulada ao longo de faixas. Estudamos a existência de plasmon localizado no gás modulado. (1) Phys.Rev.Lett. 53, 1485 (1984).

SEM - 27

ESTRUTURA ELETRÔNICA DE POÇOS QUÂNTICOS MÚLTIPLOS NA PRESENÇA DE CAMPO ELÉTRICO FORTE - Luiz A. Cury, Depto. de Física e Ciência dos Materiais, IFQSC/USP e Nelson Studart, Depto. de Física, Univ. Fed. de São Carlos. Neste trabalho calculamos o espectro de energia de elétrons e buracos em poços quânticos múltiplos de semicondutores do tipo GaAs-AlGaAs na presença de um campo elétrico externo, como função do número N de poços, largura do poço e concentração de alumínio. As ressonâncias de tunelamento (sua posição e largura) são determinadas por métodos usuais de matriz transferencial. Para N=1, são reproduzidos facilmente os resultados da literatura. (Apoio da FAPESP).

SEM - 28

ESPALHAMENTO DE LUZ EM SUPER-REDES SEMICONDUTORAS. FERNANDOCERDEIRA, Instituto de Física - UNICAMP

A evolução de técnicas como MBE (molecular beam epitaxy) para o crescimento de camadas epitaxiais monocristalinas ultra delgadas, permite acesso a um novo regime de efeitos quânticos em heteroestruturas semicondutoras de dimensões atômicas. O confinamento dos portadores em poços de potencial múltiplos (MQW) trazem à luz efeitos novos provocados pela redução na dimensionalidade. O efeito Raman ressonante tem se mostrado como uma técnica muito versátil no estudo dos estados eletrônicos e outras propriedades destas super-redes. Farei um resumo dos resultados existentes para super-redes de GaAs/AlGaAs, assim como mostrarei resultados obtidos por nós em novas super-redes de camadas tensionadas.

SEM - 29

SISTEMA DE CRESCIMENTO EPITAXIAL EM VÁCUO POR DEPOSIÇÃO DE VAPOR DE ORGANOMETÁLICO (MOCVD) - Mauro M.G. de Carvalho, Ciclânio L. Barreto e Kimie M. Ito. O Sistema de Crescimento Epitaxial em Vácuo por MOCVD apresenta algumas vantagens importantes sobre os sistemas convencionais de MOCVD e MBE. Além disso, é pouco explorado e, portanto, de limitações desconhecidas. Nesta comunicação apresentaremos o sistema de MOCVD em vácuo que montamos no Laboratório de Pesquisas em Dispositivos (LPD) da Unicamp, comparando-o com sistemas convencionais, e exporemos o programa de crescimentos de semicondutores III-V que está sendo implementado.

SEM - 30

ONDAS DE SPIN EM UMA SUPER-REDE MAGNÉTICA

E.L. Albuquerque\*, F. Fulco\* e E.F. Sarmiento\*\*

\* Departamento de Física, UFRN, 59.000 - Natal - RN

\*\* Departamento de Física, UFAL, 57.000 - Maceió - AL

Consideramos uma super-rede formada por camadas alternadas de dois materiais ferromagnéticos com simetria cúbica cujas interfaces são planos (001). O nosso modelo teórico consiste em considerarmos uma Hamiltoniana tipo Heisenberg para descrever o sistema. As equações de movimento para as ondas de spin de volume em cada camada é calculada dentro da aproximação RFA ("Random-Phase Approximation"). A relação de dispersão para as ondas de spin que se propagam em uma direção qualquer da super-rede é derivada utilizando-se o método da matriz transferência. O resultado é ilustrado numericamente e as curvas encontradas mostram uma grande analogia com as curvas de dispersão de fônons em uma super-rede diatômica.

SEM - 31

TRANSPORTE ANISOTRÓPICO EM CANADAS DE INVERSÃO DE TRANSISTORES MOS,

J.B.V.

Sallas Filho, J.R.S. Senna, H. Closs, Instituto de Pesquisas Espaciais - INPE, C.P. 515, 12200 São José dos Campos, SP.

Os efeitos de anisotropia cristalográfica nas propriedades de transporte eletrônico em Mosfets de Si são investigados experimental e teoricamente. As medidas experimentais abrangem o intervalo completo de concentração eletrônica na camada de inversão e incluem a dependência com temperatura a partir de 1.2K. Os resultados, ainda parciais, são indicativos de dependência do potencial espa-lhador devido à rugosidade da interface Si-SiO<sub>2</sub>, com a orientação cristalográfica do substrato. Efeitos dos chamados "minigaps" são considerados, dada sua forte influência sobre a mobilidade ele-trônica. Em particular, tais efeitos foram observados pela primeira vez na região de alta concen-tração eletrônica, bem como a ocorrência de ativação térmica da condutividade associada com a pre-sença do minigap.

