



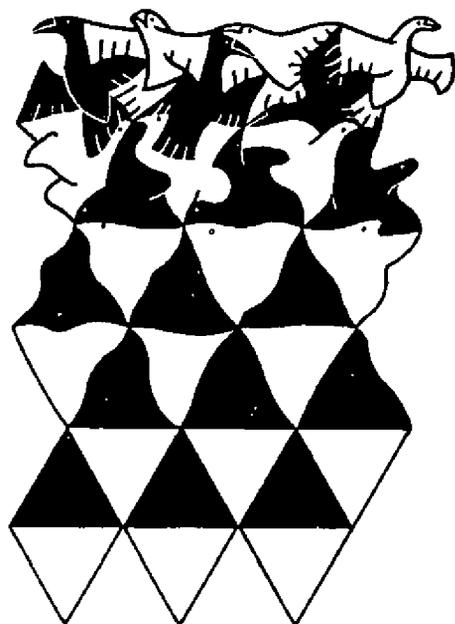
XVI Encontro Nacional de
**FÍSICA DA
MATÉRIA
CONDENSADA**

Caxambu, 18 a 22 de maio de 1993.

SBF - Sociedade Brasileira de Física

Programa e Resumos

XVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada



530.406 Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 16,

E56f Caxambu, 1993

16 Física da Matéria Condensada: programa e resumos, São Paulo, S.B.F., 1993

386 p.

1. Física da Matéria Condensada - Congressos; I. Título

Introdução

(ou: Como é que chegamos até aqui?)

O nosso Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada (ENFMC) nasceu em 1978, como um encontro informal da ordem de 80 físicos já atuantes no campo, e tem se realizado em todos estes anos subsequentes, sem interrupção — é inclusive uma das Reuniões oficiais da Sociedade Brasileira de Física (SBF). Reuniu 750 participantes em 1992, revelando o crescimento da área de Matéria Condensada (MC) aqui no país, e tem sido um reflexo bem definido do estado da pesquisa nessa área de tanta importância para a independência tecnológica do Brasil. A crescente maturidade da comunidade de MC é também revelada ao longo dos anos pela evolução do formato do ENFMC. Inicialmente o Encontro era organizado em discussões informais sobre trabalhos em andamento ou mesmo em planejamento, nos grupos de pesquisa mais estabelecidos, e nos recém-criados ou incipientes; esse formato, necessário e suficiente na época, foi-se tornando inadequado face ao maior número de participantes, e ao maior número de grupos de pesquisa brasileiros com projeção internacional, com trabalhos completos e competitivos a serem divulgados. Assim, em 1986 o Encontro tinha envergadura tal que motivou o princípio de formalização das sessões de discussão, com a introdução da exigência de um resumo escrito por trabalho apresentado: temos a partir daí a história escrita do ENFMC, nos Livros de Resumos. Podemos então saber que importantes etapas da MC foram discutidas e divulgadas à comunidade nos Encontros, tais como o andamento do projeto/implantação do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, a instalação de diversos laboratórios de crescimento de Semicondutores, a realização de conferências internacionais como a STATPHYS, e discussões contínuas sobre o estado da Ciência e Tecnologia no Brasil. O ENFMC se coloca assim como um local natural para contatos entre pesquisadores das diversas regiões, o que por si só já tem importância fundamental.

Paralelamente, podemos seguir a evolução do Encontro no sentido de se tornar uma Conferência Científica no seu caráter mais usual, permitindo uma ampla discussão de mérito da Física que se faz aqui. Além das Comunicações Orais, e dos Posters (introduzidos na décima reunião em 1987), o Encontro ganha Palestras Convidadas e os tópicos focalizados permitem também uma visão panorâmica das tendências em MC. No decorrer destes últimos Encontros ficou também demonstrado que ele se coloca como a melhor oportunidade para trazer ao país pesquisadores estrangeiros especialistas em MC, pois estariam aqui “expostos” ao maior contato possível com a comunidade, e assim foram feitos convites específicos para a participação de alguns especialistas estrangeiros, nos encontros XIV e XV (poucos, limitados à existência de financiamento por parte das empresas patrocinadoras do evento).

Ao mesmo tempo, ainda é no ENFMC que se podem fazer apresentações sobre trabalhos em andamento nos grupos de pesquisa do país, e esse espaço tem importância grande no nosso panorama, já que possibilita que desvios de rota sejam corrigidos, colaborações frutíferas sejam estabelecidas, e assim por diante, permitindo um uso mais eficiente dos recursos disponíveis. Também é essa a oportunidade para um estudante de pós-graduação travar conhecimento das dimensões da pesquisa em MC no Brasil, expor com profissionalismo seu trabalho, e mesmo arguir o trabalho dos companheiros e seniors.

Com essas várias vocações, seria inevitável que houvesse divergência de opiniões, entre pesquisadores que prefeririam manter o ENFMC informal —mas para tanto seria, provavelmente, necessário dividi-lo em dois ou mais blocos— e outros que postulavam a formalização definitiva do evento. A organização do XVI ENFMC é decorrente dessas preocupações, e tenta acomodar as tendências dentro do que acreditamos ser uma fórmula possível e plausível. Assim, definitivamente a organização em si do ENFMC está mais formal, como também o formato global da reunião. Por outro lado pretendemos reforçar a informalidade sem detrimento da profundidade das discussões

dentro de cada grupo, ou área de trabalho, e por isso foram introduzidos Workshops tópicos na programação. Finalmente, para permitir que o todo se comporte de modo articulado, foi elaborado um Livro de Programa além do Livro de Resumos.

A elaboração do Livro de Programas (de forma econômica) exigiu da SBF um enorme esforço de reorganização, e também exigiu um esforço individual grande por parte de cada autor de trabalho submetido a este décimo-sexto Encontro. Esperamos que todo este investimento tenha tido um resultado satisfatório, o que poderá ser estimado pelo andamento da reunião. Talvez pela grandeza somada do esforço dispendido, esse item das modificações introduzidas este ano tenha motivado mais manifestações da comunidade (umas vociferantes, outras angustiadas, até algumas de aprovação!). Entretanto gostaria de ressaltar que essa é apenas uma modificação operacional, que, se aprovada, será ainda certamente retocada. Mais importante e significativa foi a mudança estrutural, com a criação do Comitê de Programa, formado pelos coordenadores dos Grupos de Trabalho em que tradicionalmente se divide o evento (basicamente por área de interesse, e que foram indicados durante o encontro de 1992) e por um Coordenador de Programa. Com isso, as funções dos coordenadores de grupo passam a ser muito mais abrangentes. O Comitê de Programa através dos seus membros não só fica responsável pela arbitragem dos trabalhos submetidos, mas também teve o papel importantíssimo de organizar a parte científica do Encontro. Assim (outra mudança importante) nasce a intenção de, já do início, convidar palestrantes brasileiros e estrangeiros para as Palestras Vespertinas e para os Workshops, e é graças ao esforço desse Comitê que podemos contar este ano com o elenco notável de palestrantes que consta do nosso programa.

Como não poderia faltar, discutiremos neste Encontro um tema que está afligindo alguns, dando esperança a outros mas de todo modo gerando controvérsia, que é a participação das agências que tradicionalmente financiam a pesquisa acadêmica, no fomento à pesquisa na empresas. Estarão debatendo conosco esse assunto polêmico representantes da FAPESP, FAPERGS, FACEPE e FINEP.

Peço desculpas pelos vários transtornos que possa ter causado a mudança no formato deste Livro de Programa e Resumos, mas espero que isso não impeça (ao contrário, espero que ajude) o bom andamento da Reunião. Quero agradecer a todos os colegas que nos ajudaram a tornar possível o XVI ENFMC, principalmente os participantes nos Comitês, mas incluindo todos os outros que se viram de alguma forma arrastados pelo turbilhão dos últimos dias; à Diretoria e Secretaria da SBF, sem o apoio da qual não se pode pensar em organizar uma reunião de tal monta; e finalmente agradecer nominalmente à Suzy, à Neusa, ao Fernando e ao Guilherme, pelos fins-de-semana gastos no trabalho de montar este livro e, em geral, a ajudar para que a Reunião saísse.

Espero que tenhamos todos um Encontro proveitoso e agradável!

Marília J. Caldas

Nossos melhores agradecimentos

CONSELHO NACIONAL DE DESENVOLVIMENTO CIENTÍFICO E TECNOLÓGICO
CNPQ

FUNDAÇÃO DE AMPARO À PESQUISA DO ESTADO DE SÃO PAULO
FAPESP

FINANCIADORA DE ESTUDOS E PROJETOS
FINEP

FUNDAÇÃO DE AMPARO À PESQUISA DO ESTADO DE MINAS GERAIS
FAPEMIG

FUNDAÇÃO DE AMPARO À CIÊNCIA E TECNOLOGIA DO ESTADO DE PERNAMBUCO
FACEPE

FUNDAÇÃO DE AMPARO À PESQUISA DO ESTADO DO RIO GRANDE DO SUL
FAPERGS

IBM DO BRASIL
Gerência de Programas Acadêmicos

PRÓ-REITORIA DE PESQUISA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROPESP

INSTITUTO DE FÍSICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
IFUSP

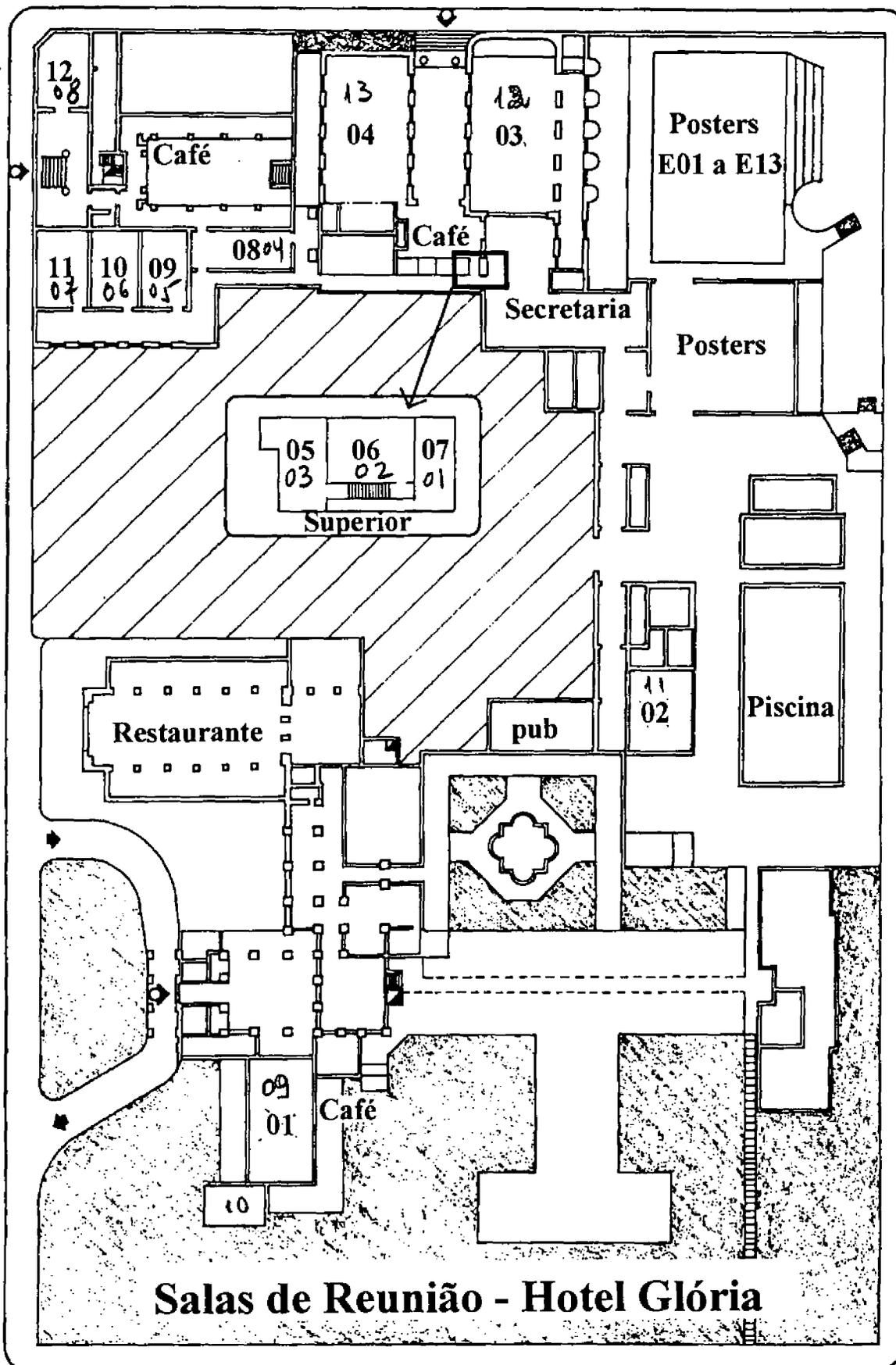
FUNDAÇÃO DE AMPARO À PESQUISA DO ESTADO DO RIO DE JANEIRO
FAPERJ

- Comitê Organizador* *Marília J. Caldas (USP) – Coordenadora*
Bismarck Vaz da Costa (UFMG)
Elisa M.B. Saitovitch (CBPF)
Nilson Sena de Almeida (UFRN)
Rita Maria C. Almeida (UFRGS)
- Comitê de Programa* *Sergio M. Rezende (UFPE) – Coordenador*
Antonio Luciano de A. Fonseca (UNB)
Belita Koiller (PUC-Rio)
Carlos Schwab (CTA/IEAV)
Gaston E. Barberis (UNICAMP)
Hypólito José Kalinowski (CEFET-Paraná)
Iris C.L. de Torriani (UNICAMP)
José Mestnik F^o (IPEN)
Josué Mendes F^o (UFCE)
Marcio F. Colombo (UNESP)
Maria Cristina dos Santos (UNICAMP)
Maurício D. Coutinho F^o (UFPE)
Mauro M. Dória (PUC-Rio)
Múcio A. Continentino (UFF)
Paulo H. Dionísio (UFRGS)
Rosângela Itri (USP)
- Comitê Consultivo* *Amando S. Ito (USP)*
Marco Antônio Amato (UNB)
Sérgio M. Rezende (UFPE)
- Comitê Local* *Carmen C. do Prado (USP)*
Helena Petrilli (USP)

MH = Mapa do Hotel

v

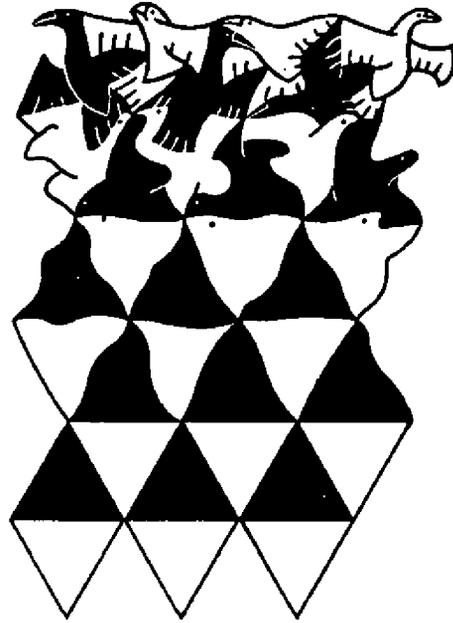
BF HOTEL
1 9
2 11
3 12
4 13
5 3
6 2
7 1
8 4
9 5
0 6
1 7
2 8
3 10



Salas de Reunião - Hotel Glória

Índice

Programa Científico	1
Resumos	69
Física Atômica e Molecular	71
Biofísica	89
Crescimento, Caracterização e Propriedades dos Materiais	106
Cristalografia	127
Física Estatística e Fenômenos Críticos	135
Instrumentação	173
Cristais Líquidos	190
Ciência dos Materiais	199
Metais e Materiais Magnéticos	214
Ótica	243
Polímeros	266
Ressonância Magnética	280
Semicondutores	290
Supercondutividade	319
Superfícies e Filmes Finos	332
Palestras Vespertinas	350
Índice de Autores e Apresentações	361



Programa Científico

Apresentação dia 19/05/93

Primeiro Período da Manhã 8:30 - 10:30

Feixes Atômicos, Átomos e Moléculas (ATO)

Coordenador: G. M. Sigaud

Local: Sala 07

08:30	PRODUÇÃO DE UM FEIXE ATÔMICO METAESTÁVEL DE CÁLCIO <i>Gomide, J. V. B., Cruz, F. C. da, Garcia, G. A., Pereira, D., Scalabrin, A.</i>	71
08:50	ESTUDO DOS PROCESSOS DE CARGA E DESCARGA EM ARMADILHAS MAGNETO-ÓPTICAS DE ÁTOMOS NEUTROS <i>Araujo, M. T. de, Milori, D. M. B. P., Guedes, I., Zilio, S. C., Bagnato, V. S.</i>	71
09:10	OPTICAL SUPERMOLASSES AND THE INVERTED PENDULUM <i>Bagnato, V. S., Marcassa, L. G., Oriá, M., Surdutovich, G. I., Zilio, S. C.</i>	71
09:30	ELÉTRONS DE COMBOIO PRODUZIDOS POR PROJÉTEIS EMERGENTES NEUTROS <i>Sigaud, G. M.</i>	72
09:50	ASSIGNMENTS DE LINHAS DE ABSORÇÃO DO $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$ NO INFRAVERMELHO (IV) E INFRAVERMELHO LONGÍNQUO (IVL) <i>Moraes, J. C. S., Pereira, D., Scalabrin, A., Moruzzi, G., Strumia, F., Winnewisser, B., Winnewisser, M.</i>	72
10:10	ESTRUTURAS ESPACIAIS DE ÁTOMOS DE SÓDIO EM FORMA DE ANÉIS EM ARMADILHAS MAGNETO-ÓPTICAS <i>Milori, D. M. B. P., Araujo, M. T. de, Guedes, I., Surdutovich, G. I., Zilio, S. C., Bagnato, V. S.</i>	72

Workshop: Interações Proteicas (BIO, CRI, LIQ)

Coordenador: Marcio F. Colombo

Local: Sala 11

08:30	Introdução	
08:40	Interações Proteicas <i>Santoro, M. M.</i>	89
09:15	PRESSURE STABILITY OF PROTEINS: Implications for Protein Folding and Assembly <i>Silva, J. L.</i>	89
09:50	PROTEIN-NUCLEIC ACID AND PROTEIN-PROTEIN INTERACTIONS <i>Arni, R. K.</i>	90

Workshop: Transições de Fase e Fenômenos Críticos (EST, MMM)

Coordenador: Maurício D. Coutinho Filho

Local: Sala 03

08:30	Transições de Fase em Sistemas com Autoassociação <i>Amaral, L. Q.</i>	135
09:00	MAGNETIZAÇÃO REMANENTE EM ANTIFERROMAGNETOS DESORDENADOS A CAMPOS MAGNÉTICOS MUITO BAIXOS $\text{Mn}_{1-x}\text{Zn}_x\text{F}_2$, $\text{K}_2\text{Fe}_{1-x}\text{In}_x\text{Cl}_5 \cdot \text{H}_2\text{O}$ E $\text{K}_2\text{Fe}(\text{Cl}_{1-x}\text{Br}_x)_5 \cdot \text{H}_2\text{O}$ <i>Bezerra, C. C., Paduan-Filho, A., Fries, T., Shapira, Y., Palacio, F.</i>	135
09:30	COMPORTAMENTO CRÍTICO EM MAGNETOS ALEATÓRIOS <i>Montenegro, F. C.</i>	136

10:00	PHASE TRANSITIONS IN A DYNAMICAL SYSTEM	
	<i>Vasconcelos, G. L.</i>	136

Instrumentos e Técnicas (INS)

Coordenador: Hypolito José Kalinowski

Local: Sala 10

08:30	CONSTRUÇÃO DE UM MICROSCÓPIO DE TUNELAMENTO DE VARREDURA TIPO BESOURO.	
	<i>Bleser, R. A. S., Achete, C. A.</i>	173
09:10	UM MÉTODO SIMPLES E VERSÁTIL PARA MEDIDAS MAGNÉTICAS AC DE PRECISÃO	
	<i>Gelfuso, V. C., Ortiz, W. A.</i>	173
09:30	CONSTRUÇÃO DE UM SISTEMA DE BOBINAS DE GRADIENTES E DE RADIOFREQUÊNCIA PARA IRRADIAÇÃO DE ANIMAIS DE PEQUENO PORTE	
	<i>Duran, J. E. R., Azevedo, F. C. C.</i>	173
09:50	SISTEMA DE MONITORAÇÃO DE ÁGUAS EM TEMPO REAL	
	<i>Urruchi, W. I., Pacheco, M. T. T.</i>	174
10:10	AQUISIÇÃO DE DADOS EM CAMPO E CADEIA DE TELEMETRIA PARA ALIMENTAÇÃO AUTOMÁTICA DE MODELO DE PREVISÃO DO DESTINO DE PESTICIDAS NO SOLO.	
	<i>Torre, A., Cruvinel, P. E., Silva, A. M. da, Pavão, S., Corona, N., Crestana, S.</i>	174

Cristais Líquidos I (LIQ)

Coordenador: Rosangela Itri

Local: Sala 12

08:30	Image analysis of quenched blue phase 1: transmission electron micrography	
	<i>Delacroix, H., Mariani, P., Gilli, J. M.</i>	190
09:10	ANÁLISE TEÓRICA DE SUPERFÍCIES INOMOGÊNEAS: EFEITOS SOBRE A ORIENTAÇÃO NEMÁTICA.	
	<i>Evangelista, L. R., Barbero, G.</i>	190
09:30	PROPRIEDADES DE ANCORAMENTO DE UM CRISTAL LÍQUIDO LIOTRÓPICO NA TRANSIÇÃO NEMÁTICO-ISOTRÓPICO	
	<i>Oliveira, E. A. de, Figueiredo Neto, A. M.</i>	190
09:50	INTERAÇÕES PARTÍCULA-PARTÍCULA EM FERROFLUÍDOS IÔNICOS POR RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA	
	<i>Tronconi, A. L., Pelegrini, F., Tourinho, F. A., Morais, P. C. de.</i>	191
10:10	RELAXAÇÃO BROWNIANA EM FERROFLUÍDOS IÔNICOS POR RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA	
	<i>Pelegrini, F., Tronconi, A. L., Silva, G. J. da, Tourinho, F. A., Morais, P. C. de.</i>	191

Workshop: Técnicas de Caracterização de Materiais I (MAT, CCP)

Coordenador: José Mestnik Filho

Local: Sala 09

08:30	Técnicas de Microscopia Eletrônica na Caracterização de Materiais	
	<i>Monteiro, W. A.</i>	199
09:10	Espectroscopia Fototérmica aplicada na caracterização de materiais	
	<i>Silva, E. C. da</i>	199
09:50	THERMOLUMINESCENCE AND ITS APPLICATIONS IN THE STUDY OF CONDENSED MATTER	
	<i>Sunta, C. M.</i>	200

Guias de Ondas e Formação de Imagens (OTI, INS)

Coordenador: W. Margulis

Local: Sala 06

08:30	PLANAR CHANNEL LiNbO ₃ Ti DIFFUSED WAVEGUIDES THEORETICAL MODELING AND EXPERIMENTAL RESULTS	
	<i>Nunes, F. D., Celaschi, S., Jesus, J. T. de, Monteiro, H. S.</i>	243
08:50	Dobra de Frequência em Fibras Especiais	
	<i>Carvalho, I. C. S., Margulis, W., Lacerda, M. M.</i>	243
09:10	OPTICAL FEEDBACK IN DYNAMIC SINGLEMODE DFB 1.54 μ m LASERS COUPLED TO SINGLE-MODE FIBERS	
	<i>Barbosa, F. R., Borin, F., Rego, A. C. B., Coral, C.</i>	243
09:30	FILTROS ESPECTRAIS ENTRE 1 E 100 nm EM FIBRAS ÓPTICAS	
	<i>Celaschi, S., Jesus, J. T. de, Juriollo, A., Arradi, R.</i>	244
09:50	INTERFERÔMETRO EM TEMPO REAL AUTO-ESTABILIZADO	
	<i>Barbosa, E., Frejlich, J., Prokofief, V. V., Gallo, H., Andreetta, J. P.</i>	244
10:10	LINE WHITE LIGHT SOURCE FOR IMAGING THROUGH A DIFFRACTIVE LENS	
	<i>Lunazzi, J. J.</i>	244

Workshop: Correlação Eletrônica em Átomos e Moléculas (POL, ATO)

Coordenador: Fernando J. da Paixão Filho

Local: Sala 02

08:30	Introdução	
08:40	Teorias de Muitos Corpos e o Problema de Correlação Eletrônica em Átomos e Moléculas	
	<i>Canuto, S.</i>	266
09:15	Aplicações da Função de Onda Multiestrutural Generalizada (MEG)	
	<i>Nascimento, M. A. C.</i>	266
09:50	Correlação Eletrônica em Estados Excitados via Interação de Configurações	
	<i>Ornellas, F. R.</i>	266

Experimentos de NMR e NQR (RES)

Coordenador: Gaston Barberis

Local: Sala 04

08:30	ESPECTROMETRO DE RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR CON CICLAJE RAPIDO DEL CAMPO MAGNETICO*	
	<i>Anoardo***, E., Pusiol**, D. J., Romero***, E., Marqués**, C.</i>	280
09:10	RESONÂNCIA DE QUADRUPOLO NUCLEAR PURA EM AMOSTRAS DE PÓ CRISTALINO DE As ₂ O ₃	
	<i>Rabbani, S. R., Santos, J. G. dos, Pontuschka, W. M., Hussein, M., Pusiol, D. J.</i>	280
09:30	LA RESONANCIA CUADRUPOLO NUCLEAR EN LA INVESTIGACION DE SOLIDOS MOLECULARES	
	<i>Brunetti, A. H.</i>	280
09:50	DINÂMICA E MOBILIDADE ATÔMICA EM LiNbO ₃ SUBMETIDO A TROCA POR PRÓTONS	
	<i>Nascimento, G. C. do, Pacobahyba, L. H., Engelsberg, M., Souza, R. E. de</i>	281
10:10	ESTUDIO DE MICROCRISTALES DE As ₂ O ₃ POR MEDIO DE LA RCN DEL ⁷⁵ As	
	<i>Wolfenson, A. E., Rabbani, S. R., Custódio, M. C., Oliveira, M. I. T. de</i>	281

Dinâmica de Portadores (SEM)

Coordenador: José d'Albuquerque e Castro

Local: Sala 01

08:30	AVALIAÇÃO DO TEMPO DE CAPTURA DE ELÉTRONS EM POÇOS QUÂNTICOS DE InGaAs/InP. <i>Souza, P. L. de, Samuelson, L., Liu, X., Nilsson, S., Seifert, W., Hessian, D., Sermage, B.</i>	290
09:10	CAPTURA DE PORTADORES EM POÇOS QUÂNTICOS DE GaAs-AlGaAs <i>Weber, G., Paula, A. M. de</i>	290
09:30	CARRIER DENSITY DEPENDENCE ON LASER INTENSITY IN QUANTUM WELL PHOTOLUMINES- CENCE <i>Leyva, M. de D., Oliveira, L. E.</i>	290
09:50	Hot electron energy relaxation in GaAs quantum wires: LO-phonon emission <i>Campos, V. B., Sarma, S. D.</i>	291
10:10	Decaimento Temporal Longo de Fotoluminescência em InGaAs. <i>Lamas, A. C., Gobbi, A. L.</i>	291

Sistemas Supercondutores (SUC)

Coordenador: Renato F. Jardim

Local: Sala 08

08:30	INTERFACES IN HIGH- T_c SUPERLATTICES <i>Guimpel, J., Fullerton^a, E. E., Nakamura^b, O., Schuller, I. K.</i>	319
09:10	SUPERCONDUTIVIDADE SUPERFICIAL EM SISTEMAS GRANULARES <i>Lima, O. F. de</i>	319
09:30	EFEITOS DA CORRELAÇÃO ELETRÔNICA EM FULLERENOS DOPADOS. <i>Martínez, G.</i>	319
09:50	TORQUE MAGNÉTICO EM SUPERCONDUTORES NO REGIME DE CADEIAS DE VÓRTICES. <i>Doria, M. M., Oliveira, I. G. de</i>	320
10:10	TEORIA DE APRISIONAMENTO COLETIVO DE VÓRTICES APLICADA A SUPERCONDUTORES DE ALTOS CAMPOS. <i>Nunes, C. B., Pinatti, D. G.</i>	320

Filmes de Metais e Semicondutores (SUF)

Coordenador: José Albino Aguiar

Local: Sala 05

08:30	Estudos de Interações Hiperfinas e de Quimisorção em Catalisadores Bimetálicos <i>Saitovitch, H., Silva, P. R. de J., Weberszpil, J., Passos, F. B.</i>	332
08:50	Ligas Trimetálicas Estudadas por Espectroscopia Auger <i>Landers, R., Vinhas, R. de C. G., Kleiman, G. G., Nascente, P. A. de P.</i>	332
09:10	Satélites Shake up e os Espectros Auger $L_{2,3}M_{4,5}M_{4,5}$ dos Metais 4d <i>Kleiman, G. G., Castro, S. C. de, Landers, R., Nascente, P. A. de P.</i>	332
09:30	DO GERMÂNIO AMORFO HIDROGENADO AO GERMÂNIO MICROCRISTALINO <i>Graeff, C. F. de O., Eberhardt, K., Stutzmann, M.</i>	333
09:50	SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE CRISTALIZAÇÃO DO SILÍCIO AMORFO HIDROGENADO INDU- ZIDO POR OURO. <i>Pasa, A. A., Losch, W., Neugebauer, M., Bauer, G. H.</i>	333
10:10	OXIDAÇÃO TÉRMICA DO SILÍCIO EXPLICADA VIA O MODELO DE AGREGAÇÃO LIMITADA POR DIFUSÃO <i>Silva Junior, E. F. da, Aguiar, J. A.</i>	333

Segundo Período da Manhã 11:00 - 12:30

Espalhamento e Colisões I (ATO)

Coordenador: Fernando J. Paixão

Local: Sala 07

- 11:00 Excitação Eletrônica da Molécula de CH₂O por Impacto de Póstrons
Germano, J. S. E., Lino, J. L. da S., Lima, M. A. P. 73
- 11:20 ESPALHAMENTO DE ELÉTRONS POR F₂, Cl₂, Br₂, E I₂ E A EXCITAÇÃO ELETRÔNICA DOS ESTADOS ¹A₂ E ³A₂ DO CH₂O POR IMPACTO DE ELÉTRONS. APLICAÇÕES DO MÉTODO MULTICANAL DE SCHWINGER COM PSEUDO-POTENCIAIS
Bettega, M. H. F., Policastro, A. P., Ferreira, L. G., Lima, M. A. P...... 73
- 11:40 COLISÃO DE ELÉTRONS POLARIZADOS COM A MOLÉCULA DE NO ORIENTADA
Paixão, F. J. da, Lima, M. A. P...... 73
- 12:00 SEÇÃO DE CHOQUE DE DESTRUIÇÃO DE ÍONS MOLECULARES H₂⁺ E H₃⁺ RÁPIDOS POR ÁTOMOS DE HÉLIO E ARGÔNIO
Faria, N. V. de C., Borges Jr, I., Coelho, L. F. S., Jalbert, G. 73

Teoria e Modelagem de Sistemas Anfílicos (BIO)

Coordenador: Paulo M. Bisch

Local: Sala 11

- 11:00 MODELAGEM MOLECULAR DE MELANOTROPINAS NA INTERFACE MEMBRANA-ÁGUA
Pascutti, P. G., Ito, A. S., Mundin, K. C., Bisch, P. M. 90
- 11:20 A INFLUÊNCIA DA INTERAÇÃO ELÉTRICA NA ESTABILIDADE DOS FILMES DE LIPÍDIOS
Souza, E. R. de, Pinto, N. M. A. C. 90
- 11:40 ESTUDO DA ESTABILIDADE MECÂNICA DA MEMBRANA DO ERITRÓCITO UMA APLICAÇÃO DA ANÁLISE HIDRODINÂMICA LINEAR
Cortez-Maghelly, C., Bisch, P. M. 91
- 12:00 SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE UM MODELO SIMPLES PARA MICELIZAÇÃO.
Bernardes, A. T., Bisch, P. M., Henriques, V. B...... 91

Transições de Fase Fora do Equilíbrio, Monte Carlo Quântico e Redes Neurais (EST)

Coordenador: Silvio R. A. Salinas

Local: Sala 03

- 11:00 TRANSIÇÕES DE FASE FORA DO EQUILÍBRIO EM UM MODELO ESTOCÁSTICO PARA A REAÇÃO DE OXIDAÇÃO DO MONÓXIDO DE CARBONO.
Tomé, T. 137
- 11:20 Energia do estado fundamental da cadeia antiferromagnética de Heisenberg pelo método de Monte Carlo.
Oliveira, M. J. de 137
- 11:40 SOLUÇÃO DE QUEBRA DE SIMETRIA DE RÉPLICA PARA A CAPACIDADE DE ARMAZENAGEM ÓTIMA EM REDES NEURAIS
Erichsen Jr, R., Theumann, W. K. 137
- 12:00 REDES DE NEURÔNIOS COM MULTI-INTERAÇÕES
Arenzon, J. J., Almeida, R. M. C. de, Iglesias, J. R., Penna, T. J. P., Oliveira, P. M. C. de..... 137

Instrumentação com Técnicas Óticas (INS)

Coordenador: Hypolito José Kalinowski

Local: Sala 10

- 11:00 Desenvolvimento de um Sistema Automático para Medidas de Refração Ocular
Ventura, L., Chiaradia, C., Castro, J. C...... 175
- 11:40 CONSTRUÇÃO E TESTE DE UM ELIPSÔMETRO BASEADO NO FOTOPOLARÍMETRO A QUATRO
 DETETORES.
Silva, M. P. da, Masetti, E...... 175
- 12:00 SÍNTESE DIGITAL DE PULSOS DE *r.f.c* PARA APLICAÇÕES EM R.M.N.
Nascimento, G. C. do, Engelsberg, M...... 175