SEM - 32

METALIZAÇÃO DE ALUMÍNIO, C.M.Arcaro, A.P.Mazzana, E.S.Braga, S.Kobayashi, P.J.

Tatech, L.A.Castelo de Almeida e R.L.Anderson<sup>\*\*\*</sup>, FEC/UNICAMP.

Estamos estudando a técnica de evaporação por canhão de elétrons para a obtenção de filmes finos de alumínio visando aplicações em dispositivos MOS (Capacitores e Transistores), em contatos para dis-positivos e circuitos integrados convencionais e que empreguem dióxido de estanho (SnO<sub>2</sub>).

Para tanto estamos fazendo as deposições em diferentes condições da deposição (temperatura do sub-strato, distância da fonte substrato e taxa de deposição) e caracterizando os filmes física e eletri-camente quanto a espessura, resistividade, resistência de contato, uniformidade e propriedades cris-talográficas.

Para o estudo da interface SiO<sub>2</sub>/Si construímos estruturas de teste (capacitores), para determinação de cargas fixas e móveis e de efeitos de radiação da linha Kn do alumínio produzido durante a evapo-ração.

<sup>\*\*\*</sup> Em Convênio com a University of Vermont, USA/FEC, UNICAMP, através do NSF/CNPq.

SEM - 33

"UMA TECNOLOGIA DE CIRCUITOS INTEGRADOS COM DIÓXIDO DE ESTANHO", C.I.Z.Mazzana\*

E.S.Braga, A.P.Mazzana, C.P. de Souza<sup>\*\*</sup>, S.Kobayashi, P.J. Tatech e R.L.Anderson<sup>\*\*\*</sup>, DEE/FEC/UNICAMP

Estamos investigando uma nova técnica de obtenção de dispositivos de efeito de campo empregando o dióxido de estanho (SnO<sub>2</sub>) em lugar do alumínio ou do polissilício na confecção dos eletrodos, em particular do eletrodo de porta. O óxido isolante de porta, do qual se suspeita tratar-se de dióxi-do de Silício (SiO<sub>2</sub>), é auto-crescido durante os processos de deposição e recocimento do SnO<sub>2</sub>, em baixas temperaturas, podendo ter espessuras muito finas, de dezenas de nanômetros. Utilizando pro-cessos convencionais da tecnologia MOS, estão sendo construídos capacitores e transistores, sendo que os eletrodos de SnO<sub>2</sub>, com espessuras da ordem de centenas de nanômetros, estão sendo deposita-dos pela técnica de decomposição de vapores, segundo a reação: SnCl<sub>4</sub> + 2H<sub>2</sub>O + SnO<sub>2</sub> + 4HCl. A tempe-raturas da ordem de 350°C. Resultados preliminares obtidos em capacitores de SnO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub>/Si mostra-ram que as densidades de cargas fixas (N<sub>f</sub>), móveis (N<sub>m</sub>) e capturadas (N<sub>it</sub>) na interface SiO<sub>2</sub>/Si es-tão na ordem dos valores obtidos no estado da arte para as tecnologias de metal e de polissilício. Para os transistores, os resultados para o ganho de corrente, a tensão de limiar e a transcondutân-cia são comparáveis aos valores referidos na literatura para a tecnologia de porta metálica e de polissilício. A elevada transmissância dos filmes de SnO<sub>2</sub>, as baixas temperaturas de processamento e as espessuras extremamente finas do óxido de porta crescidos seletivamente, além da possibilidade já demonstrada de se construir o porta auto-alinhado, indicam que os dispositivos MOS com SnO<sub>2</sub> são altamente promissores principalmente para aplicações em conversores de imagem.

\* Também do IM/CTI.

\*\* Atualmente na Faculdade de Engenharia/Universidade Federal do Ceará.

<sup>\*\*\*</sup> Em Convênio com a University of Vermont, USA/FEC, UNICAMP, através do NSF/CNPq.

SEM - 34

**PREPARAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE FILMES FINOS DE CdS e CdSe. José Francisco Julião** - (Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza-CE).