Cristais Líquidos II (LIQ)

Coordenador: Rosangela Itri

Local: Sala 12

- 11:00 ESPALHAMENTO CENTRAL DE RAIOS-X EM FERROFLUIDOS IÔNICOS COM CARACTERÍSTICAS
 NEMÁTICAS.
Silva, M. de F. da, Figueiredo Neto, A. M...... 191
- 11:20 Estudos teóricos e experimentais de Birrefringência em ferrofluidos à base de $MnFe_2O_4$ e γFe_3O_4
Silva, M. de F. da, Figueiredo Neto, A. M...... 191
- 11:40 Medida da viscosidade de cristais líquidos liotrópicos utilizando um viscosímetro de ferrofluidos
Bacri, J., Gimenes, O., Silva, M. R. da, Figueiredo Neto, A. M...... 192
- 12:00 DETERMINAÇÃO DO COMPRIMENTO DE DEFORMAÇÃO A PARTIR DA BIRREFRINGÊNCIA IN-
 DUZIDA POR FLUXO EM LIOMESOFASES ISOTRÓPICAS
Fernandes, P. R. G., Figueiredo Neto, A. M...... 192

Workshop: Técnicas de Caracterização de Materiais II (MAT, CCP)

Coordenador: José Mestnik Filho

Local: Sala 09

- 11:00 Hyperfine Interactions and Angular Distribution of Nuclear γ -rays: Applications in Solid States Physics.
Saxena, R. N...... 200
- 11:40 A Difractometria de nêutrons no estudo de materiais
Parente, C. B. R...... 201

Propriedades de Materiais Magnéticos (MMM)

Coordenador: Mucio A. Continentino

Local: Sala 04

- 11:00 Magnetismo em Materiais Orgânicos
Novak, M. A., Tholence, J. L...... 214
- 11:20 RELAXAÇÃO DE ESTADOS METAESTÁVEIS EM PRESENÇA DE CAMPOS ALEATÓRIOS NO
 $KTaO_3 : Nb$.
Leitão, U. A., Kleemann, W...... 214
- 11:40 Estudos da reorientação de spin e determinação de diagramas de fase magnéticas das ligas $(R_{1-x}R'_x)Fe_{11}Ti$,
 $R = Gd, Er$ e $R' = Dy, Tb$.
Nagamine, L. C. M. M., Rechenberg, H. R., Ibarra, M. R., Algarabel, P. A...... 214
- 12:00 CALOR ESPECÍFICO MAGNÉTICO DE $Cu(Al_{1-x}L_x)_2$ ABAIXO DE 1.5 K
Rapp, R. E., Souza, E. P. de, Godfrin, H., Calvo, R...... 215

Optica Não Linear (OTI)

Coordenador: Carlos Schwab

Local: Sala 06

- 11:00 INVESTIGAÇÃO DE NÃO-LINEARIDADES ÓPTICAS EM ABSORVEDORES SATURÁVEIS COM A TÉCNICA DE "Z-SCAN"
Oliveira, L. C., Freire, H. J. P., Guedes, I., Zilio, S. C...... 244
- 11:20 MEDIÇÃO DE PULSOS CURTOS DE LASER SEMICONDUTOR BASEADA NA GERAÇÃO INTERNA DE SEGUNDO HARMÔNICO
Lang, A., Perelmuter, G., Carvalho, M. C. R., Margulis, W...... 245
- 11:40 EFEITO STARK AC EM VIDROS DOPADOS COM SEMICONDUTORES
Tsuda, S., Cruz, C. H. B...... 245
- 12:00 LINEAR AND NONLINEAR OPTICAL CHARACTERISTICS OF POROUS SILICON
Ghiner, A. V., Surdutovich, G. I...... 245

Polímeros Modificados (POL)

Coordenador: Maria Cristina dos Santos

Local: Sala 02

- 11:00 Polímeros com Propriedades Ópticas não Lineares para Comunicações Ópticas
Sanches, M. P. R., Reggiani, A. E...... 267
- 11:20 EFEITO DE CARGA ESPACIAL DURANTE A MUDANÇA CONFORMACIONAL NO P(VDF/TrFE).
Guimarães Neto, J. M., Faria, R. M...... 267
- 11:40 ESTUDOS DE ALCANCES, ESTABILIDADE TÉRMICA E DIFUSIVIDADE DE FOTORESISTES IMPLANTADOS COM Sn, Sb E Ag.
Maltez, R. L., Amaral, L., Behar, M...... 267
- 12:00 CARACTERIZAÇÃO ELÉTRICA E ESTRUTURAL DE FILMES DE P(VDF-TrFE) DOPADOS
Kondo, A. A., Alves, N...... 268

Efeitos Eletrônicos em Heteroestruturas (SEM)

Coordenador: Fernando Cerdeira

Local: Sala 01

- 11:00 RESSONÂNCIAS DE FANO EM EXCITONS QUASE-BIDIMENSIONAIS
Brum, J. A., Oberli, D...... 291
- 11:20 EXCITONS EM SUPER-REDES DE CdTe/CdZnTe
Chitta, V. A., Peyla, P., Wasieła, A., D'Aubigné, Y. M., Mariette, H., Magnea, N., Sturge, M...... 292
- 11:40 MAGNETIC FIELD TUNED TRANSITION OF AHARONOV-BOHM OSCILLATIONS FROM hc/e TO $hc/2e$ PERIODICITY IN THE ARRAY OF AlGaAs/GaAs RINGS
Gusev, G. M., Basmaji, P., Litvin, L. V., Nastaushev, Y. V., Toropov, A. I...... 292
- 12:00 ELECTRONVOLTAIC EFFECTS IN SEMICONDUCTORS : FUNDAMENTALS AND APPLICATIONS
Assumpção, R. de T...... 293

Óxidos Supercondutores (SUC, SEM)

Coordenador: Renato F. Jardim

Local: Sala 08

- 11:00 ESTRUTURA LOCAL DO ^{57}Fe E ^{119}Sn EM ÓXIDOS SUPERCONDUTORES E SEMICONDUTORES
(La, Gd)_{1.85} Sr _{0.15} CuO_4
Baggio-Saitovitch, E., Jácome, M. M., Candela, D. S...... 320

- 11:20 Espectroscopia Mössbauer do ^{57}Fe e do ^{119}Sn no $\text{La}_{1.25}\text{Nd}_{0.60}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$: evidência de ordenamento magnético local abaixo de $\approx 32\text{K}$
Baggio-Saitovitch, E., Azevedo, I. S., Scorzelli, R. B., Breuer, M., Büchner, B., Micklitz, H., Abd-Elmeguid, M. M. 320
- 11:40 SUPERCONDUCTIVIDADE NOS SISTEMAS $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Bi}_{1-y}\text{Pb}_y\text{O}_{3-\delta}$ e $\text{Bi}_{2-x}\text{Pb}_x\text{Sr}_{2-y}\text{Pr}_y\text{CuO}_{6+\delta}$
Domínguez, A. B., El-Shazly, O. M. M., Kapusta, S., Li, J., Mahmood, A., Reggiani, L. 321
- 12:00 RESISTÊNCIA NEGATIVA OBSERVADA EM CURVAS $V_{vs.I}$ DE UM FILME EPITAXIAL DE $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$ RECOBERTO COM Au
Andrade Jr, R. de, Lima, O. F. de, Shi, D. 321

Filmes e Superfícies: Propriedades Óticas (SUF)

Coordenador: Vladimir J. Trava-Airoldi

Local: Sala 05

- 11:00 Modificações na Estrutura da Superfície de Vidros Observadas por Espectroscopia no Infravermelho e Micro-Espectroscopia Raman.
Ziemath, E. C., Aegerter, M. A. 334
- 11:20 CRESCIMENTO DE FILME DE DIAMANTE PARA APLICAÇÕES ÓPTICAS.
Leite, N. F., Trava-Airoldi, V. J., Salgado, E. G. C., Rubim, J. C. 334
- 11:40 CRESCIMENTO DE FILME DE DIAMANTE USANDO A TÉCNICA ASSISTIDA POR TOCHIA DE OXI-ACETILENO.
Trava-Airoldi, V. J., Corat, E. J., Leite, N. F., Nobrega, B. N., Baranauskas, V. 334
- 12:00 Gravação Estabilizada de Microestruturas nas Amostras de InP, Usando um Processo de Ataque Fotoeletroquímico.
Soltz, D., Cescato, L. 335

Tarde (Posters) 14:00 - 16:00

Proteínas, Membranas Lipídicas (BIO)

Coordenador: Johnny R. Olivieri

Local: Modulo E11

- P01 EFEITOS DA VARIAÇÃO DO pH NA FORMA DA SORO ALBUMINA BOVINA (BSA) OBSERVADAS POR SAXS.
Olivieri, J. R. 91
- P02 ESTUDOS POR ABSORÇÃO ÓTICA DE METAHEMOGLOBINA DE *Glossoscolex paulistus*
Zeri, A. C., Tinto, M. H., Imassato, H., Tabak, M. 91
- P03 RE-FOLDING DE CITOCROMO C A pH < 3 VARIAÇÃO DE ATIVIDADE DE ÁGUA
Colombo, M. F., neves, A. C. D. 92
- P04 INTERAÇÃO DE DERIVADOS DE DIPYRIDAMOL COM ALBUMINA DE SORO BOVINO
Borges, C. P. F., Tabak, M. 92
- P05 INTERAÇÃO DO HORMÔNIO MELATONINA COM MEMBRANAS LIPÍDICAS
Shida, C. S., Castrucci, A. M. de L., Freund, M. T. L. 93
- P06 ESTUDO DA CARGA SUPERFICIAL DE MICELAS E MEMBRANAS POR RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA DE MARCADORES NITRÓXIDOS.
Costa, C. M. S., Anteneodo, C., Bisch, P. M., Bales, B. L. 93
- P07 EFEITO DA FORÇA IÔNICA NA CONCENTRAÇÃO DE COAGULAÇÃO CRÍTICA DE VESÍCULAS UNILAMELARES
Benatti, C. R., Feitosa, E. 93
- P08 DETERMINAÇÃO DAS CONSTANTES DE ASSOCIAÇÃO DA CLOROPROMAZINA A MEMBRANAS DE FOSFOLIPÍDIOS A PARTIR DA MEDIDA DO POTENCIAL SUPERFICIAL POR R.P.E.
Anteneodo, C., Bisch, P. M., Marques, J. F. 94
- P09 O PAPEL DO COLESTEROL NA INTERAÇÃO PEPTÍDEO-LIPÍDIO: UM ESTUDO POR RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA.
Biaggi, M. H., Freund, M. T. L., Schreier, S., Castrucci, A. M. de L. 94
- P10 ANÁLISE DA INTERAÇÃO PEPTÍDEO-MEMBRANA ATRAVÉS DA FLUORESCÊNCIA DO TRIPTOFANO
Macêdo, Z. S., Furquim, T. A. C., Ito, A. S. 94
- P11 Fotodissociação à baixa temperatura de nitrosil hemoglobina (HbNO) desnaturada
Wajnberg, E., Alves, Odivaldo C. 95
- P12 O PAPEL DAS MELANINAS EM SISTEMAS SUBMETIDOS À RADIAÇÃO.
Souto, A. L. C. F., Kawamura, M. R. D. 95
- P13 ATIVIDADE DA ÁGUA NA INTERAÇÃO DE MELANOTROPINAS COM MEMBRANAS-MODELO.
Furquim, T. A. C., Macedo, Z. S., Ito, A. S. 95

Crescimento e Caracterização (CCP)

Coordenador: Frederico Dias Nunes

Local: Modulo E08

- P01 PREPARAÇÃO DE MONOCRISTAIS FOTORREFRATIVOS $Bi_{12}SiO_{20}$ E $Bi_{12}TiO_{20}$
Carvalho, J. F., Prokofiev*, V. V., Gallo, N. J. H., Hernandez, A. C., Frejlich, J. 106
- P02 PURIFICAÇÃO DO ÍNDIO DE GRAU ELETRÔNICO A PARTIR DE SOLUÇÕES DE InP, InGaAs, InGaAsP E SUA REUTILIZAÇÃO EM CRESCIMENTO EPITAXIAL.
Gonçalves, J. L., Clerici, J. H., Tatch, P. J. 106

P03	PUXAMENTO DE FIBRAS MONOCRISTALINAS ÓXIDAS FOTORREFRATIVAS PELO MÉTODO LHPG. <i>Lima, C. J. de, Carvalho, J. F., Andreetta, M. R. B., Hernandes, A. C., Prokofiev, V. V., Kamshilin, A. A., Jääskeläinen, T.</i>	106
P04	CARACTERIZAÇÃO DE FILMES DE PVDF UTILIZANDO GRADIENTES DE TEMPERATURA <i>Alves, N., PENA, A. F. V.</i>	107
P05	CARACTERIZAÇÃO DE BIOTITAS DE PEGMATITOS ZONADOS POR ESPECTROSCOPIA MÖSSBAUER <i>Macedo, W. A. de A., Marciano, V. R. P. R. O., Neves, J. M. C., Svisero, D. P.</i>	107
P06	Caracterização Ótica, Elétrica e Microestrutural de Filmes de Sulfeto de Cádmio Crescidos por Electrodeposição <i>Matias, J. G. N., Julião, J. F., Mendes Filho, J., Assumpção, R. de T., Fantini, M. C. de A.</i>	107
P07	Caracterizando o Berilo <i>Blak, A. R.</i>	107
P08	Forno para crescimento por puxamento de metais e semicondutores com baixo ponto de fusão. <i>Castro, A. C. de</i>	108
P09	MODELO GEOMÉTRICO PARA ANOMALIA TÉRMICA DE SÓLIDOS AMORFOS <i>Furtado, C. B. S., Moraes, F.</i>	108
P10	MEDIDAS DINÂMICAS DA FLUORESCÊNCIA DE CENTROS $Pb^{+}(1)$ EM $BaLiF_3:Pb$ <i>Prado, L., Vieira Junior, N. D., Baldochi, S. L., Morato, S. P., Denis, J. P., Tercier, N.</i>	108
P11	Limites para determinação da energia de ativação dos processos termicamente estimulados usando o método da subida inicial <i>Nascimento, A. E. do, Valério, M. E. G., Lima, J. de</i>	109
P12	Interacciones Hiperfinas en el $BaBiO_3$ y Ba_2BiO_4 <i>Garcia, A. L., Presa, P. de la</i>	109
P13	INFLUÊNCIA DA TEMPERATURA DE DEPOSIÇÃO NA ESTRUTURA DE LIGAS DE $a-GeN_x:H$ <i>Lopez, J. V., Marques, F. das C.</i>	109
P14	AGREGAÇÃO INDUZIDA PELO Al^{3+} EM SOLUÇÕES SÓLIDAS DE FLUORETO DE CÁLCIO COM AlF_3 , YbF_3 E LaF_3 <i>Valerio, M. E. G., Blak, A. R., Trzesniak, P., Chadwick, A. V., Jackson, R. A.</i>	109
P15	MORFOLOGIA DAS FIGURAS DE ATAQUE QUÍMICO EM FIBRAS MONOCRISTALINAS DE $Bi_{12}SiO_{20}$ (BSO) E $Bi_{12}TiO_{20}$ (BTO). <i>Lima, C. J. de, Carvalho, J. F., Andreetta, M. R. B.</i>	110
P16	CARACTERISATION D'UN CRISTAL $K_6Li_4Nb_{15}O_{30}$ PAR SPECTROSCOPIE RAMAN <i>Fortin, W., Bourson*, P., Kugel, G., Ritz, D.</i>	110
P17	Crescimento e purificação de cristais de gálio <i>Ceotto Filho, G., Almeida, A. G. de, Lemos, A. de J., Carvalho, R. S., Carvalho, A. T. G. de</i>	110
P18	FILMES DE KCl E KCl:Li <i>Somma, F., Cremona, M., Montereali, R. M., Nunes, R. A., Carmo, L. C. S. do</i>	111
P19	SÍNTESE E PURIFICAÇÃO DE FLUORETOS PARA O CRESCIMENTO DE CRISTAIS LASER ATIVOS <i>Baldochi, S. L., Ranieri, I. M., Santo, A. M. E., Morato, S. P.</i>	111
P20	CARACTERIZAÇÃO "IN SITU" E MORFOLOGIA DE GaAs CRESCIDOS POR MBE <i>Lima, A. P., Shibli, S. M., Ceschin, A. M., Quivy, A. A., Rovira, P. I., Leite, J. R., Kiyohara, P. K.</i>	111
P21	Termoluminescência (TL) e Absorção Óptica (AO) de vidros de Borato de Lítio dopados com Cu^{2+} . <i>Chinaglia, E. de F., Trippe, S. C., Tatumi, S. H., Matusoka, M., Watanabe, S.</i>	112

- P22 Efeitos da Dopagem com Cu e da recristalização do vidro de borato de Lítio na Termoluminescência (TL).
 Trippe, S. C., Chinaglia, E. de F., Tatum, S. H., Dantas, N. O., Matusoka, M., Watanabe, S. 112

Propriedades e Caracterização

Coordenador: Luiz Oswaldo Alves

Local: Modulo E13

- P01 MEDIDAS DO ÍNDICE DE REFRAÇÃO NÃO LINEAR EM VIDROS ÓXIDOS DE METAIS PESADOS - II
 Reynoso, V. C. S., Barbosa, L. C., Rojas, R. F., Cesar, C. L., Alves, O. L. 112
- P02 ESTUDO DO PERFIL DE CONCENTRAÇÃO DURANTE O CRESCIMENTO E A DISSOLUÇÃO DE CRISTAIS DE IODETO DE MERCÚRIO.
 Hernandez, A. C., Piano, E., Dall'Aglio, G. A., Bedarida, F., Pontiggia, C. 113
- P03 ESPECTROS DE EMISSÃO TERMOLUMINESCENTE DE CRISTAIS DE FLUORETO DE LÍTIO COM IMPUREZAS DE Mg, Ti, Cu E P
 Yoshimura, E. M., Okuno, E., Sunta, C. M. 113
- P04 PREPARAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DO SISTEMA VÍTREO $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-CdO-GeO}_2$ VISANDO DISPOSITIVOS ÓPTICOS
 Aranha, N., Barbosa, L. C., Moreno, J. D., Mendes Filho, J., Alves, O. L. 113
- P05 ESTUDO DA QUALIDADE CRISTALINA DE MONOCRISTAIS DE BaLiF_3 , CRESCIDOS PELO MÉTODO CZOCHIRALSKI
 Baldochi, S. L., Mazzocchi, V. L., Parente, C. B. R., Morato, S. P. 113
- P06 DOPAGENS EM FIBRAS MONOCRISTALINAS ATRAVÉS DA TÉCNICA "PAINT-ON"
 Andreeta, M. R. B., Lima, C. J. de, Pedro Andreeta, J. P., Hernandez, A. C. 114
- P07 RELAXAÇÃO DIELÉTRICA DE ÍONS Cu^+ EM CaF_2
 Oliveira, L., Li, M. S., Pedrini, C., Bill, H. 114
- P08 DIFUSIVIDADE TÉRMICA DE CRISTAIS BaLiF_3
 Duarte, M., Vieira, M. M. F., Baldochi, S. L. 114
- P09 CARACTERIZAÇÃO DE INCLUSÕES FLUIDAS EM MINERAIS POR ESPECTROSCOPIA MICRO-RAMAN
 Pimenta, M. A., Fuzikawa, K. 115
- P10 SOBRE UM NOVO MÉTODO DE MEDIÇÃO DAS PROPRIEDADES ÓPTICAS EM VIDROS - I
 Reynoso, V. C. S., Barbosa, L. C., Rojas, R. F., Cesar, C. L., Alves, O. L. 115

Cristalografia Orgânica, Difração de Raios X - Instrumentação (CRI)

Coordenador: R. K. Arni

Local: Modulo E12

- P01 TRAÇADO DE RAIOS PARA A ESTAÇÃO DE ESPALHAMENTO DE RAIOS X A BAIXO ÂNGULO DO LNLS UTILIZANDO PROGRAMA SHADOW
 Bernardes, L. A., Vicentin, F. C., Tolentino, H., Dacal, L. C. O. 127
- P02 PREPARATION OF SOME HEAVY-ATOM DERIVATIVES FOR THE CRYSTALLOGRAPHIC STRUCTURE DETERMINATION OF GLUCOSAMINE-6-PHOSPHATE DEAMINASE FROM *Escherichia coli* K12.
 Fontes, M. R. de M., Horjales, E., Garrat, R. C., Oliva, G. 127
- P03 EXAFS DISPERSIVO COM FONTE DE RAIOS X CONVENCIONAL: UMA FERRAMENTA DE ANÁLISE ESTRUTURAL VIAVEL
 Zanchet⁽¹⁾, D., Tolentino, H. 128

P04	ANÁLISE CONFORMACIONAL DA MOLÉCULA DE 4,4'-DICLORO-N,N-DIETILBENCIDRILAMINA <i>Castelletto, V., Rivero, B. E., Punte, G.</i>	128
P05	SISTEMA DE RESFRIAMENTO DE AMOSTRAS POR FLUXO DE NITROGÊNIO PARA MEDIDAS DE DIFRAÇÃO DE RAIOS-X <i>Amável, A. S., Speziali, N. L.</i>	128
P06	DETERMINAÇÃO DO COEFICIENTE DE EXPANSÃO TÉRMICA EM MONOCRISTAIS COM DI- FRATÔMETRO DE DUPLO EIXO. <i>Wisniewski, C., Denicoló, I., Camargo, P. C. D., Cusatis, C.</i>	128
P07	STRUCTURE OF AN INTERMEDIATE IN THE SYNTHESIS OF CEMBRANES. 2-ISOPROPYL-5- METHYL-TRICYCLO[8.4.0.0 ^{2,7}]-4,9-TETRADECADIENEDIONE-3,6 <i>Zukerman-Schpector, J., Iulek, J.</i>	129
P08	Progress in the refinement of the structure of KDPG-Aldolase <i>Arni, R. K., Tulinsky, A.</i>	129

Propriedades Termodinâmicas, Transições de Fase e Fenômenos Críticos A (EST)

Coordenador: Mauricio D. Coutinho-Filho

Local: Modulo E04

P01	Modelo de Ising com interações competitivas em presença de Campo Externo: Um ponto de Lifshitz Tricrítico <i>Barbosa, M. C. B.</i>	138
P02	ESTUDO DO DIAGRAMA DE FASES DO MODELO BEG BIDIMENSIONAL VIA DECAIMENTO EX- PONENCIAL DA FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO <i>Barreto, F. C. S., Ferreira, S. J., Braga, G. A.</i>	138
P03	MODELO DE BLUME-EMERY-GRIFFITHS A CINCO PARÂMETRO <i>Resende, H. F. V. de, Caride, O., Magalhães, A. C. N., Tsallis, C.</i>	138
P04	Transições orientacionais em um modelo de gás de rede. <i>Tsai, S. H., Salinas, S. R. A.</i>	138
P05	MAGNETIZAÇÃO DO MODELO DE HEISENBERG ANISOTRÓPICO EM DUAS DIMENSÕES. <i>REINEHR, E., FIGUEIREDO, W.</i>	139
P06	Singularidade da magnetização de superfície em um ferromagneto de Heisenberg anisotrópico <i>Moraes, J. N. B. de, Figueiredo, W.</i>	139
P07	Singularidades na região de um ponto crítico terminal :aplicação na transição de fase isomórfica <i>Helena, E. L. de S., Barbosa, M. C. B.</i>	139
P08	SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE ANTIFERROMAGNETOS DILUÍDOS: $Fe_xZn_{1-x}F_2$ <i>Raposo, E. P., Coutinho-Filho, M. D., Montenegro, F. C.</i>	139
P09	CÁLCULOS DE GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO NO ESPAÇO DOS MOMENTOS PARA UM MODELO DE ISING COM SPINS MISTOS. <i>Quadros, S. G. de A., Salinas, S. R. de A.</i>	140
P10	DIAGRAMA DE FASE GLOBAL DE UM MODELO DE SPIN 1 COM DESORDEM ALEATÓRIA <i>Osório, R., Froyen, S.</i>	140
P11	TRANSIÇÃO DE 1ª ORDEM NO MODELO HEISENBERG COM INTERAÇÃO DE OZALOSHINSKII- MORIYA <i>Sousa, J. R. de, Fittipaldi, I. P., Albuquerque, D. F. de</i>	140
P12	MÍNIMOS E MÁXIMOS LOCAIS DE ENERGIA <i>Rodrigues, E. S., Oliveira, P. M. C. de</i>	140
P13	KINKS EM UMA CADEIA ANTIFERROMAGNETICA <i>Costa, B. V. da, Gouvea, M. E. de, Pires, A. S.</i>	141

P14	SIMULAÇÕES MICROCANÔNICAS DO MODELO DE ISING DILUÍDO: PROPRIEDADES TERMO-DINÂMICAS E DIAGRAMA DE FASE <i>Alcântara, A., Moreira, F. G. B., Sousa, A. J. F.</i>	141
P15	CRITICALIDADE DO MODELO DE HEISENBERG ANISOTRÓPICO EM UMA REDE HIERÁRQUICA AUTO-DUAL. <i>Souza, A. M. C. de</i>	141
P16	Antiferromagneto de Ising decorado com cadeias de spin $S=1$ e $S=3/2$. <i>Barreto, F. C. S., Santos, R. J. V. dos, Coutinho, S.</i>	141
P17	Decorated Ising model* <i>Costa**, M. A., Gonçalves, L. L.</i>	142
 Propriedades Termodinâmicas, Transições de Fase e Fenômenos Críticos B (EST) Coordenador: Mauricio D. Coutinho-Filho Local: Modulo E05		
P01	ATUALIZAÇÕES SEQUENCIAL E PARALELA EM DIVERSAS REDES DE BRAVAIS BIDIMENSIONAIS <i>Mariz, A. M., Costa, F. A. da, Nobre, F. D.</i>	142
P02	Uma nova família de algoritmos de Monte Carlo para simular sistemas de spin na criticalidade. <i>Bouabci, M. B., Carneiro, C. E. I.</i>	142
P03	A TWO-PARAMETER VARIATIONAL APPROACH FOR THE FREE ENERGY <i>Ferreira, J. R. F.</i>	143
P04	ACERCA DAS EXPANSÕES EM CUMULANTES NO MÉTODO CORRELATIVO NÃO- SIMETRIZADO DO CAMPO AUTOCONSISTENTE PARA CRISTAIS COM FORTE ANARMONICIDADE <i>Faria, A. C. de, Rabelo, J. N. T., Pascual, M. F., Zubov, V. I.</i>	143
P05	GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO POR CAMPO MÉDIO E ESCALA DE TAMANHO FINITO <i>Silva, J. K. L. da, Nogueira, R., Antonio Plascak, J. A., Droz, M.</i>	143
P06	ORIENTATIONALLY DISORDERED SOLID MOLECULAR HYDROGEN. MODELS AND RESULTS. <i>Kokshenev, V. B.</i>	143
P07	CONTRIBUIÇÃO AO ESTUDO DE MODELOS DE SÓLIDOS ANARMÔNICOS DE DIFERENTES TIPOS <i>Zubov, V. I., Rabelo, J. N. T.</i>	144
P08	MODELO SIMPLES DE CRISTAL ANARMÔNICO COM FORTE ANISOTROPIA <i>Rabelo, J. N. T., Lobo, M. P., Zubov, V. I.</i>	144
P09	THE POLYNOMIAL RING STRUCTURE OF BALABAN-FEDERBUSH AVERAGING PROCESSES <i>Torriani, H. H.</i>	144
P10	Grupo de Renormalização por Escalonamento de Tamanhos Finitos <i>F. Neto, J. M. de, Oliveira, S. M. de, Oliveira, P. M. C. de</i>	145
P11	Modelos Generalizados de Gauge e Cálculo de Expoentes Críticos <i>Domingos, J. V., Doria, R. M.</i>	145
P12	ACERCA DAS CORRELAÇÕES INTERATOMICAS EM UM MODELO BIDIMENSIONAL DE CRISTAL ANARMONICO COM REDE QUADRADA <i>Pascual, M. F., Zubov, V. I.</i>	145
P13	EQUAÇÕES DE ESTADO DE CRISTAIS COM ANARMONICIDADE FORTE ATÉ SEXTA ORDEM <i>Caparica, A. A., Zubov, V. I.</i>	145
P14	APROXIMAÇÃO DE PARES PARA O MODELO DE BLUME-CAPEL <i>Lara, D. P., Plascak, J. A.</i>	146

P15	UM ESTUDO DO MÉTODO DE MONTE CARLO DE CAMPO MÉDIO <i>Henriques, E. F., Salinas, S. R. A., Henriques, V. B., Lopez, L. F.</i>	146
Automação e Aplicações (INS)		
Coordenador: Paulo Estevão Cruvinel		
Local: Modulo E07		
P01	SOFTWARE PARA SISTEMA DE COLETA DE DADOS DE FENÔMENOS EVOLUTIVOS NO TEMPO <i>Cansian, A. M., Tonissi Jr, S. A., Ruffino, M. S. P.</i>	176
P02	OPERAÇÃO DE UM MAGNETÔMETRO DE DIAFRAGMA NUM REFRIGERADOR DE DILUIÇÃO PLÁSTICO COM UM GRADIENTE DE CAMPO MAGNÉTICO OSCILANTE <i>Bindilatti, V., Oliveira Jr, N. F.</i>	176
P03	SISTEMA DE MEDIDA DE MAGNETOSTRICÇÃO EM FILMES FINOS <i>Viegas, A. D. C., Schmidt, J. E.</i>	176
P04	ESTAÇÃO INSTRUMENTAL PARA COLETA E MEDIDA AUTOMÁTICA DE PARÂMETROS CLIMATOLÓGICOS <i>Cruvinel, P. E., Herrmann Jr, P. S. de P., Torre Neto, A.</i>	176
P05	PROJETO, DESENVOLVIMENTO E AUTOMAÇÃO DE UM SUSCEPTÔMETRO <i>ac</i> <i>Schettini, C., Aguiar, J. A.</i>	177
P06	REFRIGERADORES DE DILUIÇÃO CONSTRUÍDOS EM PVC <i>Jr, N. F., Rodrigues, A. R., Bindilatti, V., ter-Haar, E., Frossati, G.</i>	177
P07	EFEITO DE VIBRAÇÃO LONGITUDINAL NA TEMPERATURA FINAL DE UM REFRIGERADOR DE DILUIÇÃO PLÁSTICO. A POSSIBILIDADE DE SUA UTILIZAÇÃO COMO UM MAGNETÔMETRO DE AMOSTRA VIBRANTE <i>Bindilatti, V., Rodrigues, A. R., Oliveira Jr, N. F., ter-Haar, E., Frossati, G.</i>	177
P08	SISTEMA PARA MEDIDAS DA CORRENTE CRÍTICA EM SUPERCONDUTORES <i>Valença-Filho, M. M., Lima-Júnior, J. O., Ferreira, J. M., Nascimento, G. C. do.</i>	177
P09	CONSTRUÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE UM DIFRATÔMETRO θ - θ ACIONADO POR FITAS DE AÇO <i>Pessoa, J. D. C., Rodrigues, A. R. D., Mascarenhas, Y. P.</i>	178
P10	Determinação simultânea da suscetibilidade e da resistividade de amostras de geometria arbitrária em um suscetômetro- <i>ac</i> <i>Faria, C. C. de, Ortiz, W. A.</i>	178
P11	CONSTRUÇÃO DE UM GERADOR DE PULSOS E SUA APLICAÇÃO NA CARACTERIZAÇÃO TENSÃO-CORRENTE DE MATERIAIS CERÂMICOS <i>Las, W. C., Benedito, A. C., Cilense, M., Dordor, P.</i>	179
P12	SISTEMA AUTOMATIZADO PARA MEDIDAS DE RESISTIVIDADE <i>Andrade, R., Aguiar, J. A.</i>	179
P13	UM MAGNETÔMETRO DE TORQUE PARA O ESTUDO DE MATERIAIS NANOESTRUTURADOS <i>Carara, M. A., Schmidt, J. E.</i>	179
P14	CONTROLADOR E COLETOR AUTOMÁTICO PARA TROCA DE AMOSTRAS COM MEDIDAS DE CORRENTE E TEMPO EM UM SISTEMA PIXE BASEADO NO MICROCONTROLADOR AMD80535 <i>Cruvinel, P. E.</i>	179
P15	Automação de um sistema de medidas de EPR <i>Cernicchiaro, G. R. C.</i>	180
P16	ESTUDO DOS FATORES QUE DEGRADAM A SENSIBILIDADE DE UM MAGNETÔMETRO DE FLUXO SATURADO COM NÚCLEO TOROIDAL <i>Sousa, P. L. de, Baffa Filho, O.</i>	180

P17 PROJETO E CONSTRUÇÃO DE CALORÍMETRO PARA PEQUENAS AMOSTRAS Torres, B. C. M., Chaves, F. A. B.	180
P18 Projeto e Implementação do Software e Hardware do Computador de Bordo do Míssil MSA-1. Miranda, C. T. de, Nishiyama, L.	181

Efeitos de Impurezas e Defeitos em Materiais e Superfícies (MAT)

Coordenador: José Mestnik Filho

Local: Modulo E09

P01 EFEITO DE ELEMENTOS INTERSTICIAIS NAS MEDIDAS DE ATRITO INTERNO EM Nb E Nb-Ti. Florêncio, O., Mancini, M. W., Queiroz, J. R. O., Tejima, H., Jordão, J. A. R., Botta Filho, W. J., Silva, J. R. G., Grandini, C. R., Fernandes, R. M., Francisco, R. H. P., Rodrigues, A. M. G. D.	201
P02 Estudo da interação quadrupolar elétrica na liga $ZrCr_2$: influência da absorção de hidrogênio. Mestnik Filho, J., Carbonari, A. W., Pendl Júnior, W., Moura, J. I. de, Saxena, R. N.	201
P03 ANÁLISE DE ESPECTROS DE FREQUÊNCIA COMO FUNÇÃO DA TEMPERATURA Fernandes, R. M., Grandini, C. R., Shukla, M. M.	202
P04 ELECTROLYTICAL DIFFUSION OF F CENTERS IN KCl CRYSTALS Silva, L. F. D.	202
P05 ESTUDO DA MOBILIDADE IÔNICA NO QUARTZO NATURAL USANDO A TÉCNICA DE ELETRO-DIFUSÃO YUKIMITU, K., WATANABE, S.	202
P06 Monolithic Gels of Mullite Composition by Sol-Gel Process Donatti, D. A., Vollet, D. R.	203
P07 INTERAÇÃO DO HIDROGÊNIO COM A MATRIZ METÁLICA ATRAVÉS DE UM PROCESSO DE RELAXAÇÃO DE LONGO ALCANCE Grandini, C. R., Florêncio, O., Tejima, H., Jordão, J. A. R.	203
P08 Caracterização de Filmes Finos GeSe _y Fotodopados com Prata Mastelaro, V. R., Peytavin, S., Ibanez, A., Dexpert, H.	203
P09 ESTUDO DA CINÉTICA DO ENVELHECIMENTO DO SOL DE CeO ₂ -TiO ₂ Macêdo, M. A. de, Dall'Antonia, L. H., André Aegerter, M. A.	204
P10 ESTUDO DE ESPECTROS FOTOACÚSTICOS DE METAIS DE TRANSIÇÃO ANCORADOS EM SUPERFÍCIES MODIFICADAS DE SILÍCIO Nakamura, O., Alcântara, E. F. C., Airoidi, C., Vargas, H.	204
P11 OXIDAÇÃO DE LIGAS NbTi TEIXEIRA, S. R.	204
P12 Estudo Mossbauer de Rhodochrosite. Júnior, P. A. DE, Garg, V. K., FABRÍS, J. D.	204
P13 OS MODELOS DE LORENTZ E DE MAXWELL-GARNETT APLICADOS À MATERIAIS COMPOSTOS DIELETRICO-METAL TIPO ELÉTRON LIVRE Pedroso, C. B., Santos, M. B. F.	204
P14 BIESTABILIDADE OTICA DISPERSIVA E ABSORSIVA EM VIDROS DOPADOS COM MICROCRISTAIS DE CdSSe SOMBRA, A. S. B.	205
P15 INFLUÊNCIA DO TRATAMENTO TÉRMICO E DA ESPESSURA NA INSERÇÃO DO Li ⁺ NO FILME CeO ₂ - TiO ₂ Macêdo, M. A., Aegerter, M. A.	205

Multicamadas, Filmes e Metais Amorfos (MMM)

Coordenador: Hercílio R. Rechemberg

Local: Modulo E01

P01 DETERMINAÇÃO DA SUSCETIBILIDADE MAGNÉTICA COMPLEXA DE FERROFLUIDOS <i>INÁCIO, F. A., Oliveira, A. C. de, , Gama, S.</i>	215
P02 MAGNETORESISTÊNCIA E ANISOTROPIA ALEATÓRIA NA LIGA FERROMAGNÉTICA AMORFA <i>Fe_{70.4}Co_{4.6}Si₁₅B₁₀</i> <i>Silva, B. L. da, Machado, F. L. A.</i>	215
P03 CRISTALIZAÇÃO E MAGNETOSTRICÇÃO DE AMORFOS: PROPRIEDADES CORRELATAS? <i>Miranda, M. G. M., Baibich, M. N.</i>	215
P04 ANISOTROPIA INDUZIDA EM LIGAS AMORFAS E NANOCRISTALINAS <i>Emura, M., Severino, A. M., Altoé, M. V. P., Missell, F. P.</i>	216
P05 Temperatura de Debye de <i>Fe₇₈Si₉B₁₃</i> amorfo: efeitos de relaxação estrutural. <i>Rechenberg, H. R., Partiti, C. S. M.</i>	216
P06 Estudo do tamanho de grão de partículas de magnetita obtidas na preparação do ferrofluido <i>Fe₃O₄ + D₂O.</i> <i>Rodrigues, K. C., Parente, C. B. R., Mazzocchi, V., Roccatto, A., Gama, S., Cardoso, L.</i>	216
P07 Estudo por NMR da localização preferencial do Bi e da valência e distribuição do Pb em YIG. <i>Campos, A. A. G., Novak, P., Luetgemeier, H., Doetsch, D.</i>	217
P08 INFLUÊNCIA DA TEXTURA CRYSTALOGRAFICA DOS FILMES DE Cr SOBRE AS PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DOS FILMES DE Co-Cr. <i>Watanabe, M. M., Oppenheim, I., Missell, F. P., Pereira, J. A. de A. M., Schreiner, W., Baunvol, I. J. R.</i>	217
P09 INVESTIGAÇÕES DE FILMES FINOS MULTI-CAMADAS EPITAXIAIS DE FERRO POR RES- SONÂNCIA FERROMAGNÉTICA <i>Silva, E. C. da, Meckenstock, R., Kordecki, R., Pelzl, J.</i>	217
P10 MEDIDAS DE PERMEABILIDADE MAGNÉTICA INICIAL NO DESENVOLVIMENTO DO ESTADO NANOCRISTALINO EM FITAS AMORFAS <i>Saenger, J. F., Knobel, M., Sinnecker, J. P., Turtelli, R. S.</i>	218
P11 FILMES DE <i>Pb_{1-x}Fe_x</i> PREPARADOS POR CONDENSAÇÃO DE VAPOR <i>Passamani, E. C., Baggio-Saitovitch, E., Xia, S. K., Larica, C.</i>	218
P12 FILMES DE <i>Fe/Y</i> PREPARADOS POR CONDENSAÇÃO DE VAPOR A 20 K <i>Rodríguez, V. A. P., Passamani, E., Baggio-Saitovitch, E.</i>	218
P13 CURVAS DE HISTERESE TMOKE NA DIFRAÇÃO DE BRAGG EM REDES BIDIMENSIONAIS <i>Geoffroy, O., Givord, D., Otani, Y., Schlenker, M., Souche, Y., Pannetier, B., Santos, A. D. dos</i>	219
P14 Magnetic Properties of Metal Amino Acid Compounds. ¹ <i>Calvo, R.</i>	219
P15 Evidência de Tunelamento Quântico da Magnetização em Multicadas de Fe/Ag. <i>Novak, M. A., Sampaio, L. C., Wegrowe, J. E., Barbara, B., Tholence, J. L.</i>	219
P16 FORMAÇÃO DE FASES INTERMETÁLICAS POR DIFUSÃO EM ESTADO SÓLIDO <i>Garcia, V. H., Scherer, C.</i>	220
P17 INVESTIGATION OF TEMPERATURE-CURRENT FILAMENTS IN METALS AT HIGH MAGNETIC FIELD <i>Morgoon, V., Kadigrobov, A. M.</i>	220
P18 LEI DE ESCALA NA MAGNETORESISTÊNCIA DE LIGAS QUASECRISTALINAS <i>Al : Mn</i> <i>Martins, C. S., Machado, F. L. A.</i>	220

- P19 Microestrutura e Propriedades Magnéticas de ligas R_2Fe_{17} R = "Mischmetal"
Araújo, R. C. de, Oliveira, J. de, Cabral, F. A. O. 220
- P20 ESTUDO DAS PROPRIEDADES MAGNÉTICAS EM FUNÇÃO DA INTERDIFUSÃO NAS INTERFACES DE MULTICAMADAS DE Co/Pd IMPLANTADAS COM ÍONS DE Ar.
Schelp, L. F., Vasconcellos, M. Z., Schmidt, J. E. 221
- P21 Metal Fatigue Evaluation by Thermally Stimulated Exoelectron Emission
Chubaci, J. F. D., Watanabe, S., Katagiri, K., Yamamoto, T. 221

Ótica Quântica e Propriedades Óticas da Matéria Condensada (OTI)

Coordenador: Silvio L. S. Cunha

Local: Modulo E02

- P01 VALIDADE DA EQUAÇÃO MESTRA PARA MICROMASERS COM BOMBEAMENTO NÃO POISSONIANO
Khoury, A. Z., Davidovich, L., Zhu, S., Su, C. 246
- P02 THE QUADRATIC TIME-DEPENDENT HAMILTONIAN: EVOLUTION OPERATOR, SQUEEZING REGIONS IN PHASE SPACE AND TRAJECTORIES.
Mizrahi, S. S., Moussa, M. H. Y., Baseia, B. 246
- P03 ESTADOS COMPRIMIDOS DE FASE EM CAVIDADES
Davidovich, L. 246
- P04 Teoria de Naonlinearidades Oticas em Pocos Quanticos
Pereira Jr, M. F., Binder, R., Koch, S. 246
- P05 REDUÇÃO DE RUÍDO NUM OSCILADOR LINEAR ACOPLADO A UM OSCILADOR NÃO-LINEAR.
Baseia, B., Silva, A. de S., Bonato, C. A. 247
- P06 INTERAÇÃO DE LUZ COMPRIMIDA COM ÁTOMOS DE DOIS NÍVEIS
Dantas, C. M. A., Bagnato, V. S., Baseia, B. 247
- P07 PROCESSOS DE PERDA POR COLISÃO EM ARMADILHAS MAGNETO-ÓPTICAS
Marcassa, L. G., Bagnato, V. S., Wang, Y., Tsao, C., Weiner, J., Julienne, P. 247
- P08 ARMADILHA MAGNETO-ÓPTICA DE ÁTOMOS DE CÉSIO UTILIZANDO LASER DE DIODO
Chevrollier, M., Tuboy, A. M., Lezama, A., Bagnato, V. S., Oriá, M. 248
- P09 METHOD OF DETERMINATION OF OPTICAL ANISOTROPY IN PRESENCE OF A STRONG SCATTERING
Bagnato, V. S., Basmaji, P., Grivickas, V., Surdutovich, G. I., Vitlina, R. 248
- P10 Construção e Automatização de uma Aparelhagem para Medidas Magneto-Ópticas
Belo, L. C. M., Righi, A., Leitão, U. A. 248
- P11 DETEÇÃO SIMULTÂNEA DE EFEITOS MAGNETO-ÓPTICOS
Righi, A., Leitão, U. A. 248
- P12 PAPEL DA ESTATÍSTICA DE BOMBEAMENTO E DA DINÂMICA DA POLARIZAÇÃO ATÔMICA NAS FLUTUAÇÕES QUÂNTICAS DE LASERS COM ALARGAMENTO INOMOGÊNIO
Khoury, A. Z., Davidovich, L. 249
- P13 EFEITO RAMAN PRÉ-RESSONANTE ASSOCIADO AO ION CrO_4^{2-} NUM VIDRO DE METASILICATO
Ziemath, E. C., Aegerter, M. A., Melo, F. E. de A., Moreira, J. E. de C., Mendes Filho, J. 249
- P14 ALTO ÍNDICE DE REFRAÇÃO NÃO LINEAR EM VIDROS DOPADOS COM QUANTUM DOTS DE CdTe.
Duarte, A. S., Medeiros Neto, J. A. de, Barbosa, L. C., Alves, O. L., Fragnito, H. L., Palange, E. 249

P15	Susceptibilidade Óptica Não Linear de Terceira Ordem de Filmes Poliméricos <i>Mazzali, C., Duarte, A. S., Fragnito, H. L., Planas, S. S., Cardoso, V. L., Sanches, M. P. R., Villani, M. F., Reggiani, A. E., Palange, E.</i>	249
P16	DEGENERESCÊNCIA DE EIXO ÓPTICO EM MULTICAMADAS MAGNETO-ÓPTICAS <i>Leitão, U. A.</i>	250
P17	REFLECTOMETRY OF ANISOTROPIC FILMS <i>Surdutovich, G. I., Vitlina, R.</i>	250
P18	PROPRIEDADES ELÁSTICAS DA ÁGUA SOB PRESSÕES NEGATIVAS <i>Alvarenga, A. P. D. de, Grimsditch, M., Bodnar, R. J.</i>	251
P19	CÁLCULOS COLORIMÉTRICOS EM TOPÁZIO AZUL DO BRASIL. <i>Bonventi Jr, W., Isotani, S., Albuquerque, A. P. R. L.</i>	251
P20	MÉTODO PERTURBATIVO PARA A SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO NÃO LINEAR DE SCHRÖDINGER <i>Folhadela Neto, J., Coelho, I. S., Moura, M. A. de, Oliveira, J. R. de.</i>	251
P21	INFLUÊNCIA DOS ESTADOS DE ARMADILHAS ELETRÔNICAS NA ABSORÇÃO ÓPTICA DE VIDROS DOPADOS COM <i>Cd(S, Se)</i> <i>Ma, H., Araújo, C. B. de.</i>	251

Polímeros (POL)

Coordenador: Maria Cristina dos Santos

Local: Modulo E06

P01	Estudo do Poli(p-Fenileno) por Correntes Termo- Estimuladas de Depolarização* <i>Wang, M. S. E., Campos, M., Li, M. S., Oliveira, L.</i>	268
P02	INFLUÊNCIA DA UMIDADE EM CORRENTES DE ABSORÇÃO DIELÉTRICA EM POLI(ETILENO TERAFTALATO). <i>Nogueira, J. de S., Faria, R. M.</i>	268
P03	Estrutura Eletrônica de Polímeros Orgânicos Fotocondutores <i>Cunha, C. R. M. da, Caldas, M. J.</i>	269
P04	ESTUDO DA ORIGEM E NATUREZA DE ESTADOS ORBITAIS ESPÚREOS NOS EXTREMOS NÃO-SATURADOS DE UM CLUSTER FINITO DE TRANSPOLIACETILENO (TPA) <i>Corrêa, G. E. D. M., Caldas, M. J.</i>	269
P05	FABRICAÇÃO DE FILMES TIPO GEL DE POLI(O-ANISIDINA) <i>Mattoso, L. H. C., Faria, R. M., Bulhões, L. O. de S., MacDiarmid, A. G.</i>	269
P06	CONFORMATIONAL STUDY OF N,N'-SUBSTITUTED POLYPYRROLES <i>Santos, M. C. dos, Zotti, G., Berlin, A.</i>	270
P07	FILMES LANGMUIR E LANGMUIR-BLODGETT DE POLI(3-BUTILTIOFENO) MISTURADO COM ÁCIDO ESTREÁRICO. <i>Pawlicka, A., Faria, R. M., Oliveira Jr, O. N., Yonashiro, M., Canevarolo, S.</i>	270
P08	DETERMINAÇÃO DA TEMPERATURA DE TRANSIÇÃO VÍTREA, EM FILMES DE POLIURETANA DERIVADA DO ÓLEO DE MAMONA, PELA TÉCNICA TSDC <i>Nagashima, H. N., Sakamoto, W. K., Kanda, D. H. F.</i>	270
P09	CORRENTE LIMITADA POR CARGA ESPACIAL EM POLI(SULFETO DE P-FENILENO) AMORFO/AST. <i>Cavalcante, E. M., Campos, M. S. de.</i>	271
P10	SOLUÇÃO DE UM PROBLEMA DE CARGA ESPACIAL EM GEOMETRIA NÃO TRIVIAL. <i>Dantas, I. F., Cuminato, J. A., Ferreira, G. L., Figueiredo, M. T.</i>	271

P11	POLIMERIZAÇÃO RAMIFICADA EM MEIOS COM IMPUREZAS <i>Silva, L. R. da, Tavares, D., Araujo, J. M., Lucena, L. S., Tsallis, C.</i>	271
P12	PROPRIEDADES ÓPTICAS DE POLÍMEROS DOPADOS COM MOLÉCULAS ORGÂNICAS <i>Planas, S. A., Mazzali, C., Duarte, A. S., Cardoso, V. L., Sanches, M. P. R., Villani, M. F., Reggiani, A. E., Palange, E., Fragnito, H. L.</i>	271
P13	CARACTERIZAÇÃO DE POLÍMEROS DE CADEIA LATERAL PARA USO EM DISPOSITIVOS <i>Cardoso, V., Planas, S. A., Villani, M. F., Sanchez, M. P. R., Reggiani, A. E., Bittencourt, E.</i>	272
P14	Dinâmica de Sólitons no Polímero (CS) _x . <i>Magela e Silva, G., Castro, C. F., Fonseca, A. L. de A.</i>	272
P15	PROPRIEDADES ELETROMECAÑICAS EM COMPÓSITOS PU/PZT <i>Sakamoto, W. K., Nagashima, H. N., Longo, E.</i>	273
P16	ESTUDO DAS TRANSIÇÕES DE FASE DIFUSAS EM COPOLÍMEROS P(VDF-TRFE) <i>Moreira, R. L., Paula, R. de, Lobo, S. M.</i>	273
P17	ESTUDOS POR RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA DA BORRACHA NATURAL DE MANIHOT GLAZIOVII <i>Pelegri, F., Barros, G. G.</i>	273
P18	IMPEDÂNCIA ELETRO-ÓPTICA A.C. APLICADA AO ESTUDO DO ELETROCROMISMO DA POLI-ANILINA EM DIFERENTES ELETROLITOS <i>Torresi, S. I. C. de, Goff, A. H., Takenouti, H.</i>	273
P19	FILMES LANGMUIR-BLODGETT DE POLI(O-FENETIDINA) <i>Riul Jr, A., Mello, S. V., Mattoso, L. H. C., Oliveira Jr, O. N., Faria, R. M.</i>	274

Propriedades e Aplicações Ópticas de Semicondutores (SEM)

Coordenador: Carlos Henrique de Brito Cruz

Local: Modulo E03

P01	ESTUDO DAS TRANSIÇÕES ÓPTICAS E ₀ e E ₁ EM SUPERREDES DE Ge/Si UTILIZANDO ELETRO-REFLETÂNCIA. <i>Rodrigues, P. A. M., Silva, M. A. A., Cerdeira, F.</i>	293
P02	MEDIDAS DE FOTOLUMINESCÊNCIA EM GaAs COM DOPAGEM PLANAR <i>Paula, A. M. de, Oliveira, A. G. de</i>	293
P03	ESPECTROSCOPIA DE EXCITAÇÃO DE LUMINESCÊNCIA EM "QUANTUM DOTS" DE CdTe EM VIDROS. <i>Oliveira, C. R. M. de, Plentz Filho, F. O., Medeiros Neto, J. A., Cesar, C. L., Barbosa, L. C., Cruz, C. H. B., Fragnito, H. L., Meneses, E. A., Alves, O. L.</i>	294
P04	FOTOCORRENTES PRIMARIAS EM DIODOS SCHOTTKY DE Pd/a-Si:H <i>Borges, P. de F., Camargo Jr, S. de S.</i>	294
P05	Propriedades ópticas de filmes GaAs crescidos a baixa temperatura por MBE <i>Rossi, J. C., Lubeshev, D. I., Basmaji, P., Pizzani, P. S., Galzerani, J. C., Notari, A. C.</i>	294
P06	Espalhamento Raman Ressonante em Superredes Tensionadas de InGaAs/GaAs. <i>Ribeiro, E., Cerdeira, F., Roth, A. P.</i>	294
P07	OPTICAL PROPERTIES OF AMORPHOUS SILICON MEASURED USING Z-SCAN TECHNIQUE <i>Kolenda, J., Grivickas, V., Misoguti, L., Fragalli, J. F., Zilio, S. C., Bagnato, V. S.</i>	295
P08	FOTOLUMINESCÊNCIA EM LIGAS DE CARBETO DE SILÍCIO AMORFO HIDROGENADO <i>Magalhães, C. S. de, Alvarez, F.</i>	295

P09	A INFLUÊNCIA DOS PLASMÔNS NO ESPECTRO DE LUMINESCÊNCIA DOS SEMICONDUTORES DE GAP DIRETO. Sampaio, A. J. da C., Costa Filho, R. N. da, Freire, V. N.	295
P10	Degradação da Superfície de InGaAs e InP Submetidas a Plasma de II_2 Gobbi, A. L., Lamas, A. C.	295
P11	RESPOSTA ÓTICA NÃO LINEAR DE FILMES FINOS DE α -Si:II COM DISCRIMINAÇÃO DE EFEITOS ELETRÔNICOS E TÉRMICOS Ribeiro, R. M., Margulis, W., Leite, C. A. F., Guedes, I.	296
P12	Z-SCAN WITH TEMPORAL RESOLUTION Misoguti, L., Fragalli, J. F., Zilio, S. C., Bagnato, V. S., Kolenda, J.	296
P13	LASERS DE POÇO QUÂNTICO TENSIONADO EMITINDO EM 980 nm PARA USO EM AMPLIFICADORES ÓPTICOS À FIBRA. Machado, A. M., Bernussi, A. A., Coghi, C. A., Martins, R. B.	296
P14	Bistabilidade ótica sem cavidade em poços quânticos acoplados Pereira Jr, M. F.	297
P15	Otimização da operação de lasers de poços quânticos através de efeitos de muitos corpos e engenharia de estrutura de banda Pereira Jr, M. F., Chow, W., Koch, S.	297
P16	ESTUDO DA ESTABILIDADE DA INTENSIDADE DE FOTOLUMINESCÊNCIA EM CAMADAS DE SILÍCIO POROSO Bernussi, A. A., Basmaji, P., Rossi, J. C., Matvienko, B.	297
P17	EMISSÃO ÓPTICA DO COMPLEXO EXCITON-FÔNON EM SEMICONDUTORES III-V Iikawa, F., Trallero-Giner, C., Cardona, M.	298

Supercondutores: Experimentos (SUC)

Coordenador: José Albino Aguiar

Local: Módulo E10

P01	FLUTUAÇÕES TERMODINÂMICAS NA MAGNETOCONDUTIVIDADE DO $YBa_2Cu_3O_7$ Costa, R. M., Pureur, P., Schaf, J.	321
P02	CALOR ESPECÍFICO Y TRANSICIONES DE FASE DE ÓXIDOS METÁLICOS SUPERCONDUCTORES Mondragón, J. C. T., Zapata, R. A. V.	322
P03	ESTUDO DA SUPERCONDUTIVIDADE SUPERFICIAL EM IITSC Tellez, D. L., Oliveira, A. C. de, Aguiar, A.	322
P04	COMPORTAMENTO UNIVERSAL DA RAZÃO H_{C3}/H_{C2} PARA SISTEMAS SUPERCONDUCTORES GRANULARES Avila, M. A., Andrade Jr, R., Lima, O. F. de.	322
P05	Estudo da Distribuição dos Acoplamentos Intergranulares em Amostra Policristalina de $YBa_2Cu_3O_{7-y}$ Moreira, F. M. A., Carvalho Júnior, J. S. de, Ortiz, W. A., Lima, O. F. de.	322
P06	OTIMIZAÇÃO DA TEMPERATURA E DO TEMPO DE TRATAMENTO TÉRMICO PARA A FORMAÇÃO DA FASE Bi-2223 EM FITAS SUPERCONDUTORAS Suzuki, P. A., Fantini, M. C. A., Medugno, A. C.	323
P07	ESTUDO DE PROPRIEDADES MECÂNICAS EM CERÂMICAS SUPERCONDUTORAS COM BASE EM Bi-Sr-Ca-Cu-O DOPADAS COM CHUMBO Jurelo, A. R., Dumke, V. R.	323

- P08 ON THE MAGNETIC AND ELECTRICAL PROPERTIES OF THE $RB_2Fe_3O_x$ CERAMIC OXIDES
(R=La,Nd,Sm,Eu,Gd,Tb,Dy,Ho,Y):
FE BASED ISOMORPHS OF THE $RB_2Cu_3O_x$ SUPERCONDUCTORS
- Elzubair*, A., ElMassalami*, M., Baggio-Saitovitch, E.* 323
- P09 SUBSTITUIÇÃO DE CuO POR NiS EM CERÂMICAS DE $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ ANALISADA POR ESPECTROSCOPIA DE EMISSÃO DE RAIOS-X
Aguiar, J. A., Ferreira, J. M., Pavão, A. C., Kurmaev, E. Z. 324
- P10 SUPERCONDUTIVIDADE NO SISTEMA $YBa_2[(CuO)_{1-x}(AS)_x]_3O_{4-\delta}$ ($A = Fe$ e Zn)
Aguiar, J. A., Ferreira, J. M., Ramos, A. S., Barbosa, M. V., Gomes, A. K. B., Sá, P. C. A., Pavão, A. C., Martínez, E. C. 324
- P11 Lower Critical Magnetic Field, Penetration Depth and Coherence Length of Superconducting Rb_3C_{60} .
Buntar, V. A., Sokolov, A. I., Politis, C., Eckern, U. 324
- P12 CRITICAL CURRENTS IN HIGH- T_c THIN FILMS
Fernandes, A. A. R., Chan, I. N., Guimpel, J., Lederman, D., Schuller, I. K. 325
- P13 EXPANSÃO TÉRMICA DE COMPÓSITOS $YBaCuO/Ag$
Haetinger, C. M., Kunzler, J. V., Pureur, P., Ghivelder, L., Reich, S. 325

Segundo Período da Tarde 16:15 - 18:30**Palestras Vespertinas – A**

Local: Sala 03

- 16:15 Giant magneto-transport in granular magnetic systems
Chien, C. L. 350
- 17:30 Magnetic Behavior of Isolated 3d and 4d Ions Implanted into Metals and Semiconductors
Riegel, D. 350

Palestras Vespertinas – B

Local: Sala 04

- 16:15 METAESTABILIDADE INDUZIDA POR DEFEITOS $s^n p^m$ EM SEMICONDUCTORES III-V: UM COM-
 PORTAMENTO UNIVERSAL!
Fazzio, A. 351
- 17:30 Strain relaxation mechanisms in SiGe thin films grown on Si(001) substrates
LeGoues, F. K. 351

Palestras Vespertinas – C

Local: Sala 01

- 16:15 Bound States in Moving Flux Lines
Choi¹, C. H., Hoffmann², V., Rainer², D. 352
- 17:30 Andreev scattering: a new basis for superconductive electronics
Nicolisky, R. 352

Palestras Vespertinas – D

Local: Sala 06

- 16:15 Advances in high average power molecular lasers
Hall, D. R., Baker, H. J. 352
- 17:30 INTRINSIC FIBRE OPTIC SENSORS FOR PHYSICAL AND CHEMICAL MEASUREMENTS
Culshaw, B. 353

Apresentação dia 20/05/93

Primeiro Período da Manhã 8:30 - 10:30

Física Médica e de Radiações (BIO)

Coordenador: Oswaldo Baffa Filho

Local: Sala 11

- 08:30 Efeitos biológicos da radiofrequência (rf) no tecido epitelial da planta do pé de fetos de rato
Duran, J. E. R., Abud, S. A. T., Stipp, A. C. M. 95
- 08:50 ESTUDO HISTOLÓGICO DO EFEITO DA APLICAÇÃO DE ULTRA-SOM À NÍVEIS HIPERTÉRMICOS EM FÍGADO ANIMAL IN-VITRU.
Pelatti, I., Periotto, R., Teixeira, C., Verani, N. F., Castro, E. P. de 96
- 09:10 SÍTIOS DE CO₂ EM HIDROXIAPATITAS DE ESMALTE DENTÁRIO ESTUDADAS POR ENDOR E RESSONANCIA TRIPLA GERAL
Vugman, N. V., Rossi, A. M., Rigby, S. E. J. 96
- 09:30 UTILIZAÇÃO DE SQUIDS EM MAGNETOCARDIOGRAFIA: ESTUDO DE PACIENTES COM BLOQUEIO DE RAMO DIREITO DE DIFERENTES ORIGENS
Baffa Filho, O., Sousa, P. L. de, Verzola, R. M. M., Wakai, R. T. 96
- 09:50 MEDIDA DA MAGNETIZAÇÃO REMANENTE DE UM ALIMENTO TESTE PARA O ESTUDO DA DINÂMICA GÁSTRICA.
Miranda, J. R., Baffa Filho, O., Sousa, P. L. de, Oliveira, R. B. 97

Propriedades e Caracterização I (CCP)

Coordenador: Josué Mendes Filho

Local: Sala 12

- 08:30 ESTUDO TEÓRICO DAS PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DO SÓDIO SÓLIDO
Zubov, V. I., Ortiz, J. F. S., Tretyakov, N. P. 115
- 08:50 ABSORÇÃO ÓPTICA E RELAXAÇÃO DIELETRICA DE ÍONS Cu⁺ EM FILMES DE KCl.
Oliveira, L., Cruz, C. M. S., Silva, M. A. P., Li, M. S. 116
- 09:10 RESPOSTAS NÃO LINERARES NO KDP
Moreira, S. G. C., Melo, F. E. A. 116
- 09:30 ABAFAMENTO DA TERMOLUMINESCÊNCIA À ALTA TEMPERATURA EM VIDROS ALUMINOBO-RATOS DE BÁRIO DOPADOS COM FERRO
Oliveira, M. I. T. de, Pontuschka, W. M., Rabbani, S. R. 116
- 11:40 MEDIDAS PIROELÉTRICAS EM CERÂMICAS DE TITANATO DE CHUMBO MODIFICADS COM LANTÂNIO
Baltazar-Rodrigues, J., Eiras, J. A. 116
- 12:00 CARACTERIZAÇÃO ÓPTICA E ESTRUTURAL DE FILMES DE KCl:Cu⁺ EM DIVERSAS TEMPERATURAS DO SUBSTRATO.
Oliveira, L., Li, M. S. 117

Workshop: Cristalografia de Sistemas Macromoleculares (CRI, BIO, LIQ)

Coordenador: Iris Torriani

Local: Sala 05

08:30 Introdução

- 08:40 Estruturas de Macromoleculas Biológicas por Difração de Raios-X em Monocristais
Oliva, G...... 129
- 09:15 Cristalografia de Materiais Fibrosos
Mascarenhas, Y. P...... 130
- 09:50 Liquid crystalline phases of lipid-containing systems: structural analysis by X-ray diffraction techniques
Delacroix, H., Gulik, A., Gulik-Krzywicki, T., Luzzati, V., Mariani, P., Vargas, R...... 130

Workshop: Sistemas Eletrônicos Fortemente Correlacionados (EST, MMM)

Coordenador: Amós Troper

Local: Sala 03

08:30 Introdução

- 08:40 Quantum Interference in Luttinger Liquids
Balseiro, C. A...... 146
- 09:15 Emparelhamento local e CDW no modelo de Hubbard atrativo
Santos, R. R. dos..... 147
- 09:50 FERRIMAGNETISMO E TRANSIÇÃO METAL-ISOLANTE EM CADEIAS POLIMÉRICAS[†]
Coutinho-Filho, M. D., Santos, M. C. dos..... 147

Workshop: Sensores a Fibra Ótica (INS)

Coordenador: Hypolito José Kalinowski

Local: Sala 07

08:30 Introdução

- 08:40 SENSORES A FIBRA ÓTICA PARA O SETOR ELÉTRICO
Valente, L. C. G...... 181
- 09:15 SENSORES A FIBRA ÓTICA PARA APLICAÇÕES AEROESPACIAIS
Carrara, S. L. A...... 181
- 09:50 Industrial liaison and product developement activity in optical fibre sensors: The experience of Strathclyde
Culshaw, B...... 182

Preparação e Caracterização de Ligas e Metais Especiais (MAT)

Coordenador: José Mestnik Filho

Local: Sala 09

- 08:30 DEPOSIÇÃO DE FILMES FINOS PROTETORES DE TiO₂-SiO₂ SOBRE O AÇO INOX 316L
Peratello, S. H., Silva, C. C., Atik, M., Aegerter, M. A...... 205
- 08:50 EFEITO DA ADIÇÃO DE CROMO E DE TRATAMENTOS TÉRMICOS NA RESISTÊNCIA MECÂNICA E DUCTILIDADE DA LIGA Fe-24%Al
Couto, A. A., Paola, J. C. C. D., Ferreira, P. I...... 206

09:10	EFEITO DO HIDROGÊNIO NA NUCLEAÇÃO DE BANDAS DE DEFORMAÇÃO NA SUPERFÍCIE LATERAL DE AÇOS AUSTENÍTICOS SUBMETIDOS A ENSAIOS DE FADIGA <i>Gavillet, J., Miranda, P. E. V., Kuromoto, N. K.</i>	206
09:30	Efeitos da Composição na cristalização de fitas amorfas $(Fe_{1-c}Si_c)_{87}Si_{13}$. <i>Neta, E. C. de R., Rechenberg, H. R.</i>	206
09:50	FABRICAÇÃO DA LIGA $Fe_{20}Al_{80}$ PELO MÉTODO DE MOAGEM MECÂNICA: CARACTERIZAÇÃO ESTRUTURAL E MAGNÉTICA. <i>Lima, J. C. de, Grandi, T. A., Drago, V., Santos, V. H. F. dos</i>	206
10:10	STRUCTURAL STUDY OF $Cr_{1-x}Fe_x$ POWDERS PREPARED BY MECHANICAL MILLING <i>Xia, S. K., Baggio-Saitovitch, E.</i>	207

Optica Quântica (OTI, ATO)

Coordenador: Hugo L. Fragnito

Local: Sala 06

08:30	PASSEIOS QUÂNTICOS ALEATÓRIOS E GRANDES DESLOCAMENTOS DE DISTRIBUIÇÕES DE FÓTONS <i>Aharonov, Y., Davidovich, L., Zagury, N.</i>	252
08:50	CORRELAÇÕES QUÂNTICAS ENTRE DUAS CAVIDADES <i>Davidovich, L., Haroche, S., Brune, M., Raimond, J. M.</i>	252
09:10	OSCILADOR PARAMÉTRICO FORÇADO POR UMA CORRENTE QUÂNTICA <i>Oliveira, F. A. M. de, Lima, E. G. de</i>	252
09:30	REDUÇÃO DE RUÍDO QUÂNTICO EM LASERS COM SINAL INJETADO <i>Fontenelle, M. T., Davidovich, L.</i>	253
09:50	ESTATÍSTICA DE BOMBEAMENTO E DINÂMICA DE MICROMASERS <i>Guerra, E. S., Zagury, N.</i>	253
10:10	BOMBEIO ÓPTICO DO CÁLCIO 3P <i>Gomide, J. V. B., Cruz, F. C. da, Garcia, G. A., Pereira, D., Scalabrin, A.</i>	253

Preparação e Caracterização de Polímeros (POL, MAT)