Filmes finos de sulfeto de Cádmio e de Seleneto de Cádmio foram preparados sobre Ti por eletrodeposição e caracterizados por estudos fotoeletroquímicos. A preparação dos banhos de deposição, em ambos os casos, seguiu especificações da literatura. Os filmes mais aderentes foram preparados à temperatura ambiente. Os filmes apresentaram condutividade tipo-n, quando tratados termicamente a 300°C numa atmosfera de Argônio, e mostraram propriedades fotoativas no intervalo correspondente ao espectro visível da luz.

Auxílio Financeiro: FINEC e CNPq

SEM - 35

**CONDUTIBILIDADE DE MOLIBDENITA NATURAL E SUA COLAGEM E FORMAÇÃO DE CONTATO ÔNICO SOBRE SUBSTRATOS METÁLICOS. Homero Lenz Cesar** (Departamento de Física-UFC).

Para a impossibilidade de conseguir monocristais de molibdenita natural com dimensões apropriadas para utilização como fotoanodos semicondutores em pilhas solares fotoeletroquímicas apelamos para a solução alternativa de empregar a colagem de diversas lâminas de molibdenita ( $\text{MoS}_2$ ) sobre um substrato metálico. O êxito da montagem depende da aderência apropriada entre as interfaces molibdenita-cola e cola-substrato; da cola não se desapegar pela ação da luz solar ou pela solução eletrolítica da pilha e da formação de contato ônico através das interfaces molibdenita-cola-substrato. O conhecimento da condutibilidade da molibdenita natural utilizada é essencial para avaliar o desempenho da pilha.

Auxílio Financeiro: FINEC, CNPq.

SEM - 36

**ESTUDOS SOBRE A ACUMULAÇÃO DE OXIGÊNIO NO SILICETO DE PALÁDIO FORMADO NA INTERFACIA Pd/a-Si**

**Carlos Achete**

COPPE/UFBRJ - Programa de Metalurgia - CX 66.505

É estudado neste trabalho o efeito da incorporação do oxigênio no siliceto de paládio, formado na interface de filmes finos de paládio depositados sobre silício amorfo. Perfis de composição em profundidade tomados com a espectroscopia de elétrons Auger, em células solares do tipo Schottky, indicam que, depois de 1 ano expostas ao ar, ocorre uma forte difusão de oxigênio para a interface Pd/a-Si. Esta difusão de oxigênio é provavelmente a responsável pela degradação do contato Schottky observada nestas células. Para se entender o efeito do oxigênio na formação e/ou degradação do  $\text{Pd}_2\text{Si}$  estão sendo tomados perfis de profundidade, de amostras tratadas sob vácuo.

SEM - 37

PROCESSOS DE CORROSÃO DE FILMES FINOS DE  $\text{SnO}_2$  POR PLASMA E POR ION REATIVO. E. S. Braga, P.J. Tatsch, A.P. Mammana e C.I.Z. Mammana, FEC/UNICAMP.

Este trabalho visa o estudo físico-químico dos processos de corrosão de filmes finos de  $\text{SnO}_2$  por plasma e por ion reativo, objetivando a confecção de dispositivos semicondutores, circuitos integrados e visores de cristal líquido. Para tanto foi construída uma câmara onde são processadas as reações dos íons obtidos por descarga de uma fonte de RF. A corrosão está sendo estudada no que concerne à anisotropia do processo e à determinação do ponto final de ataque, através de técnicas ópticas. A velocidade de corrosão está sendo estudada em função da pressão dos gases reagentes, da potência de RF aplicada e da composição da mistura de gases tais como tetracloreto de carbono, triclorostilano, oxigênio e nitrogênio. O diagnóstico do processo vem sendo efetuado com base nos resultados obtidos por espectroscopia óptica.

SEM - 38

CÉLULAS FOTOELETRQUÍMICAS DE  $\text{CdSe}_x\text{Te}_{1-x}$  POLICRISTALINO.

Paulo Motisuke, M. José S.P. Brasil, João R. Moro e Franco Oecker.

Instituto de Física, UNICAMP, Caixa Postal 6165, 13.100 Campinas, SP.

O projeto de desenvolvimento de células fotoeletroquímicas de filmes policristalinos de  $\text{CdSe}_x\text{Te}_{1-x}$  na UNICAMP teve início em meados de 1984. Este dispositivo consiste de um fotoeletrodo (filme de  $\text{CdSe}_x\text{Te}_{1-x}$  depositado sobre substrato de Ti) e um contra-eletrodo (filme de CoS depositado sobre substrato de aço inox) mergulhados num eletrólito (solução contendo íons polisulfatos). Todos os componentes são fabricados com materiais comerciais de pureza P.A. (para análise) e isto faz com que o dispositivo seja extremamente barato. Cada etapa da fabricação é acompanhada de análise e caracterização do material para poder objetivar um melhor entendimento e uma otimização do desempenho do dispositivo. São feitos também os testes de durabilidade simulado e em condições reais de campo. As causas de deterioração são analisadas e dentro das possibilidades re-alimentadas nos processos de fabricação. Será dada uma breve descrição da situação atual do projeto e dos resultados obtidos.

SEM - 39

CARACTERIZAÇÃO DE FILMES POLICRISTALINOS DE CdSe. M.J.S.P. Brasil, P. Motisuke e J. R. Moro. Instituto de Física, UNICAMP, Caixa Postal 6165, 13.100 Campinas, SP.

Filmes policristalinos de CdSe depositados sobre substratos de Ti representam um eletrodo promissor na fabricação de células solares fotoeletroquímicas. Realizando um estudo sistemático para caracterização destes filmes analisando 40 amostras, divididas em 4 séries de 10 amostras eletrodepositadas simultaneamente num único banho e submetidas a um tratamento térmico a 10 diferentes temperaturas (350, 400, ... 800°C). Foram feitas medidas de fotoluminescência a 300,77 e 2 K, curvas de fotocorrente x fotovoltagem, respostas espectrais e análise da morfologia por microscopia eletrônica (SEM). A interpretação dos dados obtidos foi direcionada numa tentativa de correlacionar a eficiência da célula solar com as características do filme de CdSe a fim de encontrar os melhores parâmetros dos processos de fabricação do dispositivo.

SEM - 40

FABRICAÇÃO DE DETETORES FOTOVOLTAICOS DE  $PbSnTe$  UTILIZANDO A TÉCNICA DE EPITAXIA A PARTIR DA FASE LÍQUIDA - LPE, Sukarno O. Ferreira, Eduardo Abramof, Marcos D. da Silva, Iracema N. Bandeira, Instituto de Pesquisas Espaciais - INPE, C.P. 515, 12200 São José dos Campos, SP.

O trabalho compreende todos os passos da fabricação dos detetores fotovoltaicos de  $PbSnTe$ , desde o crescimento, corte, orientação e polimento do monocristal; crescimento da junção PN pela técnica LPE; montagem dos diodos (corte, soldagem dos contatos e refrigeração) até a caracterização do diodo positivo: curva "V x I", detectividade, responsividade, resposta espectral e tempo de resposta. É feito um estudo sobre a confiabilidade e reprodutibilidade do processo de fabricação e uma tentativa de estimar o tempo de vida dos diodos.

SEM - 41

ESTUDO DO CARBETO DE SILÍCIO AMORFO APLICADO A CÉLULAS SOLARES TIPO P-I-N. Angelo Luis Gobbi e Fernando Alvarez. Instituto de Física, UNICAMP.

O objetivo deste trabalho é apresentar resultados em andamento referentes a fabricação e caracterização de células solares de silício amorfo hidrogenado ( $a-Si:H$ ). As estruturas são construídas sobre vidro coberto com óxido semiconductor transparente ITO (Indium-Tin-Oxide,  $R = 10 \Omega/\square$ ). Sobre este substrato foram depositados sucessivamente filmes de carreto de silício amorfo hidrogenado ( $a-SiC_x:H$ ), dopados com boro (tipo p), intrínsecos ( $a-Si:H$ ), e silício amorfo hidrogenado dopado com fósforo (tipo n). O contato traseiro é obtido pela evaporação de alumínio ( $\sim 2000 \text{ \AA}$ ).

Com o objetivo de otimizar a camada "janela", filmes de  $a-SiC_x:H$  foram estudados sob diversas condições de deposição. Os parâmetros variados foram: temperatura e polarização do substrato, concentração de metano e potência da RF dissipada no plasma. Seus efeitos sobre o material são analisados óptica e eletricamente.

SEM - 42

CARACTERIZAÇÃO DE FILMES FINOS DE MATERIAIS AMORFOS HIDROGENADOS. J.H. Dias da Silva, M. Pereira Cantão e J. I. Cisneros. Instituto de Física, UNICAMP, Caixa Postal 6165, 13.100 Campinas, SP.