Coordenador: Maria Cristina dos Santos

Local: Sala 04

08:30	SEMICONDUCTORES ORGÂNICOS COM GAP DE ENERGIA VARIÁVEL <i>De-Paoli, M. A., Micaroni, L., Martini, M., Rocco, A. M., Peres, R. C. D., Duek, E. A. R., Gorenstein, A.</i>	274
08:50	ESTUDO DAS PROPRIEDADES ELÉTRICAS DE COMPÓSITOS POLIURETANO/POLIANILINA <i>Akcelrud, L., Gonçalves, D., Bulhões, L. O. S., Faria, R. M.</i>	274
09:10	PREPARAÇÃO DE FILMES DE LANGMUIR DE POLÍMEROS CONDUTORES COM NATUREZA MISTA <i>Santos, C. G. dos, Melo, C. P. de, Maior, R. S.</i>	275
09:30	CARACTERIZAÇÃO DA DOPAGEM ELETROQUÍMICA DE FILMES DE POLIANILINA COM MICROBALANÇA A CRISTAL DE QUARTZO. <i>Torresi, R. M., Torresi, S. I. C. de, Gabrielli, C., Keddani, M., Takenouti, H.</i>	275
09:50	Moléculas Modelo Para o Estudo de Estrutura Eletrônica de Polímeros: Poliacetileno, Polimetilmetacrilato e Poli(3hexil)tiofeno <i>Correia, N., Brito, A. N. de, Svensson, S.</i>	275

- 10:10 POLARONS E EFEITOS DE CORRELAÇÃO EM PASTILHAS DE P3MT DOPADAS COM ClO_4^- OBSERVADOS EM MEDIDAS DE EPR.
Pawlicka, A., Nascimento, O. R., Faria, R. M., Pereira, E. C., Bulhões, L. O. S., Walmsley, L. 276

Aplicações de Ressonância Magnética (RES)

Coordenador: Gaston Barberis

Local: Sala 02

- 08:30 RESSONÂNCIA FERROMAGNÉTICA CONVENCIONAL (RFM) E FOTOTERMICAMENTE MODULADA (RFM-FM) EM AMOSTRAS NA FORMA DE PÓ
Medina Neto, A., Gandra, F. G., Romano, J. A., Cortez, A. C. R. da M., Silva, E. C., Galembeck, F., Vargas, H., Nikitov, S. A. 281
- 08:50 Interpretação de medidas de EPR em PbTe:RE (RE = Er^{3+} , Dy^{3+} e Yb^{3+}).
Gennaro, A. M., Martins, G. B., Rettori, C., Barberis, G. E., An, C. Y. 281
- 09:10 ESTUDO DOS MECANISMOS TL DO $CaSO_4:DY$
Mauricio, C. L. P., Onori, S. 282
- 09:30 RPE DE ÍONS Er^{3+} EM MONOCRISTAIS DE $Ca_3Ga_2Ge_3O_{12}$.
Moraes, I. J., Souza, R. R. de, Terrile, M. C. 282
- 09:50 DEPENDÊNCIA COM CAMPO MAGNÉTICO DA ABSORÇÃO DE Cr^{+3} EM $GdAlO_3$
Basso, H. C., Cruz, G. K., Carvalho, R. A., Ruffino, M., Terrile, M. C. 282
- 10:10 APLICAÇÃO DE IMAGENS POR TOMOGRAFIA DE RMN E RAIOS X NA CARACTERIZAÇÃO DO FENÔMENO "FINGERING" EM UM MEIO POROSO*
Durand, A. P., Tannus, A., Panepucci, H. C., Crestana, S. 283

Workshop: Novos Materiais Semicondutores (SEM)

Coordenador: Belita Koiller

Local: Sala 01

- 08:30 Introdução
- 08:40 Semiconductor Doping (Silicon as a doping element in III-V semiconductors)
Oliveira, A. G. de 298
- 09:15 DINÂMICA MOLECULAR DE PRIMEIROS PRINCÍPIOS COM FORMA DE CÉLULA VARIÁVEL
Wentzcovitch, R. M. 298
- 09:50 Propriedades ópticas e elétricas de silício poroso
Basmaji, P., Rossi, J. C., Grivickas, V., Surdutovich, G., Vitlina, R., Kolenda, J., Matvienko, B., Bernussi, A. 299

Caracterização de Superfícies e Filmes Finos (SUF)

Coordenador: Wido H. Schreiner

Local: Sala 10

- 08:30 X-RAY CHARACTERIZATION OF MULTILAYER FILMS
Schmidt, J. E. 335
- 09:10 ESTUDO DA ESTRUTURA CRISTALINA DE FILMES FINOS EPITAXIAIS Cu/Si UTILIZANDO TÉCNICAS DE ANÁLISE DE RAIOS-X
Mosca Jr, D. H., Mazzaro, I., Schreiner, W. H., Mors, P. M. 335
- 09:30 Distância Crítica para Ionização no Field Ion Microscope
Castilho, C. M. C. de 335

- 09:50 INVESTIGATION OF THE DEBYE TEMPERATURE AND OPTICAL POTENTIAL OF THE CdTe(110) AND InSb(110) SURFACES BY LEED
Riãño, L. P. N., Soares, E. A., Carvalho, V. E. de..... 336
- 10:10 Análise elementar de filmes finos eletrocromicos por PIXE e RBS no Laboratório de Análise de Materiais por Feixes Iônicos, LAMFI- USP.
Tabacniks, M. H., Martins, J. V., Gorenstein, A...... 336

Segundo Período da Manhã 11:00 - 12:30**Espalhamento e Colisões II (ATO)**

Coordenador: Antonio Luciano de A. Fonseca

Local: Sala 02

- 11:00 ALGORITMO TOTALMENTE TRIDIMENSIONAL PARA O CÁLCULO DA SEÇÃO DE CHOQUE DA FOTODISSOCIAÇÃO DE H_2O .
Soares Neto, J. J. 74
- 11:20 Identificação dos cruzamentos entre as curvas de potencial em reações 66 dupla captura eletrônica de Xe^{4+} colidindo em Ne
Almeida, D. P. 74
- 11:40 DEPENDÊNCIA COM O PARÂMETRO DE IMPACTO DO PROCESSO DE PERDA ELETRÔNICA
Montenegro, E. C. 74
- 12:00 PRODUÇÃO DE UM ALVO DE HIDROGÊNIO DISSOCIADO PARA COLISÕES ATÔMICAS
Sant'Anna, M. M., Montenegro, E. C., Sigaud, G. M., Mayerhof, W. E., Shah, M. B. 74

Crescimento e Caracterização I (CCP)

Coordenador: Nilson Dias Vieira Junior

Local: Sala 12

- 11:00 UM NOVO SISTEMA PARA CRESCIMENTO DE CRISTAIS POR SOLUÇÃO COM CONTROLE DA TAXA DE EVAPORAÇÃO
Carvalho, J. F., Hernandez, A. C., Andreeta, J. P. 117
- 11:20 ESTUDO DE ENVELHECIMENTO EM CERÂMICAS FERROELÉTRICAS DE $Pb(Zr, Ti)O_3$
Lente, M. H., Garcia, D., Eiras, J. A. 117
- 11:40 TRANSIÇÃO DE FASE NO KDP INDUZIDA POR CAMPO ELÉTRICO
Moreira, S. G. C., Melo, F. E. A. 117
- 12:00 PREPARAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE VIDROS DA FAMÍLIA $Li_2O-TiO_2-TeO_2$
Rojas, R. F. C., Barbosa, L. C., Reynoso, V. C., Alves, O. L. 118

Universalidade e Leis de Escala (EST)

Coordenador: Alvaro Ferraz

Local: Sala 04

- 11:00 EXPOENTES CRÍTICOS PARA RANDOM-WALKS E SELF-AVOIDING WALKS DIRECIONADOS EM FRACTAIS.
Reis, F. D. A. A., Riera, R. 147
- 11:20 POLÍMEROS: CONFIGURAÇÃO AUTO-SIMILAR NO PROBLEMA DE ADSORÇÃO.
Izzo, D. 148
- 11:40 Defect Theory of Solid-Liquid Transition and Interface
ferraz, A. 148
- 12:00 ASPECTOS TOPOLÓGICOS E GEOMÉTRICOS NA DEFORMAÇÃO AXIAL DE SISTEMAS COM SIMETRIA ESFÉRICA
Gomes, M. A. de F., Melo, G. da S. V. de 148

Sensores a Fibra Ótica (INS)

Coordenador: Luiz Carlos Guedes Valente

Local: Sala 07

11:00	MEDIDA DO DIÂMETRO DE UM FEIXE DE LASER UTILIZANDO UM NÚCLEO DE FIBRA ÓTICA COMO 'PINHOLE' PARA SE FAZER A VARREDURA <i>Ribeiro, R. M., Margulis, W.</i>	182
11:20	SENSOR A FIBRA ÓTICA PARA ESTRUTURAS EM CONCRETO <i>Silva, R. B. da, Zângaro, R. A., Alencar, J., Silveira Jr, L.</i>	182
11:40	Processamento de sinal de girômetros a fibra ótica <i>Carrara, S. L. A., Almeida, J. C. J. de, Fugivara, S., Zier Jr, H. J., Bianchi, J. C.</i>	182
12:00	SENSORES DE TENSÕES ELÉTRICAS E MECÂNICAS EM FIBRAS ÓPTICAS <i>Bezerra, V. M., Pacheco, M. T.</i>	183

Análise Estrutural de Liomesofases (LIQ)

Coordenador: Rosangela Itri

Local: Sala 05

11:00	Structure analysis of cubic phases of lipid-containing systems: freeze fracture electron microscopy <i>Delacroix, H., Gulik-Krzywicki, T., Luzzati, V., Mariani, P.</i>	193
11:40	ESTUDO DE FASES NEMÁTICAS CILÍNDRICAS (N_c) POR ESPALHAMENTO DE RAIOS-X <i>Teixeira, C. V., Itri, R.</i>	193
12:00	Comportamento do Sistema Ternário SLS/DeOil/ H_2O em Função da Concentração de Decanol <i>Santin Filho, O., Amaral, L. Q. do</i>	193

Sistemas Eletrônicos Fortemente Correlacionados (MMM)

Coordenador: Amós Troper

Local: Sala 03

11:00	SUSCEPTIBILIDADE DE DUAS IMPUREZAS MAGNÉTICAS EM MEIO METÁLICO <i>Oliveira, W. C. de, Mello, J. L. N. de, Oliveira, L. de</i>	221
11:20	Metal-Insulator Transition in the Extended Hubbard Model <i>Lagos, R. E., Lara, G. A., Cabrera, G. G.</i>	222
11:40	MOMENTUM DISTRIBUTION FUNCTION OF THE TWO-DIMENSIONAL HUBBARD MODEL <i>Boerner, W., Keller, J., LEAL, C. E.</i>	222
12:00	Effective Vertex Function for an Electron-Hole Pair at Very Low Energy Scale <i>Ferraz, A., Ohmura, Y.</i>	222

Aprisionamento de Átomos e Partículas (OTI, ATO)

Coordenador: S. C. Zilio

Local: Sala 06

11:00	LIMITANTES EM DENSIDADES PARA ARMADILHAS MAGNETO-ÓPTICAS DE ÁTOMOS <i>Bagnato, V. S., Marcassa, L. G., Zilio, S. C.</i>	253
11:20	ESPECTROSCOPIA DE ÁTOMOS ULTRA FRIOS COLIDINDO <i>Bagnato, V. S., Marcassa, L. G., Wang, Y., Weiner, J.</i>	254
11:40	SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE ARMADILHAS MAGNETO-ÓPTICAS USANDO FEIXES GAUSSIANOS <i>Lima, E. G., Oliveira, F. A. M. de, Tabosa, J. W. R., Revoredo, W. C., Vianna, S. S.</i>	254

- 12:00 Captura e manipulação de partículas com o laser de Nd:YAG
 Correia, A. L., Cesar, C. L., Penna, A., Randi, S. 254

Defeitos Impurezas e Dopagem (SEM)

Coordenador: Luiz Eduardo M. C. Oliveira

Local: Sala 01

- 11:00 REDUÇÃO DA CONCENTRAÇÃO APARENTE DE DOPANTES EM CAPACITORES MOS APÓS EXPOSIÇÃO À RADIAÇÃO IONIZANTE
 Silva Junior, E. F. da, Vasconcelos, E. A. de 299
- 11:20 ESTADOS HIDROGENOÍDES EM FIOS QUÂNTICOS CILÍNDRICOS DE $GaAs - (Ga, Al)As$
 Latgé, A., Oliveira, L. E., Montenegro, N. 299
- 11:40 ESPECTRO DE FOTOLUMINESCÊNCIA RELACIONADO A IMPUREZAS ACEITADORAS EM POÇOS QUÂNTICOS DE $GaAs-(Ga,Al)As$ SOB CAMPO ELÉTRICO APLICADO
 Santiago, R. B., Castro, J. A. e, Oliveira, L. E. 300
- 12:00 Hardness and Softness no estudo de aglomerados moleculares de $GaAs$
 Piquini, P. C., Fazzio, A., Dal Pino Jr, A. 300

Supercondutores de Alta Temperatura (SUC)

Coordenador: Paulo Pureur

Local: Sala 11

- 11:00 PROPRIEDADES SUPERCONDUTORAS DE $YBaCuO-Ag$
 Ghivelder, L., Castillo, I. A., Rodrigues Jr, P., Pureur, P., Cohen, L., Dhalle, M., Caplin, D. 325
- 11:20 IRREVERSIBILIDADE MAGNÉTICA EM COMPÓSITOS NÃO-RANDÔMICOS $Ag/YBaCuO$ (d)
 Schaf, J., Rodrigues Jr, P., Pureur, P., Guivelder, L., Reich, S. 325
- 11:40 Superconducting glass behavior and frustration in polycrystalline $Sm_{2-x}Ce_xCuO_{4-y}$
 Jardim, R. F., Andrade, M. C. de, Maple, M. B., Early, E. A., Stroud, D. 326
- 12:00 Preparation, formation kinetics, and properties of polycrystalline $Ln_{2-x}Ce_xCuO_{4-y}$; $Ln = Nd, Sm$; ($0 \leq x \leq 0.17$); obtained from a sol-gel precursor
 Jardim, R. F., Ben-Dor, L., Maple, M. B. 326

Efeitos de Irradiação em Filmes (SUF)

Coordenador: Carlos Alberto dos Santos

Local: Sala 10

- 11:00 MODIFICAÇÃO DE FASES HOMOGÊNEAS DE FILMES FINOS INDUZIDOS POR IRRADIAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO POR MEDIDAS DE RESISTIVIDADE ELÉTRICA "IN-SITU"
 Miranda, R. M. N., Vasconcellos, M. A. Z., Baibich, M. N., Amaral, L., Scherer, C., Costa, J. A. T. B. da. 337
- 11:20 MODIFICAÇÕES ESTRUTURAIS DE FILMES DE $a-C:H(N)$ INDUZIDA POR IMPLANTAÇÃO IÔNICA OU TRATAMENTO TÉRMICO.
 Achete, C., Franceschini, D., Freire Jr, F. L. 337
- 11:40 EFEITO DA IMPLANTAÇÃO DE ARGÔNIO EM AÇOS CARBONO PREVIAMENTE NITRETADOS EM PLASMA.
 Santos, C. A. dos 337
- 12:00 Filmes Finos de TiN - Proteção contra Corrosão versus Microestrutura
 Hübler, R., Schreiner, W., Baumvol, I., Alberts, L., Wolf, G. 338

Tarde (Posters) 14:00 - 16:00

Física Atômica e Molecular: Teoria I (ATO)

Coordenador: Nilo Makiuchi

Local: Modulo E08

P01	Cálculo de espalhamento para sistemas diatômicos via formulação variacional da matriz R <i>Gargano, R., S. Neto, J. J.</i>	75
P02	ESTUDO DA ESTRUTURA ELETRÔNICA DOS FULERENOS <i>Brito, A. N. de, Makiuchi, N.</i>	75
P03	Cálculo das probabilidades de transição entre os estados vibracionais de H ₂ no espalhamento colinear H-H ₂ dependente do tempo. Uma abordagem na descrição de interação. <i>Sousa, A. A., Rocha Filho, T. M. da.</i>	75
P04	ESTUDO DAS OSCILAÇÕES AMORTECIDAS NO SINAL OPTOGALVÂNICO NUMA DESCARGA LUMINOSA SUBNORMAL EM ARGÔNIO. <i>Braun, L. F. M., Lisbôa, J. A.</i>	76
P05	DEPENDÊNCIA DA APROXIMAÇÃO SEMICLÁSSICA COM OS PARÂMETROS DE UM SISTEMA UNIDIMENSIONAL <i>Luz, M. G. E. da, Cizs, L. S., Duarte, D., Souza, M. A. S. de</i>	76
P06	Efeito dos processos de multifônons no espalhamento inelástico de nêutrons lentos em hidretos metálicos. <i>Mestnik Filho, J., Moura, J. I. de.</i>	76
P07	DETERMINAÇÃO SEMI-EMPIRICA DO ELEMENTO DE MATRIZ PARA IONIZAÇÃO MULTIPLA DE GASES NOBRES E VAPORES METALICOS POR COLISÃO ELETRONICA. <i>Godinho, C. F. L., Almeida, D. P.</i>	76
P08	TERMODINÂMICA E ESTRUTURA DE LÍQUIDOS ORGÂNICOS POR SIMULAÇÃO DE MONTE CARLO <i>Freitas, L. C. G., Barlette, V. E.</i>	77
P09	ESTRUTURA ELETRÔNICA DE MOLÉCULAS BIOLÓGICAS <i>Dardenne, L. E., Makiuchi, N.</i>	77
P10	EXTINÇÃO MONOCROMÁTICA EM CHAMAS. <i>Ferrari, C. A., Nagai, Y. E., Penna, A. F. S.</i>	77
P11	Estrutura Eletrônica e Geométrica dos Clusters de Ga _n As _m (n,m=1-3) <i>Piquini, P. C., Fazzio, A., Canuto, S.</i>	78
P12	MODELOS TEÓRICOS PARA O COMPORTAMENTO DO RAIOS DA NUVEM DE ÁTOMOS APRISIONADOS EM ARMADILHAS MAGNETO-ÓTICAS <i>Milori, D. M. B. P., Araujo, M. T. de, Guedes, I., Zilio, S. C., Bagnato, V. S.</i>	78

Física Atômica e Molecular: Teoria II (ATO)

Coordenador: Antonio Luciano de A. Fonseca

Local: Modulo E09

P01	Aplicação do método multicanal de Schwinger para a excitação do H ₂ por impacto de pósitrons de baixa energia <i>Lino, J. L. da S., Germano, J. S. E., Lima, M. A. P.</i>	78
P02	UM ESTUDO SCF-LCAO-INDO/CI DE COMPLEXOS FORMADOS POR P ₅ , P ₆ , C ₆ H ₆ e C ₅ H ₅ COM Cr e Fe. <i>Werneck, A. dos S., Makiuchi, N., DavidVianna, J. e.</i>	78

P03	Excitações eletrônicas em CH_4 por impacto de pósitrons de baixa energia utilizando o método Multicanal de Schwinger (SMC). <i>Silva, E. P. da, Germano, J. S. E., Lino, J. L. S., Lima, M. A. P.</i>	79
P04	ESTUDO DE RESSONÂNCIAS EM SEÇÕES DE CHOQUE DE ESPALHAMENTO DE ELÉTRONS PELA MOLECULA DE H_2 : DISCUSSÃO E ANÁLISE ATRAVÉS DA DIAGONALIZAÇÃO DE TERMOS DA HAMILTONIANA <i>Sartori, C. S., Lima, M. A. P.</i>	79
P05	O MÉTODO DE LANZOS E SUA COMPARAÇÃO COM A TEORIA DE PERTURBAÇÕES EM MECÂNICA QUÂNTICA <i>Alves, D., Cabrera, G.</i>	79
P06	ESPALHAMENTO DE ELÉTRONS PELO RADICAL OH <i>França, A., Paixão, F. J. da, Lima, M. A. P.</i>	79
P07	FOTOINIZAÇÃO DE CAMADA INTERNA DA MOLÉCULA DE ETILENO <i>Ribeiro, E. M. S., Mu-Tao, L., Machado, L. E., Brescansin, L. M.</i>	80
P08	ESPALHAMENTO DE ELÉTRONS POR MOLÉCULAS PESADAS: APLICAÇÕES DO MÉTODO MULTICANAL DE SCHWINGER COM PSEUDO-POTENCIAIS <i>Policastro, A. P., Ferreira, L. G., Lima, M. A. P., Bettega, M. H. F.</i>	80
P09	ESPALHAMENTO ELÁSTICO DE ELÉTRONS DE ENERGIAS BAIXAS E INTERMEDIÁRIAS POR MOLÉCULAS DE FORMALDEÍDO <i>Machado, A. M., Machado, L. E., Mu-Tao, L.</i>	80
P10	FOTOIONIZAÇÃO DE MOLÉCULAS DE H_2S NA FAIXA VUV <i>Monzani, A. L., Ribeiro, E. M. S., Leal, E. P., Mu-Tao, L., Machado, L. E., Brescansin, L. M.</i>	80
P11	ESPALHAMENTO ELÁSTICO DE ELÉTRONS DE ENERGIAS BAIXAS E INTERMEDIÁRIAS POR MOLÉCULAS DE H_2S <i>Leal, E. P., Machado, L. E., Mu-Tao, L., Brescansin, L. M.</i>	81
P12	Um Acoplamento Gravitacional Tipo Spin-Órbita. <i>Monaco, R. E. L., Cabrera, G. G.</i>	81
P13	THEORETICAL STUDY OF Ti_8C_{12} : OPTICAL SPECTRA, ELECTRONIC AND GEOMETRIC STRUCTURES <i>Lima, G. A. R., Watari, K., Kintop, J., Fazzio, A.</i>	81

Cristalografia Inorgânica (CRI)

Coordenador: Carlos de O. Paiva Santos

Local: Modulo E13

P01	CARACTERIZAÇÃO DE SUPER-REDES DE a-Si:H/a-Ge:H POR DIFRAÇÃO DE RAIOS-X <i>Velasquez, E. L. Z., Fantini, M. C. A.</i>	131
P02	INFLUÊNCIA DE SEMENTES ISOMÓRFICAS NA FORMAÇÃO DA FASE PZT OBTIDA A PARTIR DE SOLUÇÃO ORGÂNICA DE CITRATOS <i>Zaghe, M. A., Santos, C. de O. P., Varela, J. A., Longo, E.</i>	131
P03	INFORMAÇÕES ESTRUTURAIS DE LIGANTES DE Sn (FRAGMENTOS EM COMPLEXOS HETERO-BIMETÁLICOS) <i>Guimarães, B. G., Speziali, N. L., Silva, R. M., Aguiar Junior, S. R., Duarte, P. H.</i>	131
P04	QUANTIZAÇÃO DE REFRAATÓRIOS SINTÉTICOS DE DOLOMITA POR DIFRAÇÃO DE RAIOS X <i>Ribeiro, W. de S., Santos, C. de O. P., Varela, J. A., Longo, E.</i>	132
P05	Quasicristais e fases relacionadas no sistema Al-Cu-Fe <i>Balzuweit, K.</i>	132

Fluidos Superiônicos, Superfícies, Interfaces, Polímeros e Percolação (EST)

Coordenador: Mauricio D. Coutinho-Filho

Local: Modulo E05

P01	SIMULAÇÃO DE LÍQUIDOS MOLECULARES POR MONTE CARLO REVERSO <i>Silva, F. L. B. da, Souza, A. R. de, Quintale Junior, C., Degrève, L.</i>	148
P02	O FLUÍDO CLÁSSICO NO ESQUEMA STLS. <i>Silveira, H. V. da, Studart Filho, N.</i>	149
P03	CRESCIMENTO POR DEPOSIÇÃO GAUSSIANA E DIFUSÃO. <i>Machado, R. F., Moreira, J. G.</i>	149
P04	Correlações orientacionais solvente-soluto em soluções aquosas de Li^+ <i>Degrève, L., Quintale Junior, C.</i>	149
P05	Compressibilidade de Filmes de Neônio Adsorvido em Grafoil <i>Diehl, L. M. A., Lerner, E., Chaves, F. A. B.</i>	149
P06	CONDUTORES SUPERIÔNICOS: UM ESTUDO POR DINÂMICA MOLECULAR <i>Oliveira, M. C. de, Rino, J. P.</i>	150
P07	INFLUÊNCIA DE INTERAÇÕES LATERAIS NO COMPORTAMENTO CRÍTICO DE UM MODELO DE REAÇÃO MONÔMERO-DÍMERO NUMA SUPERFÍCIE <i>Satulovsky, J. E., Albano, E. V.</i>	150
P08	Transição de fase em fases adsorvidas. <i>Borin, I. A., Degrève, L.</i>	150
P09	A orientação relativa entre moléculas de água na camada de solvatação do Li^+ . <i>Quintale Junior, C., Degrève, L.</i>	151
P10	POLÍMEROS EM REDES ANISOTRÓPICAS <i>MACHADO, K. D., STILCK, J. F.</i>	151
P11	UMA ANÁLISE ATRAVÉS DE SÉRIES DA TRANSIÇÃO DE COLAPSO EM POLÍMEROS RAMIFICADOS <i>Neves, U. P. da C., Onody, R. N.</i>	151
P12	PROPRIEDADES CRÍTICAS DE MODELOS DE PERCOLAÇÃO DE FASES QUE COMPETEM PARA SÓLIDOS IRRADIADOS. <i>Costa, J. A. T. B. da.</i>	152
P13	PERCOLAÇÃO POR INVASÃO EM UM MEIO POROSO <i>Onody, R. N.</i>	152
P14	PERCOLAÇÃO E ESTADOS EPIDÊMICOS <i>Santos, C. B. dos, Silva, M. A. A. da, Caliri, A.</i>	152
P15	ESTADOS EXCITADOS COM DOIS DESVÍOS DE SPIN EM UMA CADEIA FERROMAGNÉTICA SEMI-INFINITA COM UM ÁTOMO ADSORVIDO NO EXTREMO. <i>Gutterres, R. F., Selzer, S., Majlis, N.</i>	152
P16	SIMULAÇÃO MONTE CARLO DO BENZENO LÍQUIDO E CÁLCULO DE PROPRIEDADES TERMO-DINÂMICAS E ELETRÔNICA. <i>Coutinho, K., Canuto, S.</i>	153
P17	DINÂMICA MOLECULAR-APLICAÇÃO A UM GÁS IDEAL E ESTENÇÕES. <i>Pena, M. J. F., Costa, B. V. da</i>	153
P18	ELÉTRONS SUPERFICIAIS EM FILMES DE HÉLIO : UMA SIMULAÇÃO POR DINÂMICA MOLECULAR <i>Silva, L. C. da, Rino, J. P.</i>	153

P19	Determinação da energia de adsorção por simulação <i>Degrève, L.</i>	153
Sistemas Fora do Equilíbrio: Dinâmica, Autômatos Celulares, Crescimento (EST)		
Coordenador: Rita M. C. de Almeida		
Local: Modulo E03		
P01	Um modelo de crescimento para melanoma <i>Boschetti, S. R., Martins, M. L., Vilela, M. J.</i>	154
P02	MODELO DE DESAGREGAÇÃO MULTI-PARTÍCULA DO TIPO DLA <i>Lenke, N.</i>	154
P03	SIMULAÇÃO DA DINÂMICA DE LIGAS BINÁRIAS BIDIMENSIONAIS COM AUTOMATOS CELULARES <i>Palandi, J., Almeida, R. M. C. de, Iglesias, J. R., Kiwi, M.</i>	154
P04	PROTÓTIPO PARA EFEITOS DE MEMÓRIA NA EVOLUÇÃO TEMPORAL DE DANOS <i>Tsallis, C., Tamarit, F. A., Souza, A. M. C. de</i>	154
P05	Um modelo de aut omatos celulares para o controle transcricional de genes <i>Sales, J. A., Martins, M. L.</i>	155
P06	MODELO DINÂMICO PARA O PARLAMENTO <i>Oliveira, P. M. C. de, Oliveira, S. M. de, Penna, T. J. P.</i>	155
P07	SIMULAÇÃO DE UMA TORNEIRA PINGANDO <i>Penna, T. J. P., Oliveira, P. M. C. de</i>	155
P08	ESPECTRO DE EXPOENTES DE LYAPUNOV DE SÉRIES TEMPORAIS. <i>Oiwa, N. N., Fiedler-Ferrara, N.</i>	155
P09	Sincronismo em Redes de Osciladores <i>Massunaga, M. S., Bahiana, M.</i>	156
P10	EQUIVALÊNCIA ENTRE AS DINÂMICAS DE GLAUBER E DE BANHO TÉRMICO EM SIMULAÇÕES DE PROPAGAÇÃO DE DANO EM VIDROS DE SPIN <i>Almeida, R. M. C. de</i>	156
P11	DINÂMICA DO MODELO DE ANISOTROPIA UNIAXIAL ALEATÓRIA <i>Dominguez, D. R. C., Theumann, W. K.</i>	156
P12	COMPETIÇÃO ENTRE AS DINÂMICAS DE GLAUBER E KAWASAKI NO MODELO DE ISING ANTI-FERROMAGN 'ETICO. <i>GRANDI, B. C. S., FIGUEIREDO, W., PLASCAK, J. A. A. O.</i>	156
P13	MODELO DE ISING CINÉTICO NUM CAMPO ALEATÓRIO. <i>PAULA, G. L. S., FIGUEIREDO, W.</i>	157
P14	TEORIA CINÉTICA: UMA ALTERNATIVA AOS MÉTODOS DE CHAPMAN-ENSKOG E GRAD. <i>Kremer, G. M.</i>	157
P15	TEORIA CINÉTICA E FENOMENOLÓGICA PARA AS EQÇÕES DE BURNETT DE GASES MOLECULARES <i>Fernandes, A. S., Kremer, G. M.</i>	157
P16	ONSAGER-CASIMIR RECIPROCITY RELATIONS FOR OPEN GASEOUS SYSTEMS AT ARBITRARY RAREFACTION. <i>Sharipov, F.</i>	157
P17	DINÂMICA NÃO-LINEAR DO AUTÔMATO CECULAR "JOGO DA VIDA" <i>Garcia, J. B. C., Gomes, M. A. de F., Sales, T. R. de M., Jyk, T. I., Ren, T. I.</i>	157

P18 O MÉTODO DO GRADIENTE NO AUTÔMATO CELULAR DE DOMANY-KINZEL <i>Zebende, G. F., Penna, T. J. P.</i>	158
P19 Análise de transformações de simetria e integrabilidade de sistemas hamiltonianos. Aplicações a sistemas bi e tri-dimensionais. <i>Figueiredo Neto, A. D. de, Cadilhe, M. W., Rocha Filho, T. M. da</i>	158
P20 PROPAGAÇÃO DE DANOS PARA O MODELO DE ISING NA REDE TRIANGULAR: UM ESTUDO COM DIFERENTES DINÂMICAS ESTOCÁSTICAS <i>Souza, E. S., Mariz, A. M., Nobre, F. D.</i>	158
Aplicações (INS)	
Coordenador: Sidnei L. A. Carrara	
Local: Modulo E04	
P01 ESTÁGIO DE AMPLIFICAÇÃO PARA LASER Nd:YAG CONTÍNUO <i>Spina, F. D., Lima, C. J. de, Silveira Jr, L., Zângaro, R. A.</i>	183
P02 GERAÇÃO DE PULSOS ÓPTICOS ULTRACURTOS COM LASER DE Ti:Al ₂ O ₃ <i>Marquezini, M. V., Cesar, C. L.</i>	183
P03 MONTAGEM ÓTICA PARA MEDIDAS COM CAMPO MAGNÉTICO <i>Cruz, G. K., Basso, H. C.</i>	183
P04 UTILIZAÇÃO DE SF ₆ COMO ELEMENTO PASSIVO EM CAVIDADE DE LASER DE CO ₂ -TEA <i>Oliveira, A. C. de, Barreta, L. G., Miyakawa, W.</i>	184
P05 FORNO DE LÂMPADAS PARA TRATAMENTOS TÉRMICOS RÁPIDOS E ANÁLISE TÉRMICA DE MATERIAIS <i>Hoyos, F. J. de, Gama, S., Yagueshita, E. M.</i>	184
P06 INTERFACEAMENTO DO MICROCOMPUTADOR COM EXPERIMENTOS DE ESPECTROSCOPIA DE LUMINESCÊNCIA POR FIBRA ÓPTICA <i>Dornelas, J. C. A., Li, M. S.</i>	184
P07 Controlador de Sensor de Imagem CCD <i>Menezes, L. de S., Barthem, R. B.</i>	184
P08 HERMETICALLY PACKAGED SEMICONDUCTOR OPTICAL AMPLIFIER FOR APPLICATION IN SINGLEMODE FIBER SYSTEMS <i>Barbosa, F. R., Coral, C., Caumo, J. R., Flacker, A.</i>	185
P09 CÂMERA SEMI ANECÓICA PARA MEDIÇÃO DE INTENSIDADE E POTÊNCIA SONORA. <i>Maule, C. R. N., Alvey, A. M.</i>	185
P10 DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS ÓTIMOS DE UM PULSO LASER DE CO ₂ EM TECIDOS DENTÁRIOS <i>Santos, M. dos, Furuzawa, S. K., Zângaro, R. A.</i>	185
P11 Detector de Íons Rápidos Utilizando Conversor <i>Lanza, A. C., Koide, K., Macchione, E. L. A., Hirata, J. H., Vasconcelos, S. S., Dietzsch, O.</i>	185
P12 DETECTOR PARA CORRENTE DE PRÓTONS COM O USO DE UM CRISTAL PEROVSKITE <i>Cruvinel, P. E., Mascarenhas, S., Miranda, J., Flocchini, R. G.</i>	186
P13 SIMULAÇÃO DO DESTINO DE UM SOLUTO ORGÂNICO EM UM MEIO POROSO NATURAL. <i>Crestana, S., Giuliano, A. D.</i>	186
P14 SISTEMA PROGRAMADO PARA O CONGELAMENTO DE EMBRIÕES <i>Cruvinel, P. E., Rabello, L. M., Bertucci Neto, V., Casagrande, J. F., Almeida, C. A. de, Bem, A. R. de, Queiroz, F. H.</i>	186