Dentro as atividades do Laboratório de Conversão Fotovoltáica do Departamento de Física Aplicada do IFGW, estamos desenvolvendo os seguintes trabalhos:

Estudo de espectroscopia óptica de filmes finos de compostos semicondutores amorfos hidrogenados preparados pelos métodos de "sputtering" e "glow discharge" visando: a) na região do "absorption edge", determinação do índice de refração, coeficiente de absorção e "gap" óptico; b) na região do infra-vermelho médio, procuramos calcular bandas de absorção do tipo vibracional visando obter informação sobre estrutura local dos materiais amorfos estudados e eventualmente determinar concentração de alguns elementos como hidrogênio ou nitrogênio.

Estamos ainda construindo dois equipamentos destinados aos seguintes trabalhos: no primeiro estudaremos o conteúdo de hidrogênio em materiais amorfos hidrogenados e a taxa de evolução em função da temperatura, na procura de informações sobre o tipo de ligação do hidrogênio na rede; no segundo aparelho serão preparados filmes de materiais especiais de interesse na fabricação de células solares de materiais amorfos, tais materiais poderão ser usados em contatos elétricos e camadas antirrefletoras.

SEM - 43

PROJETO CÉLULAS SOLARES/INPE - ATIVIDADES PARA O BIÊNIO 86/87 - Paulo Mabile, Instituto de Pesquisas Espaciais, Caixa Postal 515, CEP 12200, São José dos Campos, SP.

O projeto Células Solares do Instituto de Pesquisas Espaciais tem a missão de pesquisar os aspectos físicos e tecnológicos das células solares de qualificação espacial, aquelas projetadas para utilização em condições de massa atmosférica nula (AM0) com a máxima eficiência possível e a menor degradação por efeitos térmicos e de radiação. Nesta comunicação são apresentadas as principais atividades do projeto para o biênio 86/87 na parte experimental (caracterização e fabricação de células solares) e na parte de estudos teóricos.

SEM - 44

#### ESPALHAMENTO DE LUZ EM MATERIAIS SEMOCONDUTORES

MARCO A. ANATO E F. A. DE OLIVEIRA

Departamento de Física - Universidade de Brasília - 70910 Brasília DF.

No presente trabalho calcula-se a seção de choque de espalhamento por centros de impureza em materiais semicondutores. Um estudo comparativo entre alguns modelos que descrevam tais centros é realizado.

SEM - 45

ASSISTÊNCIA DE MULTIFONONS NA FOTOEXCITAÇÃO DE BURACOS EM GaAs:O  
Waltair Vieira Machado - Dept. de Física/ICR/UA

Temos observado uma população de buracos em GaAs:O, localizados a 0.48eV acima da banda de valência. Tal população é metaestavelmente gerada por excitação fotônica, com energias distribuídas no intervalo 1.20eV a 1.80eV, sendo que a máxima eficiência ocorre em torno da energia do "band gap", i.e., 1.50eV. O espectro de fotoexcitação desta população de buracos exibe uma estrutura de picos razoavelmente espaçadas assemelhando-se a um fenômeno de assistência de réplicas de fonons em torno de alguns níveis pilotos. Há bons indícios de que os buracos são razoavelmente acoplados com a rede cujo fator de acoplamento é  $S=3$ . Nossos resultados mostram ainda evidência de que o nível 0.48eV possui uma estrutura de relativa eletro afinidade, apresentada uma barreira de potencial de 0.07eV associada a recaptura de elétrons no centro 0.48eV.

SEM - 46

ESPECTROSCOPIA FOTOACÚSTICA A BAIXAS TEMPERATURAS PARA O ESTUDO DE PROPRIEDADES

ÓPTICAS, TÉRMICAS E CAMADAS EPITAXIAIS DE SEMICONDUTORES III - V. Alba Rosa Lôpes Parada (UNICAMP), José Carlos Valladão de Mattos (UNICAMP). - A espectroscopia fotoacústica é usada para pesquisa e análise de materiais nas áreas de Física, Química, Biologia e Medicina, permitindo estudar propriedades de materiais gasosos, sólidos, líquidos e amorfos, opacos ou transparentes. À baixas temperaturas este método permite a caracterização de semicondutores do grupo III-V mediante estudo da absorção óptica por materiais formando estruturas epitaxiais. Desenvolvendo um método de controle não destrutivo da difusão de impurezas em função da profundidade da camada utilizada (Semicondutores Dopados), permitindo também o estudo de impurezas residuais devido ao crescimento das camadas epitaxiais e do próprio cristal. Este método possibilita o estudo das propriedades ópticas dos materiais medindo-se o coeficiente de absorção óptica e o estudo das propriedades térmicas medindo os seus parâmetros térmicos como o calor específico, condutividade térmica e difusividade térmica, podendo estudar também transições de fase em cristais dependentes da temperatura.

SEM - 47

PROPRIEDADES VIBRACIONAIS DO  $\alpha\text{-Ge}_{1-x}\text{N}_x$ . F.C. Marques; P.A.B. Schulz

J.A. Sanjurjo e I.E. Chamboleyron. Instituto de Física "Gleb Wataghin" - UNICAMP.

Nesse trabalho estudamos o espectro vibracional de  $\alpha\text{-Ge}_{1-x}\text{N}_x$ , produzido por sputtering, por meio de espalhamento Raman. Os espectros Raman reduzidos são comparados com densidades locais de modos vibracionais, obtidas em cálculos baseados na aproximação da rede de Bethe. Com essa análise é possível explicar qualitativamente algumas das propriedades vibracionais do germânio amorfo nitrogenado.

SEM - 48

"FOTOLUMINESCÊNCIA EM COMPOSTOS III-V". Mario Tozi Furtado - CPqD-Telebrás.

Serão apresentadas medidas de fotoluminescência realizadas em estruturas de multicamadas epitaxiais de compostos III-V, normalmente empregadas na fabricação de dispositivos optoeletrônicos, com vistas à aplicação em comunicações óticas. Em particular, apresenta-se um estudo da banda de emissão em 1.55 eV da camada epitaxial confinante de GaAlAs:Ge, onde se evidencia um forte acoplamento da rede na recombinação radiativa (1). A partir do comportamento espectral em função da temperatura, conclui-se que mais de um centro radiativo é responsável por essa emissão. Por outro lado, serão também discutidas estruturas de multicamadas com poços quânticos de potencial de GaAlAs, que apresentam interesse na aplicação de dispositivos na região visível do espectro.

(1)- M.T. Furtado, J.P. von der Weid  
Sol. State Commun. 54. 233 (1985)

SEM - 49

"RESULTADOS PRELIMINARES DE UM TESTE DE QUALIFICAÇÃO PARA LED e GaAlAs-GaAs EMISSÃO LATERAL". Jorge Salomão Pereira, Rubens do Amaral Neto, Felipe Rudge Barbosa - CPqD-Telebrás

Os primeiros resultados para o estabelecimento de um teste de qualificação para LED's são apresentados. Este método se baseia na variação da taxa de degradação com a temperatura. Amostras de 40 LED's de dupla heteroestrutura foram excitadas a mesma potência elétrica (130 mW) e em diferentes temperaturas (80°C, 100°C, 130°C) durante 150 horas. A partir destes resultados se pode estabelecer o comportamento da taxa de degradação com a temperatura. Numa segunda etapa, conhecendo-se o comportamento com a temperatura, será estabelecido o comportamento da taxa de degradação com a densidade de corrente de polarização podendo-se então estabelecer um procedimento para qualificação de LED's para comunicação ótica

SEM - 50

ESPALHAMENTO DE LUZ POR MICRO-CRISTAIS DE SILÍCIO

A.S. Carrico - Departamento de Física - UFRN

Um modelo para estudar o espalhamento Raman por micro-cristais de Silício numa matriz de Silício amorfo é apresentado. A estrutura do sistema é representada por filmes de Silício cristalino com superfícies (111) submetidas a diferentes condições de contorno. A seção de choque é obtida de um modelo simples de tensor de polarizabilidade a partir de funções de Green. Os resultados são comparados com experiências recentes

SEM - 51

EFEITOS FOTOPERSISTENTES EM GaAs:O

Waltair Vieira Machado - Dept. de Física / ICE / UA

O Arseneto de Gálio, como alguns outros semicondutores, geralmente exibem fenômenos persistentes quando, a baixas temperaturas, são iluminados com energias específicas do fenômeno. No caso em estudo, observamos que a resistividade do GaAs:O, no escuro, aumenta em cerca de até três ordens de grandeza a 80K após o material ter sido exposto a iluminação com energias entre 1.00eV e 1.40eV. A eficiência máxima normalmente acontece em torno de 1.24eV. Este estado é metaestável e possui um longo tempo de relaxação. Estamos estudando um modelo fenomenológico envolvendo centros complexos de impureza que contém o oxigênio. Para explicar nossos resultados estamos tentando envolver um par de níveis energéticos interligados, os quais possuem estados excitados. O efeito da iluminação, neste caso, é bombear o sistema para os estados excitados os quais podem acomodar elétrons extras. Desta forma talvez possamos explicar a brusca queda na corrente observada após a iluminação.