P15	MEDIDOR DE NÍVEL PARA LÍQUIDOS VIA GUIA ÓTICO <i>Silva, R. B. da, Zângaro, R. A., Silveira Jr, L.</i>	187
P16	ESPECTROSCOPIA FOTOACÚSTICA EM GASES: CARACTERIZAÇÃO DE SISTEMAS <i>Parma, M., Scalabrin, A., Pereira, D.</i>	187
P17	Realização radiométrica da candela através do método de auto calibração de fotodiodos de Si <i>Pimentel, R., Barthem, R. B.</i>	187
P18	FATORES DE AMPLIFICAÇÃO EM CONTADORES PROPORCIONAIS COM USO DE GEOMETRIA MULTIFILAR <i>Soares, I. M., Almeida, D. P.</i>	188
P19	UTILIZAÇÃO DA CÉLULA ELETROÓPTICA PARA MEDIÇÃO DE TENSÕES ELÉTRICAS ELEVADAS <i>Lima, C. J. de, Spina, F. D., Lemes, J. C.</i>	188
P20	CONSTRUÇÃO DE UM LASER DE CO ₂ -TEA <i>Oliveira, A. C. de</i>	188
P21	DESENVOLVIMENTO DE UMA FONTE DE POTENCIA VERSÁTIL PARA CARACTERIZAÇÃO DE MAÇARICOS DE PLASMAS <i>Cunha, A. G., Barreto, M. T., Francisco, T. B. B. e</i>	188

Preparação e Caracterização de Materiais de Interesse Tecnológico (MAT)

Coordenador: José Mestnik Filho

Local: Modulo E12

P01	EFEITO DA MIGRAÇÃO IÔNICA INDUZIDA POR UM CAMPO ELÉTRICO EXTERNO SOBRE A PROPAGAÇÃO DE FRATURAS E A RUPTURA DIELÉTRICA DO VIDRO. <i>Lepienski, C. M.</i>	207
P02	ESTUDO COMPARATIVO DA CONSTANTE DIELÉTRICA DE UM CAPACITOR DE BaTiO ₃ A PARTIR DE PÓS PRODUZIDOS POR TÉCNICAS DIFERENTES. <i>Bento, C. A., Machado, A. J. S., Holanda, J. N. F. de</i>	207
P03	CARACTERIZAÇÃO DIELÉTRICA DO TITANATO ZIRCONATO DE CHUMBO PURO E SEMENTADO <i>Zaghet, M. A., Las, W. C., Varela, J. A., Mario Cilense, M., Toledo, M. P. de, Dordor, P.</i>	208
P04	DESEMPENHO TÉRMICO DE UMA PAREDE CONVENCIONAL <i>Andrade, T., Nakamura, O., Freire, T.</i>	208
P05	DETERMINAÇÃO DO COEFICIENTE DE AUTODIFUSÃO CATIONICA NO ÓXIDO UO ₂ <i>Cota, A. B., Ferraz, W. B., Sabioni, A. C. S., Santos, A. M. M. dos</i>	208
P06	Estudo do Tempo de Solubilização das Partículas de MnS no aço Fe-3%Si. <i>RODRIGUES, V. A., MONTEIRO, W. A., FERREIRA, N. A. M.</i>	208
P07	OTIMIZAÇÃO DE PÓ DE TÂNTALO PARA CAPACITORES ELETROLÍTICOS <i>Freitas, D. de, Holanda, J. N. F. de</i>	209
P08	CRESCIMENTO E DETERMINAÇÃO DE ESTRUTURA DE MONOCRISTAIS DE BaCuO ₂ <i>Hernandes, A. C., Lima, C. J. de, Andreeta, M. R. B., Ferraz, M. C. C., Mascarenhas, Y. P., Basso, H. C.</i>	209
P09	MÉTODO DE RIETVELD APLICADO AO ESTUDO DA REAÇÃO DE FORMAÇÃO DO Y ₂ BaCuO ₅ <i>Ferraz, M. C. C., Mascarenhas, Y. P., Basso, H. C.</i>	210
P10	EFEITOS ESTRUTURAIS E ELÉTRICOS MODIFICADOS PELO PROCESSAMENTO DA CERÂMICA SUPERCONDUTORA DO SISTEMA Bi:Sr:Ca:Cu:O <i>Santos, D. I. dos, Rubo, E. A. A., Carvalho, C. L. de</i>	210

P11 ESTUDO DA CINÉTICA DE REAÇÃO DE FORMAÇÃO DO YBACUO UTILIZANDO O MÉTODO DE RIETVELD <i>Ferraz, M. C. C., Mascarenhas, Y. P., Basso, H. C.</i>	210
P12 ESTUDO DO DIAGRAMA DE FASES PSEUDO BINÁRIO $YO_{1,5} - CuO_x$ <i>Machado, A. J. S., Jardim, R. F.</i>	210
Sistemas Fortemente Correlacionados (MMM)	
Coordenador: Amir Caldeira	
Local: Modulo E01	
P01 RENORMALIZED LINKED-CLUSTER EXPANSION FOR STRONGLY CORRELATED FERMION SYSTEMS <i>Bartkowiak, M., Chao, K. A., Halvorsen, E.</i>	222
P02 SCALING APPROACH TO HEAVY FERMIONS: PRESSURE EFFECTS IN $CeAl_3$ <i>Continentino, M. A., Japiassú, G. M., Troper, A.</i>	223
P03 Approximate Solution of the Heisenberg Antiferromagnet in a Triangular Lattice <i>Montenegro, M., Gottlieb, D.</i>	223
P04 CORREÇÕES QUÂNTICAS PARA A MASSA DO MÁGNON EM UM ANTIFERROMAGNETO DE PLANO FÁCIL UNIDIMENSIONAL. <i>Garrido, M. O., Pires, A. S. T.</i>	223
P05 CORREÇÕES QUÂNTICAS PARA O ESTADO LIGADO DE UM ANTIFERROMAGNETO UNIDIMENSIONAL. <i>Rodrigues, S. G., Pires, A. S. T.</i>	224
P06 Cálculo da Densidade Espectral do Modelo de Anderson de Duas Impurezas usando uma nova abordagem do Método de Grupo de Renormalização. <i>Silva, J. B. da, Oliveira, L. N. de</i>	224
P07 ESTRUTURA ELETRÔNICA DO MODELO DE HUBBARD DE TRÊS BANDAS NA APROXIMAÇÃO HUBBARD-I <i>Beatrice, A., Gusmão, M. A. C.</i>	224
P08 ESTUDO DE DUAS IMPUREZAS NO HAMILTONIANO DE ANDERSON. <i>Simões, A. S. da R., Iglesias, J. R., Arispe, J., Coqblin, B.</i>	224
P09 INTERAÇÃO ANISOTRÓPICA MEDIADA POR HIBRIDIZAÇÃO EM COMPOSTOS DE CÉRIO. <i>Líbero, V. L., Cox, D. L.</i>	225
P10 COMPLETICIDADE NO MODELO DE ANDERSON PERIÓDICO. <i>Figueira, M. S., Foglio, M. E.</i>	225
P11 The Peierls-Hubbard Model: A Dynamical Effective Field Approach <i>Stein-Barana, A. C. M., Lagos, R. E., Lara, G. A.</i>	225
P12 THERMODYNAMIC PROPERTIES OF THE NEW INSULATING HEAVY FERMIONS <i>Japiassú, G. M., Continentino, M. A., Troper, A.</i>	226
P13 Spin and Charge Phases in Finite Peierls-Hubbard Systems <i>Weinketz, S., Lagos, R. E.</i>	226
P14 Soluções numéricas e dinâmica molecular de um sistema magnético bidimensional de Heisenberg com interações competitivas. <i>Costa, J. E. R., Costa, B. V. da</i>	226
P15 RESPOSTA DINÂMICA DE ANTIFERROMAGNETOS À TEMPERATURA FINITA <i>Almeida, N. S.</i>	226

P16	EM BUSCA DE UMA TRANSIÇÃO METAL-ISOLANTE A PARTIR DO LIMITE ATÔMICO NO MODELO DE HUBBARD <i>Craco, L., Gusmão, M. A. C.</i>	227
P17	CORREÇÕES RELATIVÍSTICAS À HAMILTONIANA DE HUBBARD. <i>Westfahl Jr, H., Caldeira, A. O.</i>	227
P18	SOLUÇÕES EXATAS PARA A CADEIA DE HEISENBERG ANISOTRÓPICA NA PRESENÇA DE UM CAMPO MAGNÉTICO <i>Cabrera, G., Weinketz, S., Medeiros, D.</i>	227
P19	ELECTRON-PHONON INTERACTION IN HUBBARD SYSTEMS <i>LEAL, C. E., KELLER, J.</i>	227
P20	Spin Fluctuations in $(U_{1-x}M_x)(Al_{1-x}Co_x)_2$ compounds <i>Oliveira, N. A. de, Gomes, A. A. G., Troper, A.</i>	227
P21	UM PROBLEMA DE TRANSPORTE TRATADO PELO MÉTODO DE PERTURBAÇÃO NO "HOPPING" <i>Diehl, A., Gusmão, M. A. C.</i>	228

Sistemas Fortemente Correlacionados, Multicamadas e Metais (MMM)

Coordenador: Roberto Bechara Muniz

Local: Modulo E02

P01	LINHA CRÍTICA NO ANTIFERROMAGNETO DILUÍDO $Mn_{0.35}Zn_{0.65}F_2$ <i>Montenegro, F. C., Jesus, J. C. O. de, Machado, F. L. de A., Montarroyos, E., Rezende, S. M., Rivera, A. R.</i>	228
P02	ESTUDO DO MAGNETISMO E DAS PROPRIEDADES DE TRANSPORTE NO SISTEMA FÉRMION PESADO $Ce(Ru_{1-x}Au_x)_2Ge_2$ <i>Fontes[†], M. B., Passos, M. E. A.</i>	228
P03	IDENTIFICATION OF ANTIFERROMAGNETIC ORDERING BY RAMAN SCATTERING IN $SrTi_{1-x}Ru_xO_3$. <i>Massa, N. E., Cuffini, S. L., Carbonio, R.</i>	228
P04	MAGNETIC ORDER AND HEAVY FERMION BEHAVIOR IN Ce_7Ni_3 <i>Trovarelli^o, O., Sereni, J. G., Kappler, J. P., Schmerber, G.</i>	229
P05	O MODELO ESTENDIDO DE HUBBARD PARA UM DÍMERO. <i>Oliveira, F. F. de, Cabrera, G. O.</i>	229
P06	INCLUSÃO DOS TERMOS DE TROCA DIRETA E HOPPING CORRELACIONADO NA MOLÉCULA HOMOPOLAR DE DOIS ELÉTRONS. <i>Oliveira, F. F. de, Cabrera, G. O.</i>	229
P07	Constante de rigidez de ondas de spin em monocamadas de Ni com orientação (100), (110) e (111) <i>Costa, M. V. T., Castro, J. A. e.</i>	230
P08	Difusão de impurezas próximo a superfícies e interfaces metálicas <i>Barbosa, A. C. de C., Costa, M. V. T., Castro, J. A. e.</i>	230
P09	Estrutura Eletrônica de Interfaces Metálicas <i>Jr, A. T. da C., Muniz, R. B.</i>	230
P10	TRANSIÇÕES DE FASE EM MULTICAMADAS ANTIFERROMAGNÉTICAS <i>Carricho, A. S., Almeida, N. S.</i>	230
P11	Ondas de spin em sobrecamadas metálicas magnéticas <i>Barbosa, L. H. M., Muniz, R. B., Mathon, J.</i>	231

P12	COMPUTAÇÃO ALGÉBRICA APLICADA AO ESTUDO DO CAMPO CRISTALINO EM INTERMETÁLICOS DE TERRAS RARAS. <i>Sobral[†], R. R., Guimarães, A. P., Silva, X. A. da</i>	231
P13	COMPUTAÇÃO ALGÉBRICA APLICADA AO MAGNETISMO DE INTERMETÁLICOS CONTENDO ÍONS COM $J = 4$: RESULTADOS ANALÍTICOS <i>Sobral[†], R. R., Guimarães, A. P., Silva, X. A. da</i>	231
P14	PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE SISTEMAS FINITOS <i>Mello, D. F. de, Cabrera, G. G.</i>	231
P15	DINÂMICA DE REDE DE MAGNÉSIO PELA INTERAÇÃO DE TRÊS CORPOS <i>Coelho, A. de A., Shukla, M. M.</i>	231
P16	Dinâmica de Rede de liga de $Pd_{95}Ru_{05}$ <i>Imaizumi, M., Shukla, M. M.</i>	232
P17	INVESTIGATION OF ELECTRON-PHONON PEIRLS' EXPONENT IN NORMAL METALS AT LOW TEMPERATURE <i>Morgoon, V. N., Kopeliovich, A. I.</i>	232
P18	INFLUÊNCIA DA ADIÇÃO DE In NA THERMOPOWER E RESISTIVIDADE DA $\alpha - Ce_3Al$ <i>Azechi, L. S., Medina Neto, A., Gandra, F. G.</i>	232
P19	MEDIDAS DA SUSCEPTIBILIDADE MAGNÉTICA DAS FERRITAS DO TIPO $Ca_2Fe_{2-x}Nb_xO_{5+x}$ UTILIZANDO UM SUSCEPTÔMETRO AC. <i>Souza, R. R. de, Magon, C. J.</i>	232
P20	Partículas ultrafinas de $Fe - Ni$ produzidas pela técnica de evaporação de gás e coalescência <i>Scorzelli, R. B., Silva, E. G. da, Kaito, C., Saito, Y., Mcelfresh, M.</i>	233
P21	Tetratenita em grãos metálicos do condrito Ántartico Allan Hills 769 <i>Scorzelli, R. B., Azevedo, I. de S.</i>	233
P22	Magnetização em Ligas Ternarias do Tipo $(A_xB_{1-x})_{1-c}C_c$ <i>Menezes, J. V. de, Lopes, L. C., Castro, J. A. e</i>	233

Espectroscopia, Interação com Átomos e Teoria (OTI)

Coordenador: Carlos Schwab

Local: Modulo E10

P01	EFEITO DO DECAIMENTO ATÔMICO EM MICROMASERS DE DOIS FÓTONS DEGENERADOS <i>Guerra, E. S., Plon, J., Zagury, N.</i>	255
P02	SELF-STEPPENING AND DAMPING OF OPTICAL PULSES IN NONLINEAR OPTICAL FIBERS <i>Moura, M. A. de</i>	255
P03	Equações de Maxwell Generalizadas <i>Doria, R. M.</i>	255
P04	INTERAÇÃO MULTIFOTÔNICA DE ÁTOMO DE 2-NÍVEIS E CAMPO EM ESTADO INICIAL GENÉRICO <i>Chaba, A. N., Baseia, B., Vyas, R.</i>	255
P05	SOLUÇÃO NUMÉRICAS PARA O PROBLEMA DE AUTO DIFRAÇÃO <i>Penaforte, J. C., Freitas, U de</i>	256
P06	SQUEEZING OF EXCITONS IN SEMICONDUCTORS BY COHERENT LIGHT. <i>An, N. B.</i>	256
P07	CHAOTIC SELF-PULSATIONS VIA PERIOD-DOUBLING MECHANISM IN A NONLINEAR PHOTON-EXCITON SYSTEM DRIVEN BY COHERENT INPUT LIGHT. <i>An, N. B.</i>	256

P08	ESPECTROSCOPIA DE REFLEXÃO DE VAPOR ATÔMICO UTILIZANDO LASER DE DIODO <i>Alves, M. V., Cavalcante, J. M. M., Bombacini, M. R., Chevrollier, M., Oriá, M.</i>	256
Ressonância Magnética (RES)		
Coordenador: Gaston E. Barberis		
Local: Modulo E11		
P01	Um algoritmo para a representação matricial do hamiltoniano efetivo de spin. <i>Gonçalves, W. M., Pontuschka, W. M., Sartorelli, J. C.</i>	283
P02	MODULAÇÃO DA CORRENTE DO MICROSCÓPIO DE TUNELAMENTO, INDUZIDA POR UM CENTRO PARAMAGNÉTICO RESSONANTE NA SUPERFÍCIE <i>Si/SiO₂</i> . <i>Menezes, R. P., Helman, J. S.</i>	283
P03	FORMULAÇÃO ANALÍTICA PARA O CÁLCULO DO CAMPO MAGNÉTICO DE BOBINAS CORRETORAS <i>SHIM</i> PARA MAGNETOS DE ALTA HOMOGENEIDADE. <i>Bianchi, I., Shigue, C. Y.</i>	284
P04	ESTUDOS POR RPE DOS COMPOSTOS DE <i>Cu(α - AIB)₂</i> E <i>Cu(D, L - ala)₂.H₂O</i> NA FORMA DE PÓ. <i>Saab, S. da C., Shibuya, C., Terrile, M. C., Nascimento, O. R., Calvo, R.</i>	284
P05	O USO DA RESSONÂNCIA FERROMAGNÉTICA FOTOTERMICAMENTE MODULADA NA INVESTIGAÇÃO DE MATERIAIS FERROMAGNÉTICOS <i>Romano, J. A., Cortez, A. C. R. da M., Vargas, H., Miranda, L. C. M., Nikitov, S. A.</i>	284
P06	Direct Inversion Pulse Adjusting in NMR <i>Foerster, B., Tannús, A., Panepucci, H.</i>	284
P07	RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA NO ESTUDO DE TRÂNSIÇÕES MAGNÉTICAS EM FERRITAS DE CÁLCIO E NIÓBIO. <i>Souza, P. H. de, Terrile, M. C., Magon, C. J., Moraes, I. J.</i>	285
P08	INTERACTION BETWEEN THE NEUTRAL FORM OF LOCAL ANESTHETICS AND PHOSPHATIDYLCHOLINE MEMBRANES AS STUDIED BY ² H, ³¹ P AND ¹³ C-(NOE) NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE. <i>Paula¹⁻², E. de, Jarrell, H. C., Schreier, S.</i>	285
P09	DEFEITOS PONTUAIS EM DOLOMITAS NATURAIS <i>Franco, R. W. de A., Rossi, A. M.</i>	285
P10	CONSTRUÇÃO DE CABEÇOTE PARA TRANSFERÊNCIA DE POLARIZAÇÃO ELÉTRON-NÚCLEO (EFEITO OVERHAUSER). <i>Biscegli, C. I., Colnago, L. A., Magon, C. J.</i>	286
P11	CENTROS PARAMAGNÉTICOS DO <i>NH₄Br : Cu</i> <i>Mauro, E. Di, Sano, W.</i>	286
P12	ESTUDO DA RESSONÂNCIA MAGNÉTICA DE <i>Fe³⁺</i> EM LÂMINAS DE PALÁDIO. <i>Medina Neto, A., Oliveira, V. S., Gandra, F. G.</i>	286
P13	Espectroscopia de Alta Resolução por RMN do PolyParaPhenylene (PPP) dopado com <i>FeCl₃</i> <i>Bonagamba, T. J., Giotto, M. V., Bello Junior, B., Nascimento, J. F., Panepucci, H. C., Campos, M. S., Magon, C. J., Partiti, C. S. M.</i>	287
P14	DISPERSION EN LA RELAJACION ESPIN-RED EN CRISTALES LIQUIDOS Y ALGUNOS TEJIDOS BIOLÓGICOS* <i>Pusio^{**}, D. J., Anoardo^{***}, E., González^{***}, C.</i>	287
P15	RNM DE PRÓTONS EM LIGAS METÁLICAS HIDROGENADAS: CONTRIBUIÇÃO DA INTERAÇÃO DIPOLAR H-METAL PARA RELAXAÇÃO SPIN-REDE. <i>Leite, M. A. S., Woney Filho, W.</i>	287

Teoria de Elétrons em Estruturas de Semicondutores (SEM)

Coordenador: Oscar Hipólito

Local: Modulo E06

P01	Relaxação atômica e estados eletrônicos em super-redes ultrafinas (GaP) _n (Ge ₂) _n /(Si ₂) _n (InP) _n (Ge ₂) _n /(Si ₂) _n . Casagrande, D., Ferraz, A. C.	304
P02	DEGENERACY EFFECTS IN THE CLASSICAL APPROXIMATIONS TO FREE CARRIER ABSORPTION Cruz, J. M. R., Amato, M. A.	305
P03	ESTADOS DE WANNIER-STARK EM NANOESTRUTURAS Fagotto, E., Schulz, P. A., Brum, J. A.	305
P04	Amostras de GaAs com dopagem planar de Si (δ -doping) e o poço de potencial de Pöschl-Teller Alves, A. R.	305
P05	Estruturas Eletrônicas das Super-redes Ga _{1-x} In _x As/GaAs(InAs) Silva, R. C. da, Ferraz, A. C.	306
P06	Propriedades Eletrônicas das Super-redes (Ga _{1-x} In _x P) ₃ (Ga _{1-y} In _y P) ₃ Miwa, R. H., Ferraz, A. C.	306
P07	Dependência das faixas de energia de BP, AlP, GaP e InP com a pressão hidrostática Watari, K., Alves, J. L. A., Ferraz, A. C.	306
P08	DINÂMICA DE PORTADORES QUENTES NA LIGA Al _{0.48} Ga _{0.52} As Rego, L. G. C., Andrade, L. H. F., Cruz, C. H. B.	306
P09	ESTABILIDADE E DIAGRAMAS DE FASE DE NOVAS LIGAS SEMICONDUTORAS Osório, R.	307
P10	EFEITO DA SUSCEPTIBILIDADE NAO-LINEAR DE ALTA ORDEM NO DESEMPENHO DE ACOPLADORES DIRECIONAIS CONSTRUÍDOS A PARTIR DE VIDROS SEMICONDUTORES SOMBRA, A. S. B., FEITOSA, C. A. C.	307
P11	Ultrasonic attenuation in semiconductor quantum heterostructures under a high magnetic field. Rodrigues, C., Nunes, A. C.	307
P12	SOBRE O DESACOPLAMENTO DOS NÍVEIS DE LANDAU NO LIMITE DE CAMPO MAGNÉTICO FORTE. Cavalcanti, R. M., Carvalho Filho, C. A. A. de	308
P13	Efeitos de correlações em estruturas semicondutoras altamente dopadas Borges, A. N., Hipólito, O., Campos, V. B.	308
P14	Energia de ligação de impurezas em poços quânticos, segundo o modelo $\Gamma - X$. Santana Filho, L. C., Emmel, P. D., Lima, I. C. da C., Silva, E. A. de A. e	308
P15	CORRELAÇÕES DINÂMICAS DE UM GÁS QUASI-BIDIMENSIONAL Silveira, H. V. da, Studart, N.	308
P16	ESPECTRO RAMAN RESSONANTE DE FLUTUAÇÃO DE SPIN EM SUPERREDES Δ -Si:GaAs. Anjos, V. de C. dos, Anjos, V. de C. dos, Ioriatti Jr, L.	309
P17	Localização de Estados em Super-redes Finitas Waki, M., Watari, K.	309

Fenômenos de Transporte em Semicondutores e Heteroestruturas (SEM)

Coordenador: J. de Sampaio

Local: Modulo E07

- P01 FOTOCONDUTIVIDADE PERSISTENTE EM ESTRUTURAS SEMICONDUTORAS III-V COM DOPAGEM PLANAR.
Correia Filho, J. A., Silva, M. I. N. da, Oliveira, A. de 300
- P02 Heteroestruturas AlGaAs/GaAs com mobilidade $390 \times 10^3 \text{ cm}^2/\text{V.S}$ crescidas por MBE
Rossi, J. C., Lubyshev, D. I., Gusev, G., Runho, A., Ferreira, J. P., Gonzales, P., Basmaji, P.,
Oliveira, J. B. 301
- P03 PROPRIEDADES ELÉTRICAS DE ALGAAS/GAAS HETEROESTRUTURAS E POÇOS QUÂNTICOS CRESCIDOS SELETIVAMENTE SOBRE GAAS ORIENTADO (311)A E (3LL)B POR MBE
Lubyshev, D. L., Gusev, G., Rossi, J. C., Runho, A., Ferreira, J. P., Basmaji, P. 301
- P04 MAGNETOTRANSPORT IN MULTIQUANTUM WELL SYSTEM.
Gusev, G. M., Rossi, J. C., Lubyshev, D. I., Basmaji, P., Oliveira, J. B. B., Pinkse, P., Portal, J. C. ... 301
- P05 FLUTUAÇÃO DA CORRENTE ELÉTRICA EM SISTEMAS DE BAIXA DIMENSIONALIDADE FORTEMENTE CORRELACIONADOS
Latgé, A., Anda, E. 302
- P06 DETERMINAÇÃO DA VELOCIDADE DE RECOMBINAÇÃO DOS PORTADORES MAJORITÁRIO EM FILMES DE $\alpha\text{-Si:H}$ PELA TÉCNICA DE SSPG.
Misoguti, L., Fragalli, J. F., Nakagaito, A. N., Bagnato, V. S., Kolenda, J. 302
- P07 O PROCESSO DE RECOMBINAÇÃO DOS PORTADORES FOTOGERADOS NAS LIGAS DE SILÍCIO E GERMÂNIO AMORFOS HIDROGENADOS
Graeff, C. F. de O., Chambouleyron, I. E., Brandt, S. M., Stutzmann, M. 302
- P08 Tempo de vida em semicondutores através de reflectância.
Pires, M. P., Weid, J. P., Souza, P. L. 302
- P09 Uma nova abordagem para o efeito de "overshoot" de temperatura dos fonons LO
Rego, L. G. C., Algarte, A. C. S. 302
- P10 TUNELAMENTO RESSONANTE FOTO-ASSISTIDO
Chitta, V. A., Bekker, R. de, Maan, J. C., Hawksworth, S., Chamberlain, M., Henini, M., Hill, G. 303
- P11 Magnetoresist encia negativa de heterojunções n-AlGaAs/GaAs sob campo magnético planar
Alves, A. R., Chaves, A. S., Guimarães, P. S. S., Oliveira, A. de, Henini, M., Menezes, E. A. 303
- P12 MAGNETO-TRANSPORTE EM SISTEMAS BI-DIMENSIONAIS
Oliveira, J. B. B. de, Mendonça, C. A. C. de, Plentz, F., Shulz, P. A., Meneses, E. A.,
Oliveira Jr, A. T., Saito, M. 303
- P13 MAGNETOTRANSPORTE E CONDUÇÃO ELÉTRICA EM GaAs COM DOPAGEM PLANAR DE Si NO LIMITE DE BAIXAS CONCENTRAÇÕES
Medeiros, S. M. de, Guimarães, P. S. S., Sampaio, J. de, Ribeiro, G. M., deOliveira, A. G. de. 304
- P14 TUNELAMENTO RESSONANTE DE ELÉTRONS ENTRE DOIS POÇOS QUÂNTICOS ASSIMÉTRICOS COM DOPAGEM DELTA.
Souza, M. A. R., Leão, S. A., Degani, M. H. 304
- P15 TUNELAMENTO DE BURRACOS EM HETEROESTRUTURAS SOB A AÇÃO DE CAMPOS MAGNÉTICOS PARALELOS.
Tavares, M. R. da S., Marques, G. E. 304

Segundo Período da Tarde 16:15 - 18:30**Palestras Vespertinas – A**

Local: Sala 03

16:15	Magnetic phase diagrams of the high-temperature superconductors <i>Fisher, M. P. A.</i>	354
17:30	Excitações topológicas em sistemas magnéticos bidimensionais <i>Pires, A. S. T.</i>	354

Palestras Vespertinas – B

Local: Sala 04

16:15	QUASI-SPHERICAL GRAPHITIC ONIONS: A NEW FULLERENE RELATED STRUCTURE <i>Ugarte, D.</i>	355
17:30	Surface Structure, Electronic Properties, and Chemistry on MBE Grown GaAs(001) Studied by Scanning Tunneling Microscopy <i>Pashley, M. D.</i>	355

Palestras Vespertinas – C

Local: Sala 01

16:15	The Transformation of Resin to Carbon induced by Heat and by Irradiation <i>Jenkins, G. M.</i>	355
17:30	Conducting Polymers: the promise of the 1970's is reality in 1992 <i>Heeger, A. J.</i>	356

Palestras Vespertinas – D

Local: Sala 06

16:15	Structural analysis of the lyotropic polymorphism of deoxyguanosine derivatives <i>Morais, M. M. D., Mariani, P., Garbesi, A., Gottarelli, G., Spada, G. P.</i>	356
17:30	Magnetic Properties of Metal Amino Acid Compounds. ¹ <i>Calvo, R.</i>	357

Apresentação dia 21/05/93

Primeiro Período da Manhã 8:30 - 10:30

Teoria de Estrutura Eletrônica I (ATO)

Coordenador: S. Mizrahi

Local: Sala 07

08:30	ON POSSIBLE VERIFICATION OF NONLINEAR GENERALIZATIONS OF QUANTUM MECHANICS FOR ELECTRONS IN CROSSED MAGNETIC AND ELECTRIC FIELDS <i>Dodonov, V., Mizrahi, S.</i>	82
08:50	THEORETICAL STUDIES OF THE ABSORPTION SPECTRA OF MOLECULAR SYSTEMS IN CONDENSED PHASE <i>Canuto, S., Coutinho, K.</i>	82
09:10	Multiplicidade, instabilidade e Bifurcação de soluções Hartree-Fock: Uma análise usando o método algébrico. <i>Teixeira Filho, R. M., Malbouisson, L. A. C., Vianna, J. D. M.</i>	82
09:30	POLARIZABILIDADES DOS ÍONS NEGATIVOS B ⁻ , C ⁻ E O ⁻ <i>Castro, M. A. de, Canuto, S., Mukherjee, P.</i>	83
09:50	SOLUÇÃO VARIACIONAL DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER PARA OS POTENCIAIS $V(x) = \beta x^2 + \lambda x^p$, ($p = 4, 6, 8$) <i>Matos, J. M. O., Gonçalves, L. L.</i>	83
10:10	THE ABSORPTION SPECTRA OF CLUSTERS OF K ₃ C ₆₀ <i>Fazzio, A., Coutinho, K., Canuto, S., Mota, R.</i>	83

Físico-Química de Macromoléculas (BIO)

Coordenador: Marcio F. Colombo

Local: Sala 10

08:30	Separação de Biomoléculas por Eletroforese Capilar e Detecção por Fluorescência Induzida a Laser de N ₂ . <i>Kist, T. B. L., Grieneisen, H. H., Termignoni, C.</i>	97
08:50	ELECTRON TRANSFER PROCESS BY PHOTOTHERMAL TECHNIQUE <i>Cornélio, M. L., Sanches, R.</i>	98
09:10	ADSORÇÃO DE 5-AMP E SÍNTESE NÃO ENZIMÁTICA DE 5-ADP EM PRECIPITADOS DE FOSFATO E PIROFOSFATO DE CÁLCIO <i>Tessis, A. C. S. da C., Barros, F. de S., Amorim, H. S. de, Souza, M. F. D.</i>	98
09:30	INCREASED INTERACTION OF ACTINOMYCIN D TO LINEAR AND SUPERCOILED DNA <i>Covissi, U. D. S., Donelli, S. R., Ruggiero Neto, J., Colombo, M. F.</i>	98
09:50	BUSCA DE ESTRUTURAS INTERMEDIÁRIAS DE HB EM SOLUÇÃO ATRAVÉS DO ESTUDO DO EFEITO ALOSTÉRICO DE H ₂ O E CL ⁻ SOBRE A OXIGENAÇÃO <i>Colombo, M. F.</i>	99
10:10	DIFERENÇAS ESTRUTURAIS ENTRE OS PERICARPOS DE MILHO DE PIPOCA E COMUM QUE FAZEM COM QUE O MILHO DE PIPOCA ESTOURE. <i>Zerbetto, M., Pereira, A. C., Vargas, H., Miranda, L. C. M., Silva, W. J. da, Vidal, B. C., Martins, M. E. Q.</i>	99

Crescimento e Caracterização II (CCP)

Coordenador: Josué Mendes Filho

Local: Sala 12

- 08:30 PREPARAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DO SISTEMA VÍTREO $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-GeO}_2\text{-Nb}_2\text{O}_5$ VISANDO DISPOSITIVOS ÓPTICOS
Aranha, N., Barbosa, L. C., Alves, O. L. 118
- 08:50 FILMES MULTIESTRATOS DE LiF:NaF : CARACTERIZAÇÃO ESTRUTURAL E ÓPTICA
Carmo, L. C. S. do, Nunes, R. A., Mauricio, M. H. P., Somma, F., Montereali, R. M., Cremona, M. ... 118
- 09:10 CARACTERIZAÇÃO DIELÉTRICA E PIROELÉTRICA DO COMPORTAMENTO RELAXOR DO PLZT 9/65/35 DOPADO COM W, V, Cr E Mn.
Moreira, E. N., Eiras, J. A. 119
- 09:30 CARACTERIZAÇÃO ÓPTICA DO CRISTAL $\text{LiCaAlF}_6\text{:Cr}^{3+}$
Duarte, M., Vieira, M. M. F., Vieira Jr, N. D., Shkadarevich, A. P. 119
- 09:50 CRESCIMENTO E CARACTERIZAÇÃO DE MONOCRISTAIS DE $\text{BaLiF}_3\text{:Pb}$
Baldochi, S. L., Morato, S. P. 119
- 10:10 SÍNTESE DE FILMES DE DIAMANTE
Salvadori, M. C., Mammana, V. 119

Cristalografia Estrutural e Aplicada (CRI)