SEM - 52

**FOTOLUMINESCÊNCIA EM CAMADAS EPITAXIAIS DE GaAs DOPADAS COM Sn A BAIXAS TEMPERATURAS. H. Romero Montesinos, J.P. von der Weid, M. Tesi Furtado**

Foram realizadas medidas de fotoluminescência entre 63K e 300 K em camadas epitaxiais de  $Ga_{0,95}Al_{0,05}As$ : Sn, as quais são comumente empregadas como camadas confinantes tipo n em lasers de heteroestrutura dupla. A baixa temperatura (Pto. Triplo N2) na região próxima ao gap foram observadas além da transição banda-banda (b-b), duas outras recombinações radiativas devido à presença de impurezas residuais. Uma delas foi associada à recombinação banda de condução aceitador ra so, identificado como impureza residual carbono. A outra transição foi associada à uma recombinação envolvendo um complexo de natureza não conhecida. Na região de baixa energia observa-se além da emissão proveniente do substrato uma banda larga em 1,55eV associada à impureza de Sn.

SEM - 53

**METAIS DE TRANSIÇÃO NO INTERSTÍCIO DE MATERIAIS III-V. Luiza M.R. Scolfaro e A. Fazzio (Instituto de Física da USP)**

Embora seja bem conhecido o fato de Metais de Transição (MT) incorporar-se substitucional no sítio do cation em materiais III-V há resultados experimentais indicando a possibilidade de alguns MT ocuparem também o sítio intersticial. Neste trabalho procuramos pela primeira vez estudar o comportamento dessas impurezas em interstícios tetraédricos do cation e anion. A primeira barreira nesse estudo com aglomerado molecular é obter um sistema que reproduza convenientemente algumas propriedades fundamentais do cristal puro. Para tal, estudamos diversos tipos de aglomerados com diferentes condições de contorno já propostas anteriormente. Procuramos apresentar alguns resultados preliminares de Fe e Mn em GaAs. FAPESP

SEM - 54

**CORRELAÇÃO DOS DEFEITOS CRISTALINOS EXISTENTES EM UMA INTERFACE InP/InGaAsP POR CÁTODOLUMINESCÊNCIA (CL). Ricardo B. Nektins e Carlos A. Ribeiro - (Laboratório de Pesquisa em Dispositivos, IFGW - UNICAMP)**

Foi verificada a correlação entre defeitos existentes em um substrato de InP e os presentes em uma camada epitaxial de InGaAsP, através de imagens de CL obtidas por uma técnica simples: a coleção do sinal de CL é feita por um fotodetector de estado sólido, colocado próximo à amostra dentro da câmara de um microscópio eletrônico de varredura.

Para estabelecer-se esta correlação, foi necessário desenvolver um método para se eliminar a contaminação do substrato exposto ao bombardeamento pelo feixe eletrônico do microscópio, a qual ocorre durante o mapeamento prévio que se faz no substrato para determinar os sítios de cada defeito. A forma de descontaminação utilizada, permite o crescimento da camada epitaxial sobre a superfície analisada. Este método e a análise posterior da camada epitaxial crescida, pode definir a origem de vários tipos de defeitos existentes na mesma.

É possível pois, propor uma técnica de análise, que permite obter informações sobre a qualidade da fabricação de dispositivos semicondutores. FAPESP.

**SEM - 55** ANÁLISE DE SILÍCIO IMPLANTADO COM  $^{119}\text{Sn}^+$  POR CEMS E CHANNELING. Ela M. Scherer, C.M. Hagenack, J.P. de Souza e J.J.R. Baumvol (Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul).

Investigamos a recristalização epitaxial em fase sólida (SFE) e a substitucionalidade de íons de Sn implantados em matriz de Si, após tratamento térmico.

As doses de implantação variaram entre  $5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  e  $3 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$  para energias de 250 KeV e 300 KeV. Dois tipos de tratamento térmico foram usados:

- Recozimento isotérmico lento em forno (RL)
- Recozimento isotérmico rápido (RTA)

As amostras foram analisadas por Retroespalhamento Rutherford (RBS) aleatório e canalizado (CHANNELING) e por Espectroscopia Mössbauer de elétrons de conversão (CEMS).

Para uma dose típica de  $7 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  a recristalização é total após RL de 600°C por 1 hora seguido de RTA de 1200°C por 5 segundos. A substitucionalidade do Sn implantado é da ordem de 98% sem redistribuição do perfil de implantação e com apenas uma pequena densidade de defeitos residuais situados na região da interface amorfo-cristalina original. O espectro Mössbauer desta dose mostra apenas um singlete simétrico com deslocamento isomérico de  $1.76 \text{ mm.s}^{-1}$  indicando que o  $^{119}\text{Sn}$  ocupa posições substitucionais na rede cristalina do Si.

Para doses mais altas a substitucionalidade decresce enquanto X min aumenta e ocorre precipitação parcial de  $\beta\text{-Sn}$  especialmente para amostras submetidas a RTA.

**SEM - 56** "EFEITOS DE MULTIPLETOS E RELATIVÍSTICOS NA ESTRUTURA ELETRÔNICA DE IMPUREZAS  $4d^n$  em GaP". Tânia C.A. Macedo, UNESP-Guaratingueta e A. Fazzio USP-São Paulo.

Os resultados obtidos por teoria de campo médio para estrutura eletrônica de impurezas  $4d^n$  em GaP apresentam grandes discrepância quando comparados com dados experimentais como: i) Energia dos níveis aceitadores; ii) Energia de excitação  $d-d$ ; iii) Simetria do estado fundamental, contrariando a regra de Hund. Dentro de um enfoque perturbativo os efeitos de spin-orbita e multipletos serão incluídas, sendo que o modelo utilizado para o efeito de multipletos foi desenvolvido recentemente por Fazzio, Caldas e Zunger no estudo de impurezas de MT na série  $3d^n$ .

**SEM - 57** ESTRUTURA ELETRÔNICA DE IMPUREZAS SUBSTITUCIONAIS DE COBRE, PRATA, OURO E DA VACÂNCIA METÁLICA EM ZnSe, ZnTe e CdTe. - Hélio Chacham, J.L.A. Alves e Manoel Lopes de Siqueira - Departamento de Física, ICEX, Universidade Federal de Minas Gerais.

Cálculos rigorosos auto-consistentes da estrutura eletrônica foram efetuados, pela primeira vez, para impurezas substitucionais de Cu, Ag, Au e para a vacância metálica nos compostos semicondutores ZnSe, ZnTe e CdTe. Foi utilizado o modelo de aglomerado molecular terminado por esfera de Matson, aplicado pela primeira vez em semicondutores II-VI. As estruturas de faixas dos cristais "perfeitos" são adequadamente representadas pelos diagramas de níveis dos aglomerados  $\text{ZnSe}_4\text{Zn}_{12}$ ,  $\text{ZnTe}_4\text{Zn}_{12}$  e  $\text{CdTe}_4\text{Cd}_{12}$ . Níveis  $e(d)$  e  $t_2(d)$  compactos abaixo da banda de valência são introduzidos pelas impurezas, e interagem fracamente com os orbitais de ligação. Níveis aceitadores  $t_2$  com uma lacuna e com características essencialmente de ligação pendente são introduzidos na faixa proibida pelas impurezas.

SEM - 58 PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DOS COMPLEXOS OURO SUBSTITUCIONAL-METAL DE TRANSIÇÃO INTERSTICIAL EM SILÍCIO. Lucy V.C. Assali e José E. Leite (Instituto de Física da Universidade de São Paulo).

Utilizamos o modelo de aglomerado molecular dentro do formalismo do método do espalhamento múltiplo  $X_n$ , com tratamento dos orbitais de superfície através da esfera de Watson, para calcular a estrutura eletrônica dos sistemas:  $Si:Au_0Cr_1$ ,  $Si:Au_0Mn_1$ ,  $Si:Au_0Fe_1$ ,  $Si:Au_0Co_1$  e  $Si:Au_0Ni_1$ . Este estudo foi efetuado e um modelo microscópico<sup>1</sup> é proposto para explicar as evidências experimentais de EPR, pois alguns destes centros, de maneira diferente do caso da impureza isolada de ouro em silício, têm sido detectados. Baseados em nossos resultados acreditamos que a formação dos estados de impureza para os complexos ouro substitucional-metal de transição intersticial podem ser descritos a partir dos orbitais moleculares das impurezas isoladas. (FAPESP)

1. L.V.C. Assali, J.E. Leite e A. Fazzio, Phys. Rev. B 32, 8085 (1985).