Coordenador: Marcia Fantini

Local: Sala 08

- 08:30 ESTRUTURA DE FILMES DE SILÍCIO POROSO
Torriani, I. L., Teschke, O. 132
- 08:50 An attempt of self-consistent evaluation of the Borrmann effect on a microscopic dipole-plane level.
Keller, W. A., Vasconcelos, D. S. de 133
- 09:10 ESPELHOS DE RAIOS X PARA USO COM LUZ SÍNCROTRON
Vicentin, F. C., Bernardes, L. A., Tolentino, H., Craievich, A. 133
- 09:30 Simulação de Defeitos em Estruturas Homogêneas e Heterogêneas em Espalhamento Auto-consistente de Raios-X
Vasconcelos, D. S. de, Keller, W. A. 133
- 09:50 ANÁLISE POR DIFRAÇÃO DE RAIOS-X DE FILMES FINOS ELETROCRÔMICOS DE ÓXIDO DE NÍQUEL
Faria, I. C., Gorenstein, A., Cardona, P. S. P., Fantini, M. C. A. 134
- 10:10 Crystal Structure Determination of the non-covalent Complexes of Human and Bovine Prothrombin Fragment 2 with Human PPACK Thrombin
Arni, R. K., , Padmanabhan, K., Padmanabhan, K. P., Wu, T. P. 134

Sistemas Fora do Equilíbrio: Dinâmica, Caos e Instabilidades I (EST)

Coordenador: Constantino Tsallis

Local: Sala 03

- 08:30 MISTURA CAÓTICA EM SISTEMAS HIDRODINÂMICOS
Mesquita, O. N. de 159
- 08:50 Campo externo conjugado ao parâmetro de ordem da transição de fase dinâmica no autômato celular de Domany-Kinzel
Martins, M. L., Tsallis, C. 159

09:10	ANÁLISE TOPOLOGICA DO CAOS HOMOCLÍNICO NA DESCARGA ELÉTRICA LUMINOSA <i>Altmann, N., Correia, R. R., Braun, T.</i>	159
09:30	ESTRUTURAS DISSIPATIVAS EM SEMICONDUTORES FOTO-EXCITADOS <i>Esperidião, A. S. C., Andrade, R. F. S.</i>	159
09:50	Simulação da dinâmica de um tecido celular biológico <i>Mombach, J. C. M., Almeida, R. M. C. de, Iglesias, J. R.</i>	160
10:10	Padrões Espaço-Temporais em Rede de Reações Químicas Estudada via Autômato Celular Probabilístico <i>Vieira, F. de M. C., Bisch, P. M.</i>	160

Difusão, Relaxação e Reorientação Atômica em Materiais (MAT)

Coordenador: José Mestnik Filho

Local: Sala 09

08:30	DIFUSÃO DE Hf E Au EM α -Ti <i>Santos, J. H. R. dos, Fichtner, P. F., Behar, M., Dymont, F.</i>	211
08:50	RELAXAÇÕES ANELÁSTICAS DEVIDO A PARES O-H EM LIGAS DE Nb-Zr <i>Grandini, C. R., Botta Filho, W. J., Florêncio, O., Tejima, H., Jordão, J. A.</i>	211
09:10	RELAXAÇÕES ANELÁSTICAS DEVIDO À REORIENTAÇÃO INDUZIDA POR TENSÃO DE DEFEITOS PONTUAIS EM METAIS DE TRANSIÇÃO <i>Fernandes, R. M., Grandini, C. R., Silva, J. R. G. da, Florêncio, O., Tejima, H., Jordão, J. A. R.</i>	211
09:30	SUPERPOSIÇÃO DE "THERMAL SPIKE" POR DINÂMICA MOLECULAR <i>Silva, C. R. S. da, Scherer, C.</i>	211
09:50	DETERMINAÇÃO DA ESTRUTURA DE METAIS LÍQUIDOS ATRAVÉS DE TÉCNICAS DE DIFRAÇÃO <i>Tranicapocchi, J. D., Lima, M. S. F. de.</i>	212

Workshop: Multicamadas Magnéticas e Filmes Finos (MMM,SUF)

Coordenador: José d'Albuquerque e Castro

Local: Sala 04

08:30	Introdução	
08:40	MAGNETORRESISTENCIA GIGANTE DE Co/Ag ENTRE A MULTICAMADA E O REGIME GRANULAR. <i>Baibich, M. N., Tosin, G., Schelp, L. F., Carara, M., Schmidt, J. E.</i>	234
09:15	RESSONÂNCIA FERROMAGNÉTICA EM FILMES ACOPLADOS <i>Rezende, S. M., Moura, J. A. S., Aguiar, F. M. de, Schreiner, W. R., Santos, C. A. dos.</i>	234
09:50	Acoplamento de Troca e Magnetoresistência de Multicamadas Magnéticas Metálicas <i>Bechara Muniz, R.</i>	234

Workshop: Lasers, Tecnologia e Aplicações (OTI, INS)

Coordenador: Nicolau A. S. Rodrigues

Local: Sala 06

08:30	Introdução	
08:40	LASERS DE CRISTAIS DE FLUORETOS NO INFRAVERMELHO PRÓXIMO <i>Vieira Junior, N. D.</i>	257

09:15	DESENVOLVIMENTO E APLICAÇÕES DE LASERS SEMICONDUTORES NO CPQD - TELEBRÁS. <i>Rego, A. C. B., Amaral Neto, R. do</i>	257
09:50	DESENVOLVIMENTO DE LASERS A GÁS NO IEAv-CTA. <i>Rodrigues, N. A. S.</i>	258

Estudo Teórico de Polímeros (POL)

Coordenador: Maria Cristina dos Santos

Local: Sala 02

08:30	Competition Between Spin, Charge and Bond Waves in a Peierls-Hubbard Model <i>Venegas, P. A., Henríquez, C., Rössler, J.</i>	276
08:50	FERRIMAGNETISMO E TRANSIÇÃO METAL-ISOLANTE EM CADEIAS POLIMÉRICAS <i>Coutinho-Filho, M. D., Santos, M. C. dos</i>	276
09:10	IMPUREZAS MAGNÉTICAS EM CADEIAS POLIMÉRICAS <i>Azevedo, S. A. F., Carmo Jr, C. do, Coutinho-Filho, M. D., Melo, C. P. de</i>	277
09:30	INSULATOR-METAL TRANSITION ON POLYTHIOPHENE <i>Lavarda, F. C., Santos, M. C. dos, Galvão, D. S., Laks, B.</i>	277
09:50	Dinâmica de Sólitons e Interações entre Cadeias em Poliacetileno. <i>Magela e Silva, G.</i>	277
10:10	POLARIZABILIDADES ELÉTRICAS DE CADEIAS POLIMÉRICAS LONGAS <i>Fonseca, T. L., Galvão, L., Melo, C. P. de, Kirtman, B.</i>	277

Workshop: Ressonância Magnética em Sistemas Biológicos I (RES, BIO)

Coordenador: Rafael Calvo

Local: Sala 05

08:30	Introdução	
08:50	RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA DE Hb-NO E A DINÂMICA DE PROTEÍNAS <i>Bemski, G., Wajnberg, E.</i>	288
09:40	Free radical formation <i>in vitro</i> and <i>in vivo</i> monitored by electron paramagnetic resonance <i>Augusto, O.</i>	288

Ressonâncias e Tunelamento (SEM)

Coordenador: José Antonio Brum

Local: Sala 01

08:30	RESSONÂNCIAS DE FANO EM HETEOESTRUTURAS DE SEMICONDUTORES <i>Schulz, P. A.</i>	309
09:10	MODEL CALCULATION OF THE NOISE CHARACTERISTIC IN DOUBLE BARRIER HETEROSTRUCTURES <i>Yeyati, A. L., Flores, F., Anda, E. V.</i>	310
09:30	TUNELAMENTO RESSONANTE EM DISPOSITIVOS DE BARREIRA DUPLA SOB O EFEITO DA INTERAÇÃO ELÉTRON-FÔNON <i>Anda, E. V., Makler, S. S., Tuyarot, D. E., Pastawski, H. M., Barrera, R. G.</i>	310
09:50	TUNELAMENTO RESSONANTE EM ESTRUTURAS DE BARREIRA DUPLA COM IMPUREZAS <i>Gornsztejn, T., Davidovich, M. A.</i>	310

- 10:10 TUNELAMENTO SEQUENCIAL RESSONANTE ASSISTIDO POR FÓTONS EM SUPER-REDES SEMI-CONDUTORAS
 Guimarães, P. S. S., Keay, B., Kaminski, J., Allen, J., Hopkins, P., Gossard, A., Florez, L. T., Harbison, J. P. 310

Medidas Elétricas e Magnéticas em Supercondutores I (SUC)

Coordenador: Mauro Dória

Local: Sala 11

- 08:30 LOSS OF INTERPLANE CORRELATION IN $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ SINGLE CRYSTALS BELOW THE IRREVERSIBILITY LINE
 Arribère, A. A., Pastoriza, H., Goffman, M. F., Cruz, F. de, Mitzi, D. B., Kapitulnik, A. 327
- 09:10 Análise de medidas de susceptibilidade magnética ac em supercondutores de alta T_c com base em distribuições de correntes críticas de blindagem.
 Schilling, O. F., Aihara, K., Soeta, A., Kamo, T., Matsuda, S. 327
- 09:30 COMPORTAMENTO DA CORRENTE CRÍTICA NOS COMPOSTOS SUPERCONDUTORES DE $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}(\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x)\text{O}_8$
 Gross, G., Torikachvili, M., Moehlecke, S., Torres, J. H. S., Westphal, C. H. 327
- 09:50 3D-2D Crossover in Flux-Lattice-Melting in Untwinned YBaCuO Crystals
 Krylov, I. P., Farrell, D. E. 327
- 10:10 Susceptibilidade ac em supercondutores eletrônicos $\text{Sm}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-y}$
 Jardim, R. F., Westphal, C. H., Cohenca, C. H., Ben-Dor, L., Maple, M. B., Stroud, D. 328

Segundo Período da Manhã 11:00 - 12:30**Teoria de Estrutura Eletrônica II (ATO)**

Coordenador: J. J. Soares Neto

Local: Sala 07

11:00	MOMENTO DE DIPOLO, POLARIZABILIDADE E SUAS DERIVADAS PARA O MgC E CaC <i>Castro, M. A. de, Canuto, S.</i>	83
11:20	APLICAÇÕES DA FUNÇÃO DE ONDA MULTIESTRUTURAL GENERALIZADA <i>NASCIMENTO, M. A. C.</i>	84
11:40	APLICAÇÃO DO FORMALISMO DE ENTROPIA MÁXIMA NA FOTODISSOCIAÇÃO MOLECULAR <i>Xavier Junior, I. de M., Silva, J. J. da, Moraes, F. J. S.</i>	84
12:00	SUSCEPTIBILITY OF COOLED RESONANCE GAS <i>Ghiner, A., Surdutovich, G. I.</i>	84

Propriedades e Caracterização II (CCP)

Coordenador: Luiz Oswaldo Alves

Local: Sala 12

11:00	CORRELAÇÕES ENTRE ESPECTROS DE ABSORÇÃO E DE EMISSÃO DE LUZ DE CRISTAIS DE FLUORETO DE LÍTIO COM IMPUREZAS DE Mg, Ti e OH <i>Santos, P. E. dos, Yoshimura, E. M., Okuno, E., Lima, J. F. de</i>	120
11:20	THEORETICAL ANALYSIS OF Ti DIFFUSION IN LiNbO_3 USING A CONCENTRATION DEPENDENT DIFFUSION COEFFICIENT AND TWO SITES DIFFUSION MECHANISM <i>Nunes, F. D., Júnior, J. S. de A., Silva, H. F. da, Mendes Filho, J.</i>	120
11:40	TRANSIÇÕES DE FASE DIFUSAS EM CERÂMICAS DE BaTiO_3 OBTIDAS PELO MÉTODO SOL-GEL <i>Lobo, R. P. S. M., Mohallem, N. D. S., Moreira, R. L.</i>	120
12:00	HIDRETOS METÁLICOS PARA FINS DE REFRIGERAÇÃO <i>Mokross, B. J., Veziroglu, T. N.</i>	121

Sistemas Fora do Equilíbrio: Dinâmica, Caos e Instabilidades II (EST)

Coordenador: Constantino Tsallis

Local: Sala 03

11:00	CAOS TRANSIENTE EM ONDAS DE SPIN <i>Aguiar, F. M. de, Rezende, S. M., Siqueira, F. C. S.</i>	160
11:20	MONTE CARLO DINÂMICO E SUAS APLICAÇÕES. <i>Aiélo, O. E., Silva, M. A. A. da, Caliri, A.</i>	160
11:40	UM MODELO ESTATÍSTICO PARA INSTABILIDADES COLETIVAS <i>Lucena, L. dos S., Silva, L. R. da, Roux, S.</i>	161
12:00	UM MODELO ESTATÍSTICO PARA BOLSA DE VALORES: EVOLUÇÃO TEMPORAL E ESTABILIDADE. <i>Tsallis, C., Souza, A. M. C. de, Curado, E. M. F.</i>	161

Preparação e Caracterização de Materiais Óticos (MAT)

Coordenador: José Mestnik Filho

Local: Sala 09

- 11:00 FABRICAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE FIBRAS ÓPTICAS DE VIDROS FLUOROZIRCONADOS
Messaddeq, Y., Aegerter, M. A., Oliveira, S. M. de, Dini, D. C. 212
- 11:20 OTOMASCARAS A CENTROS DE COR PARA A TRANSPOSIÇÃO DE IMAGENS SUBMICROMETRICAS
Nunes, R. A., Carmo, L. C. S. do, Mauricio, M. H. P., Somma, F., Gentili, M. 212
- 11:40 NOVAS FAMÍLIAS DE VIDROS DE FLUORETOS
Messaddeq, Y., Boscolo, M., Aegerter, M. A. 213
- 12:00 PROPRIEDADES ÓPTICAS DO $KZnF_3 : Cr^{3+}$ SOB PRESSÃO
Freire, P. de T. C., Lemos, V., Pilla, O. 213

Multicamadas Magnéticas e Filmes Finos (MMM, SUF)

Coordenador: José d'Albuquerque e Castro

Local: Sala 04

- 11:00 Acoplamento de troca em multicamadas magnéticas metálicas
Ferreira, M. S., Muniz, R. B., Castro, J. A. e 235
- 11:20 PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DE MULTI-CAMADAS AMORFAS Y-Co/Gd-Co/Y-Co
Givord, D., Souche, Y., Voiron, J., Wüchner, S., Santos, A. D. dos 235
- 11:40 THE STRUCTURES AND MAGNETIC PROPERTIES OF *Fe/Cr* AND *Fe/Mn* THIN FILMS
Xia, S. K., Baggio-Saitovitch, E., Larica, C. 235
- 12:00 EVIDÊNCIA DE ORDENAMENTO A CURTO E LONGO ALCANCE NO COMPOSTO $FeTa_2O_6$.
Zawislak, L. I., Cunha, J. B. M. da, Santos, C. A. dos 235

Lasers e Espectroscopia (OTI, ATO)

Coordenador: Daniel Pereira

Local: Sala 06

- 11:00 LASERS DE DIODO ESTABILIZADOS PARA ESPECTROSCOPIA ATÔMICA DE ALTA RESOLUÇÃO
Tuboy, A. M., Santos, M. S., Chevrollier, M., Bagnato, V. S., Oriá, M. 258
- 11:20 EFEITOS DE CAMPOS ELÉTRICOS EM TRANSIÇÕES VIBRACIONAIS E ROTO-VIBRACIONAIS DO $^{13}CD_3OH$
Telles, E. M., Pereira, D., Scalabrin, A., Moraes, J. C. S. de 258
- 11:40 ESPECTROSCOPIA DE ABSORÇÃO NÃO-LINEAR COM RESOLUÇÃO DE FEMTOSEGUNDOSA EM $Al_{0.1}Ga_{0.9}As$
Ulman, M., Ippen, E. P., Fujimoto, J. G., Bailey, D. W., Acioli, L. H., Valleé, F. G., Stanton, C. J. 259
- 12:00 ESPECTROSCOPIA OPTOGALVÂNICA DE INTERMODULAÇÃO E EFEITO HANLE NÃO-LINEAR NO TITÂNIO
Cruz, F. C. da, Gomide, J. V. B., Scalabrin, A., Pereira, D., Mirage, A. 259

Propriedades de Transporte (POL)

Coordenador: Maria Cristina dos Santos

Local: Sala 02

- 11:00 CONDUTIVIDADE GIGAHERTZ E DC DE PASTILHAS DE POLI(3-METILTIOFENO) DOPADAS COM ClO_4^- OBTIDAS POR MEIO DE MEDIDAS DE EPR.
Pawlicka, A., Nascimento, O. R., Faria, R. M., Pereira, E. C., Bulhões, L. O. de S., Walmsley, L. 278

11:20	Caracterização do Poli(Sulfeto de p-Fenileno) por Correntes Termo-Estimuladas de Polarização e Depolarização*	
	Wang, M. S. E., Campos, M. S. de	278
11:40	CONDUTIVIDADE INDUZIDA NAS FASES FERRO E PARALÉTRICA DOS COPOLÍMEROS P(VDF/TrFE) DE RAZÕES MOLARES 60:40 E 70:30.	
	Cunha, H. N. da, Faria, R. M.....	278
12:00	MEDIDAS DE TRANSPORTE EM FILMES DE POLÍMEROS CONDUTORES	
	Santos, F. L. dos, Melo, C. P. de	278

Workshop: Ressonância Magnética em Sistemas Biológicos II (RES, BIO)

Coordenador: Rafael Calvo

Local: Sala 05

11:00	SPIN LABELING ON INTERCELLULAR LIPID LAMELLAE IN STRATUM CORNEUM	
	Alonso, A.	289
11:40	Aplicações Médicas da Ressonância Magnética em São Carlos	
	Panepucci, H., Tannús, A., Martins, M., Vidoto, E., Bonagamba, T.....	289

Interfaces e Superfícies (SEM)

Coordenador: Marco A. Amato

Local: Sala 01

11:00	RUGOSIDADE EM INTERFACES DE InP/InAs	
	Brasil, M. J. S. P., Nahory, R. E., Tamargo, M. C.....	311
11:40	CARACTERIZAÇÃO ÓTICA DE INTERFACES SEMICONDUTORAS CRESCIDAS PELO MÉTODO MOVPE	
	GUIMARÃES ¹ , F. E. G.....	311
12:00	Estrutura atômica e propriedades eletrônicas das superfícies [110] de ZnS, ZnSe e ZnTe	
	Alves, J. L. A., Watari, K., Ferraz, A. C.....	312

Medidas Elétricas e Magnéticas em Supercondutores II (SUC)

Coordenador: Mauro Dória

Local: Sala 11

11:00	Flutuações Diamagnéticas no sistema $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ com $H bfab$ para Campos de até 5 T	
	Salem-Sugui Jr, S., Lima, O. F. de, Silva, E. Z. da.....	328
11:20	FLUTUAÇÕES CRÍTICAS E GAUSSIANAS NA CONDUTIVIDADE ELÉTRICA DO $YBa_2Cu_3O_7$	
	Pureur, P., Costa, R. M., RODRIGUES JÚNIOR, P., Schaf, J., Kunzler, J. V.....	328
11:40	POSSIBILIDADE DA EXISTÊNCIA DE SUPERCONDUTIVIDADE INDUZIDA POR CAMPO MAGNÉTICO EM CERÂMICAS DE $YBa_2[(CuO)_{1-x}(FeS)_x]_3O_{4-\delta}$	
	Ramos, A. S., Ferreira, J. M., Aguiar, J. A.....	328
12:00	Experimental Investigation of Mixed State Peculiarities in a Rb_3C_{60} Fullerene Superconductor	
	Buntar, V. A.....	329

Filmes Finos: Miscelânea (SUF)

Coordenador: Dante Homero Mosca Jr.

Local: Sala 10

11:00	DE HAAS - VAN ALPHEN'S OSCILLATIONS IN THIN FILMS FOR ARBITRARY ORIENTATIONS OF MAGNETIC FIELD	
	Dodonov, V.....	338

11:20	EFEITO DE CARGA DE COMPENSAÇÃO INTERNA NA ESTABILIDADE DE FILMES FERROELÉTRICOS HETEROGÊNEOS. <i>Carrico, A. S.</i>	338
11:40	Cálculo da Densidade Espectral de Impureza no Modelo de Anderson-Newns Generalizado. <i>Oliveira, L. N., Yoshida, M.</i>	338
12:00	TEORIA ESTATÍSTICA DAS PROPRIEDADES ATÔMICAS DAS SUPERFÍCIES DOS CRISTAIS ANARMÔNICOS <i>Zubov, V. I.</i>	339

Tarde (Posters) 14:00 - 16:00

Física Atômica e Molecular: Experiência (ATO)

Coordenador: C. A. F. Leite

Local: Modulo E12

- P01 ESTUDO DA INFLUÊNCIA DO DESBALANÇO DE INTENSIDADE E DESALINHAMENTOS ASSIMÉTRICOS DOS FEIXES LASER NAS CONFIGURAÇÕES ESPACIAIS DE ÁTOMOS CONFINADOS NUM TRAP MAGNETO-ÓTICO
Faria, C. F. de M., Marcassa, L. G., Bagnato, V. S...... 85
- P02 Estudos energéticos para as moléculas NH_3 , NiNH_3 e FeNH_3
Terra, J., Guenzburger, D...... 85
- P03 ACRÉSCIMO CONTROLADO DE ÍONS NA CHAMA E SEU EFEITO NA FORMAÇÃO DE FULIGEM
Ferrari, C. A., Nagai, E. Y., Penna, A. F. S...... 85
- P04 COMPORTAMENTO DO NÚMERO DE ÁTOMOS APRISIONADOS EM ARMADILHAS MAGNETO-ÓPTICAS
Araujo, M. T. de, Milori, D. M. B. P., Guedes, I., Zilio, S. C., Bagnato, V. S...... 86
- P05 ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL DO DIFLUOROMETANO
Zerbetto, S. C., Vasconcellos, E. da C. C...... 86
- P06 TEMPERATURE-ANISOTROPIC MOT
Milori, D. M. B. P., Surdutovich, G. I...... 86
- P07 DIFERENTES MÉTODOS DE OBTENÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DAS FORMAS METAESTÁVEIS DE ALGUNS NITROCOMPOSTOS AROMÁTICOS
Bassi, D., Sakane, K. K...... 86
- P08 SOBRE A POSIÇÃO DOS ÁTOMOS PARADOS NUMA MÁQUINA DE DESACELERAÇÃO DE FEIXES ATÔMICOS
Leite, C. A. F., Bagnato, V. S...... 87
- P09 DESSORÇÃO DE ÍONS SECUNDÁRIOS DE H^+ POR ÍONS ENERGÉTICOS
Pereira, J. A. M., Leite, C. V. de B., Baptista, G., Silveira, E. F. da, Moura Filho, J. J. de..... 87
- P10 DESACELERAÇÃO DE Cs PELA TÉCNICA DE SINTONIA ZEEMAN
Santos, M. S., Flemming, J., Tuboy, A. M., Bagnato, V. S...... 87
- P11 DESSORÇÃO DE H^+ INDUZIDA POR ÍONS MULTIPLICAMENTE CARREGADOS
Pereira, J. A. M., Baptista, G. B., Leite, C. V. B., Moura Filho, J. J. de, Silveira, E. F. da..... 88
- P12 ESTUDO ESPECTROSCÓPICO DO COMPOSTO 2,5-BIS(2'-BENZOXAZOLIL) HIDROQUINONA E SEUS DERIVADOS METILADOS
Andreazza, M. L., Cunha, S. L. S., Souto, A. A., Stefani, V...... 88

Modelos Teóricos e Métodos Físicos Aplicados Sistemas de Origem Biológica (BIO)

Coordenador: Amando S. Ito

Local: Modulo E08

- P01 "FOLDING" DE PROTEÍNA NUMA REDE CÚBICA: ALGORITMO PARA ENUMERAÇÃO DE CONFORMAÇÕES "CSA" (COMPACT SELF-AVOIDING CONFORMATIONS)
Reis, L. M. dos, Caliri, A...... 99
- P02 TUNELAMENTO DE ELÉTRON EM ESTRUTURAS SECUNDÁRIAS MODELOS DE PROTEÍNA.
Andrade, P. C. P. de, Onuchic, J. N...... 100

P03	RESPOSTA DE UM NEURONIO REGIDO PELAS EQUAÇÕES DE HODGKIN-HUXLEY SOB ESTIMULOS REGULARES, CAOTICOS E ALEATORIOS. <i>Baldo, M. V. C., Fiedler-Ferrara, N., Oiwa, N. N.</i>	100
P04	ESPECTRO VIBRACIONAL LONGITUDINAL DA α -HELIX. <i>Fornés, J. A.</i>	100
P05	DESENVOLVIMENTO DE UM "SOFTWARE" PARA SIMULAÇÕES DE MECÂNICA E DINÂMICA MOLECULAR DE INTERFACES BIOLÓGICAS. <i>Mundin, K. C., Bisch, P. M., Pascutti, P. G.</i>	101
P06	Transporte iônico e processamento de informação num "demônio de Maxwell" biológico. <i>Lima, N. F., Procópio, J., Henriques, V. B., Ito, A. S.</i>	101
P07	Modelo para Transporte Ativo em Biomembranas com Formação de Dímeros e Complexos <i>Vieira, F. de M. C., Bisch, P. M.</i>	101
P08	MODELOS DE POISSON-BOLTZMANN E DEBYE-HUECKEL PARA MICELAS ZWITTERIÔNICAS <i>Feitosa, E., Agostinho Neto, A.</i>	102
P09	DISTRIBUICAO DE CONTRAIONS EM TORNO DE UM POLIELETROLITO CILINDRICO <i>Fossey, M. A., Ruggiero Neto, J.</i>	102
P10	ESTUDO TEÓRICO SOBRE A FORMAÇÃO DE ESTRUTURAS DISSIPATIVAS EM CÉLULAS DE DIÁLISE. <i>Lopes, F. J. P., Bisch, P. M., Costa, M. C. P.</i>	102
P11	ESPÉCIES CO ₂ - COM SIMETRIA ORTORR OMBICA E AXIAL EM APATITAS DE ESMALTES DENTÁRIOS <i>Oliveira, L. M. de, Rossi, A. M., Vugman, N. V.</i>	102
P12	DOSIMETRIA POR RPE DE ARAGONITAS DE ORIGEM BIOLÓGICA <i>Schramm, D. U. da S., Sobral, R. R., Rossi, A. M.</i>	103
P13	DOSIMETRIA POR EPR DE FRUTAS TROPICAIS IRRADIADAS. <i>Jesus, E. F. O. de, Lopes, R. T., Rossi, A. M.</i>	103
P14	DETECÇÃO POR RPE DE CARBONO 13 EM BIOAPATITAS <i>Vugman, N. V., Pinhal, N. M., Rossi, A. M.</i>	103
P15	DESENVOLVIMENTO DE UM BIOSUSCEPTÔMETRO AC PARA A GERAÇÃO DE IMAGENS DO TRATO GASTRO-INTESTINAL <i>Moreira, M., Baffa Filho, O.</i>	103
P16	INFLUÊNCIAS DE DISTRIBUIÇÕES DE INTERAÇÕES RANDÔMICAS NO "FOLDING" DE PROTEÍNAS. <i>Faria Junior, M., Caliri, A., Silva, M. A. A. da</i>	104
P17	THEORETICAL AND EXPERIMENTAL RESULTS FOR THE MEAN DISTANCES BETWEEN MONOMERS AS A FUNCTION OF THEIR IONIZATION <i>Ruggiero Neto, J., Chahine, J.</i>	104
P18	FLUTUAÇÕES TERMODINÂMICAS EM BI-CAMADAS LIPÍDICAS COM RELEVÂNCIA A FORMAÇÃO DE POROS. <i>Fornés, J. A., Procópio, J.</i>	104
P19	O FITOTRÔN <i>PENA, A. F. V.</i>	105

Propriedades e Caracterização (CCP)

Coordenador: Laercio Gomes

Local: Modulo E04

P01	Dimensionalidade da estrutura eletrônica de super-redes δ - GaAs Gonçalves, L. C. D., Henriques, A. B.	121
P02	DESENVOLVIMENTO DA TEXTURA DE DEFORMAÇÃO EM CHAPAS LAMINADAS DE ZIRCÔNIO Mitteregger, L. M. F. G., Lima, N. B. de	121
P03	Correntes de Despolarização Termicamente Estimuladas (CDTE) em Berilo Natural. Vianna, C. A. P., Blak, A. R.	121
P04	Análise da eficiência de fontes de luz visível utilizadas para polimerizar resinas Duran, J. E. R., Silva, I. R., Vinha, D.	122
P05	ESPECTROSCOPIA RAMAN EM CERÂMICAS FERROELÉTRICAS DO TIPO ABO_3 Pizani, P. S., Galzerani, J. C., Garcia, D., Eiras, J. A.	122
P06	Emissão Termoluminescente do Topázio Souza, D. do N., Valério, M. E. G., Lima, J. de	122
P07	CENTROS DE DEFEITOS PRODUZIDOS POR IRRADIAÇÃO COM ELÉTRONS EM CRISTAIS DE BaLiF ₃ . Prado, L., Vieira Junior, N. D., Gomes, L., Baldochi, S. L.	122
P08	PROPRIEDADES TERMOLUMINESCENTES DE QUARTZO DE SEDIMENTOS ARENOSOS Arenas, J. A., Matsuoka, M., Watanabe, S.	123
P09	PSEUDO ORIENTED DIPOLE CALCULATION OF LATTICE POTENTIAL AND PHASE INTERPRE- TATION IN KCN:KBr MIXED SYSTEM Bourson*, P., Durand, D.	123
P10	TRATAMENTOS TÉRMICOS E ILUMINAÇÃO ULTRAVIOLETA DA AMETISTA Cortezão, S. U., Blak, A. R.	123
P11	ABSORÇÃO ÓPTICA DE VIDROS ALUMINOBORATOS DE BÁRIO DOPADOS COM FERRO Pontuschka, W. M., Oliveira, M. I. T. de, Rabbani, S. R.	123
P12	ABSORÇÃO ÓPTICA DO QUARTZO Bemelmans, D., Blak, A. R.	124
P13	CARACTERIZAÇÃO DE NÍVEIS PROFUNDOS EM ESTRUTURAS SEMICONDUTORAS ATRAVÉS DA TÉCNICA DE ESPECTROSCOPIA EM FREQUÊNCIA DE FOTOCONDUTIVIDADE Lourenço, M. A.	124
P14	Comportamiento con la Temperatura del EFG que actúa sobre ¹⁸¹ Ta en HfO ₂ Ayala, A., García, A. L., Alonso, R.	124
P15	Estudio TDPAC del SrHfO ₃ Presa, P. de, Ayala, A., García, A. L.	124
P16	Formação de Dímeros Mistos no Fluoreto de Cálcio dopado com íons Terras Raras Souza, S. S., Blak, A. R.	124
P17	NÃO LINEARIDADES EM NOVAS MATRIZES VÍTREAS Cardoso, T. V., Duarte, A. S., Aranha, N., Barbosa, L. C., Alves, O. L., Fragnito, H. L.	125
P18	EVIDÊNCIAS DO MOVIMENTO DE DESLOCAÇÕES EM CRISTAIS IÔNICOS SUBMETIDOS À APLICAÇÃO DE PRESSÃO MECÂNICA Moraes, A. C. de, Yoshimura, E. M., Okuno, E.	125

P19	VARIAÇÃO COMPOSICIONAL EM MONOCRISTAIS DE $Hg_{1-x}Cd_xTe$ CRESCIDOS PELO MÉTODO BRIDGMAN. Salgado, E. G. C., Pagnano, C. A. G., Franzan, A. H., An, C. Y.	125
P20	RPE DE IMPUREZAS DE Fe^{+3} E Cr^{+3} EM FIBRAS DE $LiNbO_3$. Santana, R. C., Terrile, M. C., Andreeta, M. R. B., Hernandez, A., Lima, C. J. de.....	125
P21	ESTUDO DA INFLUÊNCIA DE DEFEITOS TOPOLÓGICOS EM FENÔMENOS DE TRANSPORTE Furtado, C. B. S., Moraes, F.....	126

Propriedades Estruturais, Fractais e Fraturas (EST)

Coordenador: Roberto F. S. Andrade

Local: Modulo E09

P01	ESTATÍSTICA DE FRATURAS E FRAGMENTOS EM FRAGMENTAÇÃO DIFUSIVA Gomes, M. A. de F., Sales, T. R. de M.....	162
P02	UM MODELO PARA FRATURAS EM MATERIAIS FIBROSOS. Bernardes, A. T., Moreira, J. G.....	162
P03	RUGOSIDADE E DIMENSÃO FRACTAL DO PAPEL RASGADO Moreira, J. G., Silva, J. K. L. da, Kamphorst, S. O., Menezes Sobrinho, I. L., Bernardes, A. T.....	162
P04	MÉTODO DA RUGOSIDADE PARA A DETERMINAÇÃO DA DIMENSÃO FRACTAL DE ESTRUTURAS AUTO-AFINS. Moreira, J. G., Silva, J. K. L. da, Kamphorst, S. O.	162
P05	INFLUÊNCIA DA GRADE NO ALGORITMO DE CONTAGEM DE CAIXA Yamaguti, M., Prado, C. P. C. do.....	162
P06	SEQUÊNCIA DE FIBONACCI DE QUARTA ORDEM ASSOCIADA A UMA SIMETRIA ENEAGONAL NÃO PERIÓDICA Franco, B. J. de O., Costa, B. V. da, Inacio, E. C., Licinio, P., Pimenta, M. A.....	163
P07	DIMENSIONALIDADE E PROLIFERAÇÃO EXPONENCIAL NA REDE DE BETHE Pádua, A. de, Miranda Neto, J. A. de, Moraes, F.	163
P08	PROPRIEDADES DE ESCALA DO CRESCIMENTO DE UMA CULTURA DE BACTÉRIAS. Cunha, M. S., Siqueira, A. F.	163
P09	MODELO DE POTTS NA GAXETA DE SIERPINSKI: UM TRATAMENTO VIA MATRIZES DE TRANSFERÊNCIA Andrade, R. F. S.....	164
P10	TERMODINÂMICA DO MODELO DE ISING SUBMETIDO A CAMPO EXTERNO EM FRACTAIS DO TIPO SIERPINSKI GASKET Redinz, J. A., Magalhães, A. C. N. de.....	164
P11	SEQUENCIA DE FIBONACCI DE TERCEIRA ORDEM ASSOCIADA A UMA SIMETRIA HEPTAGONAL NÃO PERIÓDICA (II) Franco, B. J. de O., Costa, B. V. da, Inacio, E. C., Licinio, P., Pimenta, M. A.....	164
P12	GENERALIZED LOCALISATION LENGTHS AND WAVELENGTHS OF VIBRATIONAL MODES ON FRACTAL LATTICES. Petri, A., Ruocco, G.....	164

Vidros de Spin e Redes Neurais (EST)

Coordenador: Fernando D. Nobre

Local: Modulo E10

P01	Multifractalidade do Modelo de Vidro-de-Spin de Ising em redes Hierárquicas generalizadas <i>Almeida, J. R. L. de, Coutinho, S., Curado, E. M. F.</i>	161
P02	Instabilidades de Almeida-Thouless para o Vidro-de-Spin de Potts com quatro estados <i>Nogueira Junior, E., Nobre, F., Almeida, J. R. L. de, Coutinho, S.</i>	169
P03	O Modelo de Ghatak e Sherrington com spin semi-inteiro <i>Silva, R. T. da, Yokoi, C. S. O., Salinas, S. R. A.</i>	169
P04	O ESPAÇO DE FASE DAS INTERAÇÕES EN REDES NEURAIIS TOTALMENTE CONEXAS COM SIMETRIA DEFINIDA <i>Theumann, A.</i>	169
P05	GENERALIZAÇÃO COM RUÍDO E ESTRUTURA DOS ESTADOS META-ESTÁVEIS NO MODELO DE HOPFIELD. <i>Krebs, P. R., Theumann, W. K.</i>	170
P06	MODELO "NAÏVE" PARA VIDRO DE SPINS COM $S = 1$ <i>Costa, F. A. da, Nobre, F. D.</i>	170
P07	Expansões de baixas temperaturas e recuperação de imagens <i>Mattos, C., Caticha, N.</i>	170
P08	GENERALIZAÇÃO EM REDES DE NEURÔNIOS <i>Branchtein, M. C., Arenzon, J. J., Iglesias, J. R., Almeida, R. M. C. de</i>	170
P09	PRÉ-PROCESSAMENTO EM REDES NEURAIIS <i>Carvalhoes, C. G., Penna, T. J. P., Oliveira, P. M. C. de</i>	171
P10	Estudo da Bacia de Atração do Modelo de Hopfield diluído com padrões correlacionados <i>Barbosa, M. C. B., Theumann, W. K.</i>	171
P11	"SONHOS NORMALIZADOS" EM REDES NEURAIIS DE ATRADORES <i>Kuva, S. M., Caticha, N.</i>	171
P12	INTERPOLAÇÃO ENTRE OS VIDROS DE SPINS XY E POTTS VETORIAL <i>Piôlho, F. A. P., Nobre, F. D.</i>	171
P13	EFEITOS DE CAMPO MAGNÉTICO ALEATÓRIO NO MODELO SHERRINGTON-KIRKPATRICK <i>Soares, R. F., Nobre, F. D., Almeida, J. R. L. de</i>	171

Sistemas Quânticos (EST)

Coordenador: Evandro Mello

Local: Modulo E11

P01	VIDRO DE SPIN DE ISING EM CAMPO TRANSVERSO <i>Santos, R. R. dos, Boechat, B.</i>	165
P02	DINÂMICA NO MODELO DE ISING CLÁSSICO EM UM CAMPO TRANSVERSO <i>Bonfim, O. F. de A., Florencio Jr, J.</i>	165
P03	TRANSIÇÕES DE FASE NO MODELO DE HUBBARD 1-D <i>Luz, D. M., Santos, R. R. dos</i>	165
P04	O EFEITO DE DESORDEM COM CORRELAÇÕES ESPACIAIS DE LONGO ALCANCE NA CONDUTIVIDADE DE UM METAL <i>Varriale, M. C., Theumann, A.</i>	166

P05	MECÂNICA ESTATÍSTICA QUÂNTICA DE NÃO EQUILÍBRIO DE UM MODELO SOL/ÚVEL NÃO TRIVIAL Scherer, C.....	166
P06	Correlações Quânticas em uma nova Formulação Semi-Clássica. Monaco, R. E. L., Recami, E.	166
P07	PHENOMENOLOGICAL MODEL OF BROKEN SYMMETRY FOR SUPERCONDUCTIVITY. Ferraz, A., Viet, N. A.	166
P08	A EQUAÇÃO DE PSEUDO-DIFUSÃO E A ENTROPIA DE INFORMAÇÃO DOS ESTADOS COERENTES COMPRIMIDOS. Mizrahi, S. S., Marchioli, M. A.....	167
P09	A COMPETIÇÃO ENTRE DISSIPACÃO E AMPLIFICAÇÃO DA ENERGIA PARA A LAGRANGEANA DE HAVAS. Mizrahi, S. S., Marchioli, M. A.	167
P10	A ENTROPIA DE INFORMAÇÃO DOS ESTADOS COERENTES COMPRIMIDOS PARA A HAMILTONIANA DE BATEMAN-CALDIROLA-KANAI (B.C.K.). Mizrahi, S. S., Marchioli, M. A.....	167
P11	O MODELO DE HEISENBERG ANTI-FERROMAGNÉTICO SPIN 1/2 NUMA REDE TRIDIMENSIONAL APLICADO AOS ÓXIDOS DE COBRE Malvezzi, A. L., Alcaraz, F. C.	167
P12	RENORMALIZATION GROUP STUDY OF THE t_J MODEL Mello, E. V. L. de.....	168
P13	RECURRENCE AND DECOHERENCE TIMES OF QUANTUM STATES IN A MEASUREMENT PROCESS. Mizrahi, S. S., Moussa, M. H. Y., Otero, D.	168
P14	Cálculo de Monte Carlo para o estado fundamental do antiferromagneto de Heisenberg quântico bidimensional. Sauerwein, R. A., Oliveira, M. J. de.....	168
P15	Propiedades variacionales de la entropía relativa, en mecánica estadística cuántica. Neirotti, J. P., Raggio, G. A.....	168

Cristais Líquidos (LIQ)

Coordenador: Rosângela Itri

Local: Modulo E07

P01	DIFERENÇAS EXPERIMENTAIS ENTRE OS VALORES DE VOLUME ESPECÍFICO MEDIDOS COM DENSÍMETRO E OS MEDIDOS COM DILATÔMETRO EM SISTEMAS LIOTRÓPICOS, APRESENTAÇÃO E DISCUSSÃO DE RESULTADOS Pinto, A. V. de A., Barbosa, A. A.....	194
P02	UM MODELO DE TEORIA DE CAMPOS PARA A FASE NEMÁTICA: A TRANSIÇÃO NEMÁTICO-ISOTRÓPICO. Simões, M., Evangelista, L. R., Palangana, A. J.....	194
P03	INSTABILIDADES TÉRMICAS EM MESOFASES NEMÁTICAS LIOTRÓPICAS UNIAXIAIS. Arrotéia, A. A., Palangana, A. J., Figueiredo Neto, A. M.	194
P04	STRUCTURAL ANALYSIS OF THE LYOTROPIC POLYMORPHISM OF FOUR-STRANDED AGGREGATES OF 2'-DEOXYGUANOSINE 3'-MONOPHOSPHATE DERIVATIVES Mariani, P., Morais, M. M. D., Gottarelli, G., Spada, G. P., Delacroix, H., Tondelli, L.	195
P05	ESTUDOS PRELIMINARES DE ESPALHAMENTO RAYLEIGH NUM CRISTAL LÍQUIDO FERRO-NEMÁTICO Santos, M. B. L., Amato, M. A.....	195

P06	ESTUDO DO EFEITO DE "BACKFLOW" EXTENDIDO A FASE NEMÁTICA CALAMÍTICA (N_c) DE UM CRISTAL LÍQUIDO LIOTRÓPICO <i>Santos, M. B. L.</i>	195
P07	PROCESSOS DE ORIENTAÇÃO DE UM CRISTAL LÍQUIDO LIOTRÓPICO EM CAMPO MAGNÉTICO <i>Turchiello, R. de F., Oliveira, E. A. de.</i>	196
P08	SÍNTESE E PURIFICAÇÃO DE DECILSULFANATO DE SÓDIO E EXPLORAÇÃO DE SEU DIAGRAMA DE FASES EM SISTEMAS LIOTRÓPICOS. <i>Barbosa, A. A., Pinto, A. V. de A.</i>	196
P09	MEDIDA DA POLARIZAÇÃO ESPONTÂNEA DE CRISTAIS LÍQUIDOS FERROELÉTRICOS. <i>Martins, O. G., Figueiredo Neto, A. M.</i>	196
P10	ESTUDO SOBRE A EXISTÊNCIA DE FASES NEMÁTICAS EM MISTURAS LIOTRÓPICAS DO TIPO REVERSO. <i>Magalhães, M., Figueiredo Neto, A. M.</i>	196
P11	ESTUDO DA INTERAÇÃO DE FERROFLUIDOS DE BAIXA ANISOMETRIA COM CRISTAIS LÍQUIDOS. <i>Matuo, C. Y., Figueiredo Neto, A. M., Tourinho, F. A.</i>	197
P12	ESTUDO DO DIAGRAMA DE FASES DA MISTURA LAURATO DE POTÁSSIO/CLORETO DE DECIL AMÔNIO/ÁGUA/SULFATO DE BRUCINA HEPTAHIDRATADO. <i>Pereira, R. A. R., Figueiredo Neto, A. M.</i>	197
P13	Caracterização da ancoragem em mostradores de cristal líquido nemático torcido produzidos no IM/CTI <i>Amaral, A. C. C. do, Mammana, A. P., Auer, M., Lesske, H. M., Vargas, H.</i>	197
P14	SÍNTESE DE CRISTAL LÍQUIDO FERROELÉTRICO <i>Santos, R. T. dos, Figueiredo Neto, A. M.</i>	198
P15	Medidas de Birrefringências : estática e dinâmica em ferrofluidos à base de $C_0Fe_2O_4$ e γFe_3O_4 <i>Silva, M. de F. da, Figueireso Neto, A. M., Perzynski, J. B.</i>	198

Metais e Ligas (MMM)

Coordenador: Afonso Gomes

Local: Modulo E01

P01	Estudo das interações hiperfinas em ligas do sistema pseudo-binário $Ce(Fe_{1-x}Al_x)_2$ por espectroscopia Mössbauer de ^{57}Fe . <i>Pérez, C. A. S., Baggio-Saitovitch, E., Cunha, S. F. da</i>	236
P02	ESTUDO DO CAMPO MAGNÉTICO HIPERFINO NO SISTEMA ISING $Fe_xZn_{1-x}F_2$. <i>Araújo, J. H. de, Cunha, J. B. M. da, Vasquez, A., Montenegro, F. C., Rezende, S. M., Coutinho Filho, M. D.</i>	236
P03	IMPUREZAS DE Fe EM Mo e Nb <i>Petrilli, H. M., Frota-Pessoa, S.</i>	236
P04	Campo hiperfino magnético nas ligas de Heusler Co_2YZ ($Y = V, Nb, Ta, Cr$; $Z = Al, Ga$). <i>Pendl Júnior, W., Carbonari, A. W., Attili, R. N., Saxena, R. N., Olzon-Dionysio, M., Souza, S. D. de</i>	237
P05	Estudo de Fosfatos da Série Hureaulita <i>Moreira, L. de F., Domingues, P. H., Mattievitch, E.</i>	237
P06	Estudo do $Li_xFe_3O_4$ <i>Domingues, P. H., Neto, J. M.</i>	237
P07	Estudo sistemático do campo hiperfino magnético nas ligas de Heusler Co_2YZ . <i>Carbonari, A. W., Saxena, R. N., Pendl Júnior, W., Attili, R. N.</i>	237

P08	SIMULAÇÕES DO RUÍDO BARKHAUSEN EM FERROMAGNETOS: UMA FERRAMENTA PARA A INTERPRETAÇÃO DOS EXPERIMENTOS? <i>Sommer, R. L., Gomes, A. A.</i>	238
P09	RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR NOS COMPOSTOS $Gd_2Fe_{17}N_x$ <i>Sarthour⁺, R., Gama, S., Colucci, C. C., Riedi, P. C., Guimarães, A. P.</i>	238
P10	Magnetic effects of a stress-strain field in $Pr_2Fe_{17}N_x$ alloys <i>Persiano, A. I. C., Campos, A. A., Alipio Mansur, R. A., Batista, F. A., Ardisson, J. D., Rogerio Bertoloni, M. R., Gama, S., Colucci, C. C.</i>	238
P11	IRRADIAÇÃO DE POLIOLEFINAS COM FEIXE DE ELÉTRONS- ESTUDO DA RETICULAÇÃO DE POLIETILENO CLOROSULFONADO VIA RADICAIS LIVRES. <i>Andrade, L. D., Amaral, L. Q. do, Akcelrud, L.</i>	239
P12	INFLUÊNCIA DA PRATA NAS CARACTERÍSTICAS DE UMA LIGA <i>Cu - Al - Ag (83% Cu- 12%Al-5%Ag)</i> <i>Adorno, A. T., Beatrice, C. R. S., Sigoli, F. A.</i>	239
P13	FOCALIZAÇÃO DE FEIXE ELETRÔNICO EM FORNO DE FUSÃO POR ZONA FLUTUANTE: SIMULAÇÃO NUMÉRICA <i>Mendonça, C.</i>	239
P14	Estudo Mössbauer de Ligas do Sistema $Fe_2(Co_xNb_{1-x})$ <i>Raposo, M. T., Ardisson, J. D., Persiano, A. I. C., Mansur, R. A.</i>	239
P15	Estrutura eletrônica de intermetálicos pseudobinários de Laves <i>Silva, C. M. da, Gomes, A. G.</i>	240
P16	ESTUDO DE ORDEM DE CURTO ALCANCE NA LIGA NIQUEL-COBALTO <i>Beatrice, C. R. S., Cilense, M., Garllip, W.</i>	240
P17	ESTUDO COMPARATIVO DO GCE EM SISTEMAS HEXAGONAIS <i>MELLO, L. A. D., PETRILLI, H. M., FROTA-PESSÔA, S.</i>	240
P18	CÁLCULOS DE CAMPOS HIPERFINOS NOS SÍTIOS DE Y SUBSTITUÍDOS POR TERRAS RARAS EM YFe_2 E YNi_2 <i>Guenzburger, D., Sobral, R. R., Guimarães, A. P.</i>	240
P19	APARECIMENTO DE MOMENTOS MAGNÉTICOS LOCALIZADOS EM LIGAS ANTIFERRO-MAGNÉTICAS DE CROMO-VANÁDIO <i>Oliveira, A. J. A. de, Ortiz, W. A., Camargo, P. C. de</i>	241
P20	ATENUACIÓN ULTRASÓNICA DEBIDA A LAS DISLOCACIONES Y DEFECTO DE MÓDULO ASOCIADO, EN CRISTALES DE COBRE DE ALTA PUREZA <i>Gobbi, A. O. M., Eiras, J. A.</i>	241
P21	Transição primeira-segunda ordem no sistema intermetálico (Er.Tb)Co ₂ <i>Takeuchi, A. Y., Lima, L. C. S. de, Cunha, S. F. da</i>	241
P22	ESTRUTURA ELETRÔNICA PARA IMPUREZAS INTERSTICIAIS EM SISTEMAS METÁLICOS : APLICAÇÃO PARA IMPUREZA DE Fe EM Zr HEXAGONAL <i>Frota-Pessôa, S.</i>	242
Lasers Espectroscopia, Fibras Óticas e Holografia (OTI)		
Coordenador: Nelia Ferreira Leite		
Local: Modulo E02		
P01	ANÁLISE DA FORMAÇÃO DE MODOS EM UM LASER DE VAPOR DE COBRE COM CAVIDADE INSTÁVEL AUTOFILTRANTE. <i>Anazawa, R. M., Rodrigues, N. A. S., Kam, K. Y., Ribeiro, A. L.</i>	260

P02	LASER DE $LiF : F_2^-$ BOMBEADO POR Nd:YAG CW CHAVEADO EM CAVIDADES ACOPLADAS <i>Rossi, W. de, Costa, F. E. da, Ranieri, I. M., Vieira Junior, N. D., Morato, S. P.</i>	260
P03	Laser de Nd:YLF Bombeado Colinearmente Por Laser de Argônio <i>Maldonado, E. P., Ranieri, I. M., Vieira Jr, N. D., Morato, S. P.</i>	260
P04	ESTABILIZAÇÃO DE LASERS DE DIODO USANDO CAVIDADE EXTERNA <i>Feitosa, C. C. de A., Tabosa, J. W. R., Vianna, S. S.</i>	260
P05	ESTABILIZAÇÃO DE LASERS SEMICONDUTORES EM CAVIDADE EXTERNA NA CONFIGURAÇÃO LITTMAN <i>Garcia, G. de A., Gomide, J. V. B., Cruz, F. da, Pereira, D., Scalabrin, A.</i>	261
P06	AUMENTO DO DESEMPENHO DE LASERS DE CONTATO DE FAIXA DE GaInAsSb/GaAlAsSb EMI-TINDO EM $2,2 \mu m$ POR ALTERAÇÃO DA DOPAGEM DA REGIÃO ATIVA <i>Silveira, A. C. F. da, Morosini, M. B. Z., Loural, M. S. S., Zuben, A. A. de G. V., Patel, N. B., Herrera-Pérez, J. L.</i>	261
P07	O EFEITO HANLE NÃO-LINEAR EM TRANSIÇÕES LASER DO AR^+ <i>Cruz, F. C. da, Gomide, J. V. B., Scalabrin, A., Pereira, D., Mirage, A.</i>	261
P08	ESPECTROSCOPIA A TRANSFORMADA DE FOURIER DE $^{12}HCOOH$ E $^{13}HCOOH$ <i>Luis, G. M. R. de S., Scalabrin, A., Pereira, D., Zilio, S. C.</i>	261
P09	$^{13}CD_3OH$: OBSERVAÇÕES E IDENTIFICAÇÃO DE NOVAS TRANSIÇÕES LASER NO INFRAVERMELHO LONGÍNQUO <i>Telles, E. M., Pereira, D., Scalabrin, A., Moraes, J. C. S. de</i>	262
P10	MEDIDA DA SEÇÃO DE CHOQUE DE ABSORÇÃO DO U_I POR ESPECTROSCOPIA OPTO-GALVÂNICA <i>Destro¹, M. G., Neri, J. W., Schwab, C., Rodrigues, N. A. S., Mirage, A.</i>	262
P11	HOLOCAD - DIFFRACTIVE IMAGING ANALISYS AND DEVELOPMENT OF A DEPTH SELECTOR <i>Lunazzi, J. J., Diamand, M., Jaramillo, J. M.</i>	262
P12	ESTUDO DE MEDIDA DE DEFORMAÇÃO PELO USO DA SHEAROGRAFIA <i>Rodrigues, E., Muramatsu, M., Lunazzi, J. J.</i>	262
P13	Reconstrução de Hologramas Temporais <i>Reigada, D. C., Tagliaferri, A. A.</i>	263
P14	TÉCNICAS PARA GRAVAÇÃO DE REDES DE BRAGG EM FIBRAS ÓTICAS <i>Kawase, L. R., Carvalho, I. C. dos S., Margulis, W., Valente, L. C. G.</i>	263
P15	SIMULAÇÃO NUMÉRICA PARA CARACTERIZAÇÃO DE GUIAS DE ONDA PLANARES <i>Garcia, C. R. S., Cesar, C. L., Barbosa, L. C., Aranha, N., Romano, A., Alves, O. L.</i>	263
P16	MONTAGEM DE UM LASER SEMICONDUTOR MONOMODO À CAVIDADE EXTERNA UTILIZANDO UM FILTRO ESPECTRAL À FIBRA ÓPTICA COMO ELEMENTO DE SINTONIA. <i>Rocco, M. T. M., Celaschi, S., Borin, F.</i>	264
P17	ESTUDO DE GRADES EM FIBRAS UTILIZANDO A TÉCNICA HEAT SCAN <i>Lacerda, M. de M., Margulis, W.</i>	264
P18	MODELO DE TAXA PARA O PROCESSO DE PREPARAÇÃO DE FIBRAS DOBRADORAS DE FREQUÊNCIA <i>Lesche, B., Mendonça, J. P. R. F. de, Margulis, W.</i>	264
P19	PERFIL RESULTANTE DE REDES HOLOGRÁFICAS GRAVADAS EM FOTORRESINA <i>Assunção, B. M., Costa, I. F. da, Lima, C. R. A. de, Cescato, L.</i>	264
P20	SINTONIA DE UM LASER DE CENTRO DE COR POR UM PAR DE PRISMAS <i>Peiro, G. P., Bustamante, A. N. P., Morato, S. P., Vieira Jr, N. D.</i>	265

Crescimento, Caracterização e Defeitos em Semicondutores (SEM)

Coordenador: Arnaldo Dal Pino Jr

Local: Modulo E03

P01	ESTADOS ELETRÔNICOS DE COMPLEXOS ENVOLVENDO COBRE E LÍCIO EM GERMÂNIO <i>Orellana, W. M., Assali, L. V. C.</i>	312
P02	“Softness” e Segregação de Impurezas em Semicondutores <i>Dal-Pino Jr, A.</i>	313
P03	Wire Crystals GaAs and InAs Grown by MBE on Porous Silicon <i>Lubyshev, D. L., Rossi, J. C., Gussev, G., Basmaji, P.</i>	313
P04	NOVO MÉTODO PARA DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS ÓPTICOS DE FILMES FINOS ANISOTRÓPICOS. <i>Fragalli, J. F., Misoguti, L., Surdotovich, G., Vitlina, R.</i>	313
P05	COMPORTAMENTO DE NÍVEIS PROFUNDOS METAESTÁVEIS COM O CAMPO ELÉTRICO EM AMOSTRAS DE GaAs-n SUBMETIDAS A RTA <i>Pascoal, H. B., Costa, J. A. P. da, Pudensi, M. A. A.</i>	313
P06	IMPLANTAÇÃO DUAL DE ÍONS DE BORO E CARBONO EM SILÍCIO. <i>Souza, J. P. de, Boudinov, H.</i>	313
P07	IMPLANTAÇÃO IÔNICA DE MAGNÉSIO EM ARSENETO DE GÁLIO <i>Hernandes, C. S., Swart, J. W., Souza, J. P. de</i>	314
P08	MEDIDAS DE $n(T)$ PARA AlGaAs COM ALTA DOPAGEM DE Si. <i>Soares, D. A. W., Ribeiro, G. M., Oliveira, A. G. de</i>	314
P09	UTILIZAÇÃO DO EFEITO PPC NO ESTUDO DA DISTRIBUIÇÃO DE Si em AlGaAs/GaAs COM DOPAGEM PLANAR. <i>Carvalho, A. T. G. de, Bezerra, J. C., Oliveira, A. G. de</i>	314
P10	CARACTERIZAÇÃO ELÉTRICA E ÓTICA DE UMA DOPAGEM PLANAR DE Si NAS PROXIMIDADES DE UMA HETEROJUNÇÃO Al _{0,3} Ga _{0,7} As/GaAs <i>Medeiros-Ribeiro, G. de, Oliveira, A. G. de</i>	315
P11	DEPOSIÇÃO DE SULFETO DE CÁDMIO VIA SOLUÇÃO QUÍMICA: PREPARAÇÃO E ANÁLISE <i>Assumpção, R. de T., Rabelo, A. P. B.</i>	315
P12	CARACTERIZAÇÃO DE SEMICONDUCTORES POR ESPALHAMENTO RAMAN <i>Silva, S. W. da, Pizani, P. S., Galzerani, J. C.</i>	315
P13	Modelo Microscópico do Aglomerado Complexo Mn ₄ em Silício <i>Lino, A. T., Assali, L. V. C., Leite, J. R.</i>	315
P14	Theory of Non-Steady State Electrical Characteristics of Metal-Insulator-Metal Structures with Schottky Barriers and Distributed Interface Impurity States. <i>Gupta, H. M.</i>	316
P15	MÉTODO SIMPLES PARA INVESTIGAÇÃO DE DISCORDÂNCIAS α e β POR DLTS. <i>Hümmelgen, I. A.</i>	316
P16	METAESTABILIDADES DE IMPUREZAS TIPO IV EM GaAs <i>Schmidt, T. M., Venezuela, P. P. M., Fazzio, A., Caldas, M. J.</i>	316
P17	VARIAÇÃO DA INTENSIDADE RHEED COMO MÉTODO DE OTIMIZAÇÃO “IN SITU” DOS PARÂMETROS DE CRESCIMENTO DO GaAs PELA TÉCNICA DE MBE. <i>Moreira, M. V. B.</i>	316
P18	DEFEITOS DE ANTI-SÍTIO E TIPO ANTI-SÍTIO EM GaP <i>Venezuela, P. P. M., Schmidt, T. M., Fazzio, A., Caldas, M. J.</i>	317

P19 ESTUDO ESTRUTURAL DE FILMES DE a-Ge:H <i>Mulato, M., Torriani, I. L., Chambouleyron, I.</i>	317
P20 OTIMIZAÇÃO DE FILMES DE a-Ge:H. <i>Fajardo, F., Zanatta, A. R., Mulato, M., Campomanes, R., Chambouleyron, I.</i>	317
P21 INVESTIGAÇÃO DOS ESTADOS DO ÁTOMO DOADOR EM n-AlGaAs <i>Scalvi, L. V. de A., Li, M. S., Minami, E., Oliveira, L. de</i>	318

Teoria (SUC)

Coordenador: Gerardo Martinez

Local: Modulo E13

P01 EFEITOS DA ANISOTROPIA NO CAMPO CRÍTICO DE SUPERFÍCIE H_{c3} <i>d'Almeida, F. M. R., Doria, M. M.</i>	329
P02 TRATAMENTO APROXIMADO DO MODELO DE HUBBARD DE TRÊS BANDAS <i>Bernhard, B. H., Gusmão, M. A. C., Iglesias, J. R.</i>	329
P03 CÁLCULOS DE SEGUNDA ORDEM NA FASE DESORDENADA DE SPINS DO MODELO DE EMERY PARA SUPERCONDUTORES DE HIGH- T_c . <i>Martínez, G., Iglesias, J. R., Anda, E. V.</i>	329
P04 GENERALIZED GINZBURG LANDAU THEORY FOR A SPIN GLASS SUPERCONDUCTOR <i>Kishore, R., Singh, P.</i>	330
P05 EFEITOS DINÂMICOS NA DESORDEM MAGNÉTICA DOS PLANOS DE Cu-O DEVIDOS A CORRELAÇÃO ELETRÔNICA. <i>Simões, A. S. da R., Martínez, G.</i>	330
P06 ON THE \vec{k} -DEPENDENCE OF THE HYBRIDIZATION IN TWO-BAND SUPERCONDUCTORS <i>Japiassú, G. M., Continentino, M. A., Troper, A.</i>	330
P07 ESTUDO DAS CONSTANTES UNIVERSAIS BCS PARA A SUPERCONDUTIVIDADE. <i>Coelho, A. L., Aguilera-Navarro, V. C.</i>	330
P08 RELAÇÕES DE ESCALA EM TEORIA DI GINZBURG-LANDAU <i>Doria, M. M., Andrade, S. C. B. de</i>	331
P09 Supercondutividade em Modelos de Gauge Planares Generalizados <i>DÓRIA, R. M., , Helayël-Neto, J. A.</i>	331

Propriedades Magnéticas e Estruturais, Aplicações em Metais (SUF)

Coordenador: Paulo H. Dionisio

Local: Modulo E06

P01 ANÁLISE DE ESTRUTURAS DE MULTICAMADAS Fe/Cu, Fe/Mo, Fe/Nd POR RAIO-X E ESPECTROSCOPIA MÖSSBAUER <i>Borges, J. F. M., Mosca, D. H., Schreiner, W. H.</i>	339
P02 PROPRIEDADES MAGNÉTICAS E MAGNETOELÁSTICAS DE MULTICAMADAS DE COBALTO/PALÁDIO <i>Viegas, A. D. C., Carara, M. A., Shelp, L. F., Schmidt, J. E.</i>	339
P03 ANISOTROPIA MAGNÉTICA EM FILMES DE Fe MONOCRISTALINOS CRESCIDOS POR EVAPORAÇÃO POR FEIXE DE ELÉTRONS <i>Carara, M. A., Schreiner, W. H., Schmidt, J. E.</i>	340
P04 Efeitos das interações Dipolares Magnéticas em Filmes Finos <i>Arruda, A. S. de, Arruda, A. S. de, Selzer, S., Majlis, N.</i>	340

P05	SIMULAÇÃO GRAFICA BI-DIMENSIONAL DE DEPOSIÇÃO DE FILME FINO EM SUBSTRATO INCLINADO <i>Damião, A. J., Novackoski, V.</i>	340
P06	SIMULAÇÃO DE DEPOSIÇÃO EPITAXIAL DE COBRE SOBRE SILÍCIO <i>Mors, P. M., Trein, P. E., Schreiner, W. II.</i>	340
P07	Análise Microscópica de Filmes Finos de TiN Depositados por IBAD <i>Alberts, L., Hubler, R.</i>	341
P08	Physical Characterization of Carbon Nitride Thin Films. <i>Chubaci, J. F. D., Watanabe, S., Ogata, K., Fujimoto, F.</i>	341
P09	AUTO-ORGANIZAÇÃO EM SUPERFÍCIES 2-D DURANTE A OXIDAÇÃO DE CO SOBRE Pt(100) <i>Maia, D. L., Andrade, R. F. S.</i>	341
P10	CEMS STUDY OF SUPERFICIAL IRON NITRIDES FORMED BY POS-DISCHARGE NITRIDING <i>Silva Sobrinho, A. S. da, Drago, V., Souza, A. R. de.</i>	341
P11	ESTUDO DE LIGAS DE FILMES FINOS DE Fe/Al COMO SUPERFÍCIES PROTETORAS NOS PROCESSOS DE CORROSÃO <i>Alexandre, J. L., Hübler, R., Baumvol, I. J. R., Hübler, R.</i>	342
P12	CÁLCULO DE ESTRUTURA ELETRÔNICA EM SUPERFÍCIES METÁLICAS USANDO O RS-LMTO-ASA <i>Peduto, P. R., Frota-Pessôa, S.</i>	342
P13	SOBRE AS PROPRIEDADES ATÔMICAS DE SUPERFÍCIES SINGULARES DE UM CRISTAL ANAR-MONICO COM REDE CÚBICA SIMPLES <i>Zubov, V. I., Baziruwiha, J. de D., Namontov, I. V.</i>	342
P14	ESTUDO TEÓRICO DAS MODIFICAÇÕES NA CONCENTRAÇÃO DE Na EM β' - ALUMINAS IRRA-DIADAS <i>Paula, C. A. D., D'Ajello, P. C. T.</i>	342
P15	PROPRIEDADES DE FILMES DUROS DE a-C:H INCORPORADOS COM SILÍCIO. <i>Baia Neto, A. L., Camargo Jr, S. de S.</i>	343
P16	On The Crystallization Of TiN Thin Films. <i>Chubaci, J. F. D., Watanabe, S., Sakai, T., Yamamoto, T., Nishiyama, S., Ogata, K., Suzuki, Y., Fujimoto, F.</i>	343
P17	FLUXO DE ENERGIA EM MATERIAIS ANISOTRÓPICOS COM GEOMETRIA CILÍNDRICA. <i>Vasconcelos, E. F., Farias, G. A., Oliveira, N. T., Almeida, N. S.</i>	344
P18	ADSORÇÃO DE MONÓXIDO DE CARBONO SOBRE AS SUPERFÍCIES DE Pd E DE Pd_xAg_{1-x} <i>Takahashi, H., Landers, R., Fazan, T. A., Nascente, P. A. de P.</i>	344
P19	Análises Microestruturais e de Superfície das Ligas Pd_xAg_{1-x} <i>Nascente, P. A. de P., Silva, M. de A. P. da, Takahashi, H., Landers, R., Castro, S. G. de, Kleiman, G. G.</i>	344

Técnicas de Caracterização, Aplicações em Ótica e Semicondutores (SUF)

Coordenador: Carlos Achete

Local: Modulo E05

P01	PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E ÓPTICAS DO HEXAMETILDISILOXANO POLIMERIZADO A PLASMAS DE CORRENTE CONTÍNUA E RÁDIO-FREQÜÊNCIA <i>Mota, R. P., Moraes, M. A. B. de</i>	345
P02	FILMES FINOS COMPÓSITOS PREPARADOS EM PLASMAS DE MISTURAS DE VAPOR DE COBRE, HÉLIO, OXIGÊNIO E HEXAMETILDISILOXANO. <i>Muribeca, R. A., Gonçalves, M. C., Lima, E. J., Marçal, N., Moraes, M. A. B. de, Nicola, J. H.</i>	345

P03 FOTOELETROQUÍMICA DE ÓXIDOS DE METAIS DE TRANSIÇÃO Barja, P. R., Gorenstein, A.	345
P04 Propriedades Ópticas do Silício Poroso Fujii, A. T., Onari, S., Arai, T.	346
P05 Descarga luminosa em oxigênio Maciel, H. S., Castro, I. de, Petraconi Filho, G., Massi, M.	346
P06 DETECÇÃO DE CH_3 ATRAVÉS DE REMPI DURANTE O CRESCIMENTO DE FILMES DE DIAMANTE EM UM REATOR CVD ASSISTIDO POR FILAMENTO QUENTE. Corat, E. J., Goodwin, D. G.	346
P07 CRISTALIZAÇÃO DE α -Si:H INDUZIDA POR Cu. Bernardino, L. A., Achete, C. A.	346
P08 REAÇÃO NA INTERFACE NO SISTEMA Cu/ α -Si:H. Bernardino, L. A., Achete, C.	347
P09 Caracterização de β - $FeSi_2$ obtido a partir de multicamadas de Fe/Si . Saul, C. K., Amaral, L., Schreiner, W. H.	347
P10 Medidas Temporais da Fotocorrente em Celulas Fotoeletroquímicas Soltz, D., Schwarzburg, K.	347
P11 Heterogeneidades em Superfícies de Vidros e o Contorno da Tripla Interface de Gotas de Água. Ziemath, E. C., Zanotto, E. D.	347
P12 ANÁLISE DE FILME FINO DE OURO DEPOSITADO SOBRE Si(100) USANDO STM. Bleser, R. A. S., Achete, C. A.	348
P13 Medidas de Espalhamento de Luz por Superfícies Semicondutoras Texturizadas Fotoeletroquimicamente Ferreira, N. G., Cescato, L. H. C.	348
P14 Campo e Potencial Elétrico em Geometrias Pontagudas Costa, P. M., Andion, N. P., Castilho, C. M. C. de.	348
P15 DETERMINAÇÃO DA ESPESSURA DE FILMES DE ALUMÍNIO UTILIZANDO-SE MÉTODOS NÃO DESTRUTIVOS Leme, D. G., Mitani, S. E., Salvador, V. L. R., Sato, I. M.	348
P16 MODELO PRÉ-IMPACTO PARA EMISSÃO IÔNICA DE SUPERFÍCIES: UMA EXTENSÃO DO MODELO DE EJEÇÃO POTENCIAL DE ELÉTRONS Silveira, E. F. da, Matos, M.	349
P17 Holografia de Elétrons: Física Básica e Tecnologia Gonçalves, M. A. M. S., Castilho, C. M. C. de.	349

Segundo Período da Tarde 16:15 - 18:30**Palestras Vespertinas – A**

Local: Sala 03

- 16:15 Magnetic fluctuations in superconductors
Acpli, G. 357
- 17:30 The Search for Superconductors with Higher T_c 's
Chu, C. W. 357

Palestra Vespertina – B

Local: Sala 04

- 16:15 NON LINEAR OPTICS IN ORGANIC CRYSTALS
Nunes, F. D., Melo, F. E. de A., Mendes Filho, J., Moreira, J. E. C. 358

Palestra Vespertina – C

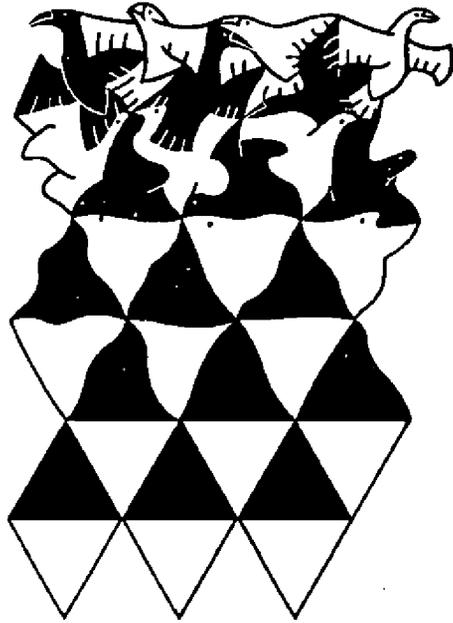
Local: Sala 01

- 16:15 SIMETRIAS NÃO-EUCLIDIANAS NA MATÉRIA CONDENSADA
Moraes, F. 359

Palestra Vespertina – D

Local: Sala 06

- 16:15 DON'T FORGET THE SOLVENT-WATER IN MOLECULAR ASSEMBLY AND IN SINGLE ACTIVE
 MACROMOLECULES
Rand, R. P. 359



Resumos

FÍSICA ATÔMICA E MOLECULAR

Feixes Atômicos, Átomos e Moléculas (ATO) - 19/05/93

PRODUÇÃO DE UM FEIXE ATÔMICO METAESTÁVEL DE CÁLCIO

GOMIDE, J. V. B.; CRUZ, F. C. DA; GARCIA, G. A.; PEREIRA, D.; SCALABRIN, A.

Departamento de Eletrônica Quântica, Instituto de Física, Unicamp

Apresentamos os primeiros resultados obtidos na produção de um feixe metaestável de cálcio. O sistema construído é bastante versátil, permitindo a obtenção de feixes atômicos no estado fundamental ou no metaestável de alcalinos terrosos, incluindo o magnésio, o estrôncio e o bário. O sistema para a produção do feixe atômico é constituído do forno e da descarga elétrica, na sua saída, ambas dentro de uma câmara evacuada por uma bomba turbomolecular, que está em comunicação, através de um colimador, com uma outra câmara evacuada por outra turbomolecular, onde são feitas as medidas no feixe atômico. O vácuo final do sistema, com o forno e a descarga funcionando, é melhor que 10^{-7} Torr. O feixe de cálcio sai do forno a 560°C por efusão, através do orifício de 2 mm de diâmetro. O catodo da descarga elétrica é colocado na saída do forno e ele é coberto com uma pasta de BaO e SrO, que emitem elétrons eficientemente com o aumento da temperatura. O anodo é feito com dois anéis separados e está a 1 cm do catodo. Entre o catodo e o anodo é aplicado um campo magnético para confinar os elétrons em trajetórias afuniladas. O feixe metaestável é produzido através das colisões elétron-átomo na descarga elétrica auto-sustentada. A eficiência da descarga em popular o primeiro tripleto ^3P metaestável é medida usando-se a fluorescência do decaimento $^3\text{P}_1 - ^1\text{S}_0$, a 657,2 nm, com uma fotomultiplicadora.

Suporte financeiro: FAPESP

ESTUDO DOS PROCESSOS DE CARGA E DESCARGA EM ARMADILHAS MAGNETO-ÓPTICAS DE ÁTOMOS NEUTROS

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

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

A técnica de aprisionamento de átomos neutros com pressão de radiação sugerida por Pritchard [1] e utilizada por Raab [2], foi usada neste trabalho para aprisionar átomos de sódio nas transições $3\text{S}_{1/2}$, $F = 1 \rightarrow 3\text{P}_{3/2}$, $F' = 0$ e $3\text{S}_{1/2}$, $F = 2 \rightarrow 3\text{P}_{3/2}$, $F' = 3$, nas tem-

peraturas de 18 e 50°C . Esta técnica consiste de uma armadilha magneto-óptica onde três pares de feixes laser contrapropagantes em três dimensões interceptam-se no centro da armadilha numa região de campo magnético nulo oriundo de duas bobinas anti Helmholtz dispostas em uma das dimensões. Este campo magnético é do tipo $B = B_z$ e dá um incremento em energia aos átomos de sódio, isto é, $\Delta E = \mu m_s B = \mu m_s b z$.

Como modelo teórico termodinâmico usamos um gas rarefeito de Boltzmann e através da equação de taxa para este sistema que é $\frac{dN}{dt} = R - \frac{N}{\tau}$ (onde R é a taxa de captura dos átomos e $\frac{1}{\tau} = \gamma + \beta \eta_c$ é a taxa de perda por colisão dos átomos aprisionados entre si e com os átomos do gás de fundo) obtivemos as curvas teóricas que mostram os processos de carga e descarga na armadilha.

Observamos experimentalmente o comportamento dos tempos de carga e descarga da armadilha em função de diversos parâmetros analisando-o através da teoria descrita anteriormente.

[1] D. Pritchard, E. Raab, V.S. Bagnato, C. Wieman and R. Watts, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 310 (1986).

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

OPTICAL SUPERMOLASSES AND THE INVERTED PENDULUM

BAGNATO, V. S.; MARCASSA, L. G.; ORIÁ, M.; SURDUTOVICH, G. I.; ZILIO, S. C.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

Optical molasses is a three-dimensional cooling of atoms due to the strong damping force exerted by counter-propagating lasers beams. When the damping path is small in comparison to the extent of the illuminated region the atomic motion is similar to a Brownian motion of particles in a viscous fluid (molasses). A striking peculiarity of molasses set-ups is the effect of about 50-fold increase in the storage time of particles for molasses with misaligned laser beams (supermolasses) in opposition to exactly aligned beams. Here we analyze the supermolasses problem on the basis of the macroscopic vortex forces concept [1]. These forces give rise to a rather rapid rotation of atoms and a slow radial motion due to the action of a centrifugal force. Motion of atoms in the radial direction corresponds to a simple pendulum in the inverted state of unstable equilibrium. Due to the anisotropy of the device, the rotational motion produces an oscillating component of the radial force and oscillation radial friction force. Just as for the known Kapitza pendulum with vibrating suspension point, so the effective stabilizing potential with local minimum do arises. Under realistic values of the parameters this potential can not stop the mechanical

radial motion of atoms but may suppress or even totally eliminate radial diffusion of atoms. It means dramatic increase of storage time of atoms into molasses set-up.

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

ELÉTRONS DE COMBOIO PRODUZIDOS POR PROJÉTEIS EMERGENTES NEUTROS

SIGAUD, G. M.

Departamento de Física, PUC-Rio

Elétrons de comboio são importantes para a compreensão dos processos que ocorrem na interação de íons pesados rápidos com a matéria, já que fornecem informações sobre a influência do projétil na produção e no transporte de elétrons através de sólidos. Uma questão crucial diz respeito à região do sólido onde estes elétrons são criados, isto é, se no seu interior ou se na superfície de saída do projétil. A observação de elétrons de comboio associados a projéteis emergentes neutros pode fornecer um teste decisivo para a validade dos modelos teóricos existentes. Espectros em energia dos elétrons emitidos para frente foram medidas em coincidência com os estados de carga emergentes de projéteis de H^+ e He^+ (100-400 keV/u) incidentes sobre alvos finos de carbono. Foram observados elétrons de comboio associados tanto a projéteis emergentes carregados quanto neutros. Estes resultados favorecem os modelos volumétricos, embora as frações observadas para os neutros sejam menores do que para os carregados por fatores até 18, o que indica que a formação de elétrons de comboio pode ocorrer nas últimas camadas atômicas do sólido.

ASSIGNMENTS DE LINHAS DE ABSORÇÃO DO $^{13}CH_3OH$ NO INFRAVERMELHO (IV) E INFRAVERMELHO LONGÍNQUO (IVL)

MORAES, J. C. S.

Unesp-Ilha Solteira

PEREIRA, D.; SCALABRIN, A.

Unicamp

MORUZZI, G.; STRUMIA, F.

Università di Pisa

WINNEWISSER, B.; WINNEWISSER, M.

Herzberg Institute of Astrophysics, NRC of Canada

O interesse na espectroscopia de moléculas tipo metanol aumentou muito após a realização do primeiro laser molecular através do bombeamento óptico, por Chang e Bridges^a. Hoje o metanol e suas espécies isotópicas são os mais ricos e eficientes meios ativo laser no IVL. A necessidade em determinar o "assignment" (identificação dos números quânticos) das linhas laser conhecidas, e a possibilidade de prever novas possíveis emissões laser, tem dado um forte estímulo no desenvol-

vimento de trabalhos sistemáticos de "assignments"^b. Além disso, como descobriu-se a presença do metanol no espaço estelar^c, a identificação do espectro do metanol e seus isótopos passou a ter um grande interesse aos astrofísicos.

Damos início ao nosso projeto de investigação sistemática do espectro IV e IVL de absorção da molécula $^{13}CH_3OH$. Utilizaremos espectros a Transformada de Fourier a resolução de $2 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$. A identificação das linhas de absorção é feita através de um programa computacional^d que calcula os níveis de energia rotovibracionais de moléculas tipo metanol. Apresentamos aqui os primeiros resultados obtidos desta investigação. *Apoio Fianciero: FUNDUNESP.*

^aT.Y. Chang and T.J. Bridges. *Optics Commun.* **1**, 423(1970).

^bG. Moruzzi, J.C.S. Moraes and F. Strumia. *Int. Journal of Infrared and MM Waves*, vol.13, no 9, 1269 (1992).

^cE.C.Sutton and E.Herbst. *Astrophys. Journal* **333**, 359(1988).

^dG. Moruzzi, F. Strumia, J.C.S. Moraes, R.M. Lees, I. Mukhopadhyay, J.W.C. Johns, B.P. Winnewisser and M. Winnewisser, *Journal of Molec. Spectrosc.* **153**, 511 (1992).

ESTRUTURAS ESPACIAIS DE ÁTOMOS DE SÓDIO EM FORMA DE ANÉIS EM ARMADILHAS MAGNETO-ÓPTICAS

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

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

Em nosso laboratório conseguimos aprisionar átomos de sódio utilizando uma armadilha magneto-óptica para átomos neutros similar a sugerida por Pritchard [1] e desenvolvida por Raab [2].

O desalinhamento dos feixes laser numa armadilha como essa produz estruturas espaciais interessantes. A formação de nuvens de átomos frios em forma de anel é uma dessas estruturas. O processo desta formação envolve uma série de conceitos que ainda não estão muito bem definidos, mas algumas teorias que estão sendo elaboradas conseguem explicar relativamente bem alguns resultados experimentais.

Para explicar a estrutura em forma de anel, assumimos que o perfil gaussiano dos feixes junto ao desalinhamento dos mesmos produz uma força de vórtice com uma forte dependência radial que é suficiente para compensar a força viscosa βv e estabilizar o átomo numa trajetória circular. Utilizando este modelo teórico conseguimos obter o comportamento do raio do anel como função de diversos parâmetros da armadilha.

[1] D. Pritchard, E. Raab, V.S. Bagnato, C. Wieman and R. Watts, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 310 (1986).

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

Espalhamento e Colisões I (ATO) – 19/05/93

Excitação Eletrônica da Molécula de CH₂O por Impacto de Póstrons

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

Instituto Tecnológico de Aeronáutica - ITA

LIMA, M. A. P.

Instituto de Física Gleb Wataghin - UNICAMP

Apresentaremos seções de choque de espalhamento de póstrons de baixa energia por moléculas de Formaldeído (CH₂O), utilizando o Método Multicanal de Schwinger. Discutiremos nesse caso seções de choque inelásticas da excitação do estado ¹A₂ proveniente da transição 2b₂ → 2b₁. Mostraremos os resultados das seções de choque integral, para a energia da partícula incidente variando desde 5 eV até 30 eV, enquanto que para as seções de choque diferenciais, apresentaremos as energias 5, 6, 8 e 10 eV. Como não existe qualquer resultado tanto experimental quanto teórico para esse sistema (e⁺ - CH₂O), faremos uma comparação com os dados já existentes do sistema (e⁻ - CH₂O).

ESPALHAMENTO DE ELÉTRONS POR F₂, Cl₂, Br₂, E I₂ E A EXCITAÇÃO ELETRÔNICA DOS ESTADOS ¹A₂ E ³A₂ DO CH₂O POR IMPACTO DE ELÉTRONS. APLICAÇÕES DO MÉTODO MULTICANAL DE SCHWINGER COM PSEUDO-POTENCIAIS

BETTEGA, M. H. F.

UFPR

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

UNICAMP

Recentemente [M. H. F. Bettega, L. G. Ferreira, M. A. P. Lima, Phys.Rev. A 47, 1111 (1993)] mostramos a *transferibilidade* dos Pseudopotenciais de Bachelet, Hamann e Schlüter [Phys. Rev. A 26, 4199 (1982)] para cálculos de espalhamento elástico e inelástico de elétrons por moléculas, utilizando para estes cálculos o Método Multicanal de Schwinger (SMC) adaptado com estes Pseudopotenciais. Utilizando esta nova implementação dentro do método SMC, apresentaremos algumas seções de choque provenientes do espalhamento elástico de elétrons por F₂, Cl₂, Br₂, e I₂, que são resultados de cálculos ainda em andamento, e também seções de choque diferenciais de excitação eletrônica dos estados ¹A₂ e ³A₂ do CH₂O por impacto de elétrons.

COLISÃO DE ELÉTRONS POLARIZADOS COM A MOLÉCULA DE NO ORIENTADA

PAIXÃO, F. J. DA; LIMA, M. A. P.

UNICAMP

Embora a atividade teórica no campo de espalhamento de elétrons por molécula tenha sido bastante intensa nos últimos anos, a maioria dos trabalhos está restrita a moléculas de camada completa. Estudos *ab-initio* em espalhamento de elétrons por moléculas de camada aberta são raros em especial os que envolvem excitação (Noble e Burke Phys. Rev. Lett. 68, 2011 (1992)). Neste trabalho nós apresentaremos resultados obtidos pela implementação do Método Multicanal de Schwinger para o estudo de moléculas de camada aberta com um elétron desemparelhado para o caso do NO. Nós apresentaremos resultados para espalhamento elástico, inelástico e para a fração de polarização P'/P para o espalhamento de elétrons polarizados pela molécula de NO. O comportamento angular desta grandeza para moléculas difere muito do caso atômico (T. Hegeman et al, Phys. Rev. Lett. 66, 2968 (1991)). A explicação deste fenômeno baseou-se no efeito de interferência entre as amplitudes de espalhamento que desaparece no caso molecular devido a média entre as orientações presentes num alvo gasoso. Para o caso de uma molécula orientada (Paixão, Lima e McKoy, Phys. Rev. Lett. 68, 1698 (1992)) o comportamento atômico pode ser observado. Nós apresentaremos um estudo detalhado da dependência da fração P'/P com a energia do elétron incidente e a orientação da molécula do NO.

SEÇÃO DE CHOQUE DE DESTRUIÇÃO DE ÍONS MOLECULARES H₂⁺ E H₃⁺ RÁPIDOS POR ÁTOMOS DE HÉLIO E ARGÔNIO

FARIA, N. V. DE C.; BORGES JR, I.

Departamento de Física, PUC-Rio

COELHO, L. F. S.; JALBERT, G.

Instituto de Física, UFRJ

O estudo da fragmentação do íon molecular H₂⁺, além de seu interesse intrínseco, é importante para o entendimento de moléculas como H₃⁺ e H₂⁺ e de agregados de hidrogênio H_n⁺ (n ≥ 3, ímpar). Assim, o estudo sistemático da fragmentação de H₂⁺ e H₃⁺ tem sido realizado no "Laboratório do Acelerador Van de Graaff" da PUC-Rio. Neste trabalho apresentamos medidas de transmissão de íons moleculares rápidos de H₂⁺ (4.0-7.0 a.u.) em alvos de hélio e argônio. Foram obtidas seções de choque de dissociação total a partir da curva de íons transmitidos versus pressão do alvo no regime de colisões simples. Estas seções de choque foram compara-

das com as de dissociação do íon H_3^+ , à mesmas velocidades e para os mesmos alvos. Notamos que uma descrição simples foi capaz de explicar quantitativamente as tendências observadas em ambos os experimentos. Em particular, as razões das seções de choque de destruição pelo argônio em relação ao hélio apresentam, à mesma velocidade, o mesmo valor para H_2^+ e para H_3^+ . Dependências simples na energia de ionização e número de elétrons do projétil foram também verificadas.

Espalhamento e Colisões II (ATO) - 20/05/93

ALGORITMO TOTALMENTE TRIDIMENSIONAL PARA O CÁLCULO DA SEÇÃO DE CHOQUE DA FOTODISSOCIAÇÃO DE H_2O .

SOARES NETO, J. J.

Departamento de Física - Universidade de Brasília

A fotodissociação de sistemas moleculares é de interesse tanto para a área de lasers químicos quanto no caso de problemas atmosféricos como e o caso da molécula de Ozônio. Com o avanço da tecnologia computacional torna-se possível calcular as grandezas físicas relacionadas a fotodissociação de moléculas triatômicas de forma bastante precisa. Estes cálculos envolvem a expansão da função de onda num espaço tridimensional e, devido a isto, as matrizes obtidas são muito grandes e algoritmos eficientes devem ser utilizados. Em 1990, C. Leforestier da Universidade de Paris, calculou a seção de choque para a fotodissociação do Ozônio utilizando um método dependente do tempo e o procedimento numérico chamado "Discrete Variable Representation". No entanto, ainda não existem cálculos totalmente tridimensionais através do formalismo independente do tempo. O presente trabalho desenvolve um método, independente do tempo, para o cálculo da seção de choque da fotodissociação de sistemas triatômicos baseado no formalismo variacional da matriz R. Aplicaremos o algoritmo no cálculo da fotodissociação da molécula da água.

Identificação dos cruzamentos entre as curvas de potencial em reações 66 dupla captura eletrônica de Xe^{4+} colidindo em Ne

ALMEIDA, D. P.

Universidade Federal do Rio de Janeiro

O presente trabalho identifica os cruzamentos entre os níveis quânticos dos canais de entrada e de saída em colímbes de Xe^{4+} e Ne com 12keV de energia incidente, para as quais ocorre dupla captura eletrônica.

Adotou-se a formulação de Landau-Zener assumindo-se o modelo de elétrons independentes. Foram analisadas reações exotérmicas com defeito de energia na faixa de 7,1 à 29,0eV, onde uma separação internuclear Rc favorável (reação janela) sob a qual ocorre o pseudo-cruzamento entre as curvas adiabáticas de potencial. Para localizar os cruzamentos entre as superfícies de potencial onde ocorrem a dupla captura eletrônica, foi ajustado o modelo teórico aos dados de espectroscopia de alta resolução da energia de translação do projétil após a colisão.

DEPENDÊNCIA COM O PARÂMETRO DE IMPACTO DO PROCESSO DE PERDA ELETRÔNICA

MONTENEGRO, E. C.

Departamento de Física, PUC-Rio

O processo de perda eletrônica de íons multiplamente carregados (p. ex. C^{5+}) em gases leves (p. ex. H_2 , He) na região de energia intermediária para alta ($E > 1$ Mev/uma) é dominado por dois mecanismos que competem entre si: a interação núcleo-elétron e a interação elétron-elétron. Devido à diferença de massas entre o núcleo e o elétron, estes dois mecanismos apresentam comportamentos dinâmicos bastante diferentes, que se refletem na dependência do processo de perda eletrônica com o parâmetro de impacto.

Nesta comunicação, apresentamos um resumo das teorias recentemente desenvolvidas para o processo de perda e descrevemos medida realizadas com a reação $C^{5+} + \{H_2, He\} \rightarrow C^{5+} + \{\sum_f\}$ em função do parâmetro de impacto. Estas medidas permitem discriminar a participação das interações núcleo-elétrons e elétron-elétron no processo de perda.

PRODUÇÃO DE UM ALVO DE HIDROGÊNIO DISSOCIADO PARA COLISÕES ATÔMICAS

SANT'ANNA, M. M.; MONTENEGRO, E. C.; SIGAUD, G. M.

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

MAYERHOF, W. E.

Stanford University, Stanford, California, USA

SHAH, M. B.

The Queen's University of Belfast, Belfast, UK

A descrição teórica das colisões envolvendo projéteis multiplamente carregados necessita, em muitos casos, que seu desenvolvimento se faça em um regime não-perturbativo. Os diversos canais de transferência de elétrons tendem a se acoplar fortemente e processos multi-eletrônicos são bastante prováveis. Neste contexto, o hidrogênio atômico simplifica muito a abordagem teórica do problema, já que o número de canais a serem considerados em relação a alvos multi-eletrônicos

é diminuído drasticamente. Além disso, a simplicidade do H permite que a descrição do estado inicial do elétron do alvo seja feita sem maiores dificuldades. Isto é importante quando mecanismos de colisão mais complexos são envolvidos.

Infelizmente, o hidrogênio somente é encontrado em abundância na natureza em sua forma molecular. Neste trabalho descreve-se um forno, construído no Laboratório Van De Graaff da PUC-Rio, capaz de dissociar o H_2 produzindo um alvo gasoso com cerca de 80% de H. A determinação da chamada fração de dissociação é feita através de medidas da dupla captura do He^{2+} no H_2 residual a uma temperatura de trabalho T ($\approx 2300K$) e a uma temperatura base T_0 em que se garante não haver dissociação ($\approx 1400K$). Para completar a calibração medimos também a captura simples do He^{2+} na mistura de H e H_2 (a T) e no H_2 (a T_0). Apresenta-se ainda um estudo termodinâmico do sistema que, além de servir como um teste para sua calibração, modela o comportamento do gás nas diferentes partes da câmara.

Física Atômica e Molecular: Teoria I (ATO) - 20/05/93

Cálculo de espalhamento para sistemas diatômicos via formulação variacional da matriz R

GARGANO, R.; S. NETO, J. J.

Departamento de física Universidade de Brasília.

Estamos interessados na descrição das grandezas físicas associadas ao espalhamento de um átomo por outro átomo. Para tanto utilizaremos o formalismo variacional da matriz R que se apresentará como uma alternativa para a resolução de problemas de espalhamento. Daremos uma descrição do espalhamento de um átomo por outro átomo empregando a teoria variacional da matriz R a um canal utilizando o método do elemento finito. Esta formulação juntamente com o método de decomposição em ondas parciais possibilitará o cálculo do deslocamento de fase. A partir do deslocamento de fase podemos obter a secção de choque diferencial e total do espalhamento elástico entre sistemas diatômicos. Como aplicação deste método, estudaremos o espalhamento e a fotodissociação de sistemas diatômicos.

ESTUDO DA ESTRUTURA ELETRÔNICA DOS FULERENOS

BRITO, A. N. DE; MAKIUCHI, N.

UnB

A partir de 1990, com a possibilidade de se obter quantidades macroscópicas de C_{60} e seus derivados, suscitou-se na comunidade científica vasto interesse no estudo das propriedades destes fulerenos.

Reportaremos neste trabalho os resultados obtidos com a utilização do programa semi-empírico Zindo (Uppsala -Sweden), onde fez-se cálculos tipo CNDO (completed neglected differential overlap) e INDO (intermediated neglected differential overlap). Como também, exporemos os resultados obtidos com o programa ab-initio Gamess (Dakota-USA). Devido a variada gama de bases existentes no Gamess, foi-nos possível estudar os vários comportamentos do cálculo auto-consistente (SCF) com respeito a base usada. Por fim, apresentamos os resultados provenientes do cálculo de configuração de iteração (CI).

Os resultados apresentados compreendem, energia Hartree-Fock, diferenças de energia HOMO-LUMO, estudo da distribuição de carga na molécula e comparação com os resultados provenientes da literatura existente.

Cálculo das probabilidades de transição entre os estados vibracionais de H_2 no espalhamento colinear $H-H_2$ dependente do tempo. Uma abordagem na descrição de interação.

SOUSA, A. A.; ROCHA FILHO, T. M. DA

Departamento de Física - Universidade de Brasília

Aplicamos ao espalhamento colinear $H-H_2$ um método proposto por Zhang para a propagação numérica da equação de Schrodinger para a equação de onda do sistema na descrição de interação. Um dos problemas da descrição de Schrodinger vem do fato que a extensão espacial da função de onda do sistema aumenta ao longo do tempo, mesmo na ausência de interações, devido a efeitos cinéticos, que na descrição de interação são responsáveis pela evolução dos observáveis, enquanto que a evolução da função de onda fica a cargo dos efeitos puramente de interação. Essa descrição apresenta as seguintes vantagens: (i) a função de onda, inicialmente localizada, se mantém localizada ao longo da evolução temporal - (ii) Uma menor grade numérica é necessária devido à natureza localizada da função de onda do sistema - (iii) A função de onda variando lentamente, um maior passo no tempo pode ser empregado na integração numérica pelo método de diferenças finitas, o que representa um substancial ganho no tempo de computação com relação à descrição de Schrodinger. Calculamos as probabilidades de transição entre os estados vibracionais da molécula de hidrogênio assim como as probabilidades de espalhamento reativo e comparamos nossos resultados com os de outras abordagens.

**ESTUDO DAS OSCILAÇÕES
AMORTECIDAS NO SINAL
OPTOGALVÂNICO NUMA DESCARGA
LUMINOSA SUBNORMAL EM ARGÔNIO.**

BRAUN, L. F. M.; LISBÔA, J. A.
UFRGS

Neste trabalho apresentamos um modelo teórico para as oscilações amortecidas no sinal optogalvânico em argônio observado numa descarga elétrica subnormal. Este regime de operação da descarga é caracterizado por uma inclinação negativa da sua curva $V \times I$. Como consequência desta inclinação negativa, sabe-se que a corrente na descarga pode apresentar oscilações e instabilidades com uma aparência ruidosa. Nós observamos que o sinal optogalvânico (SOG) varia de um pulso até uma oscilação harmônica amortecida quando o ponto de operação da descarga, na sua curva $V \times I$, é deslocado da região onde a inclinação da curva é positiva para a região onde a inclinação é negativa. As oscilações amortecidas no SOG são interpretadas através de um modelo o qual representa a descarga elétrica como um transdutor optoeletrônico.

**DEPENDÊNCIA DA APROXIMAÇÃO
SEMICLÁSSICA COM OS PARÂMETROS
DE UM SISTEMA UNIDIMENSIONAL**

LUZ, M. G. E. DA

Unicamp

CIZS, L. S.; DUARTE, D.; SOUZA, M. A. S. DE

UFPR

Muito se tem discutido sobre a validade da aproximação semiclássica em mecânica quântica. Este tipo de pergunta se torna ainda mais relevante com o advento do chamado caos quântico. Sistemas clássicos caóticos apresentam sensibilidade às condições iniciais, seus espaços de fase possuem topologia complicada (muitas vezes apresentando as famosas estruturas fractais) e possuem em geral o que chamamos de ilhas, ou seja, no "mar" caótico aparecem "ilhas" integráveis. Sistemas totalmente integráveis ou sistemas com "hard chaos" podem apresentar boa quantização semiclássica, ao passo que em geral, "soft chaos" não tem uma boa quantização via fórmula de Van-Vleck. Neste trabalho apresentamos um sistema integrável, que entretanto apresenta uma característica de sistemas com "soft chaos", a variação dos parâmetros do sistema muda sensivelmente as características de suas trajetórias clássicas. Mostramos então que devido a isto sua quantização semiclássica não dá bons resultados.

**Efeito dos processos de multifônons no
espalhamento inelástico de nêutrons lentos em
hidretos metálicos.**

MESTNIK FILHO, J.; MOURA, J. I. DE

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

O espalhamento inelástico de nêutrons lentos tem sido empregado progressivamente em estudos de dinâmica molecular particularmente em sistemas metal-hidrogênio e compostos hidrogenados. A informação procurada em tais experimentos é a distribuição das frequências de vibração $g(\omega)$ do hidrogênio, obtida através da medida da transferência de energia entre os nêutrons e os quanta de vibração do sistema estudado. Mais precisamente, na aproximação de espalhamento por troca de um fônon, na qual um nêutron cria ou aniquila um fônon de um modo de vibração, obtém-se diretamente $g(\omega)$ ponderado com os quadrados das amplitudes das vibrações atômicas.

É conhecido no entanto, que não é possível evitar os chamados processos de multifônons em um experimento de espalhamento inelástico. Nesses processos mais que um fônon de um modo de vibração é transferido e/ou vários modos de vibração trocam quanta de energia com o nêutron, simultaneamente.

A maneira usual para se tratar este problema é expandir a expressão da seção de choque de espalhamento de nêutrons em uma série de potências, na qual cada termo corresponde ao número respectivo de fônons envolvido no espalhamento inelástico. Na prática porém, somente termos até segunda ordem podem ser calculados por este método.

No presente trabalho é apresentado um método alternativo para o cálculo devido aos processos de multifônons que leva em conta todos os números de fônons envolvidos. O método não é baseado na expansão em série de potências e sim na transformada numérica de Fourier da chamada função intermediária de espalhamento que contém todas as ordens de multifônons.

O método é aplicado a um hidreto metálico simples caracterizado por um espectro de frequências de vibração do hidrogênio com duas bandas: um espectro de Debye e um modo localizado representado por um espectro de Einstein. Os resultados obtidos concordam bem com experimentos realizados em hidretos metálicos encontrados na literatura.

**DETERMINAÇÃO SEMI-EMPÍRICA DO
ELEMENTO DE MATRIZ PARA
IONIZAÇÃO MULTIPLA DE GASES
NOBRES E VAPORES METÁLICOS POR
COLISÃO ELETRÔNICA.**

GODINHO, C. F. L.; ALMEIDA, D. P.

UFRJ

Foi estabelecida uma relação semi-empírica a partir da formulação de Bethe, que nos permite determinar a

força de oscilador M_n^2 , relativa aos processos de mudança de camada e ionizações múltiplas. M_n^2 é dado

por: $M_n^2 = \int_{n+} \frac{\delta(f^{(n+)})}{E, dE}$ onde: $diff_{x_{el}}$ é a força do

oscilador diferencial para uma transição para o contínuo $n+$ a uma energia transferida E . Partindo então da formulação de Bethe. $\frac{\sigma E}{4\pi a_0^2} R = M_N^2 \frac{\ln E}{R} + c_n$ onde: σ : É a seção de choque parcial de ionização por impacto de elétrons a_0^2 : raio da primeira orbita de Bohr

R : constante de Rydberg

E : energia utilizada

Pode-se mostrar que o elemento de matriz pode ser escrito como: $M_N^2 = \frac{\epsilon\beta}{4\pi a_0^2} \exp \alpha n \exp \delta$ onde $\epsilon, \beta, \alpha, \delta$, são constantes determinadas por ajuste de dados experimentais, disponíveis na literatura. Serão apresentados resultados para reações de ionização múltipla por colisão eletrônica para os gases He, Ne, Ar, Kr, Xe e para os vapores metálicos de Na e Mg.

Bibliografias

M. Inokuti- Review of Modern Physics, 43(1971), 299

M. J. Van der Wiel- Physica 42(1969), 411-420

B. L. Schram- Physica, 32(1969), 197-208

TERMODINÂMICA E ESTRUTURA DE LÍQUIDOS ORGÂNICOS POR SIMULAÇÃO DE MONTE CARLO

FREITAS, L. C. G.; BARLETTE, V. E.

Universidade Federal de São Carlos

Propriedades termodinâmicas e estruturais de alguns líquidos moleculares puros, tais como clorofórmio, acetoneitrila e metanol, e de suas misturas binárias, foram estudadas através de simulações mecânico-estatísticas de Monte Carlo no ensemble isobárico-isotérmico para várias frações molares. Os sistemas moleculares consistiram de $N = 128$ moléculas à $T = 25^\circ C$ e $p = 1$ atm em uma caixa cúbica com condições de contorno periódicas. Um potencial efetivo de pares da forma Lennard-Jones + Coulomb truncado esfericamente à distância $r_c = 10\text{Å}$ foi utilizado para representar as interações intermoleculares. Os resultados obtidos nas simulações foram corrigidos para a região de longo alcance da interação $r > r_c$. As cargas e os parâmetros Lennard-Jones escolhidos para representar as funções potenciais das misturas binárias foram previamente desenvolvidos em estudos de líquidos puros. Novos parâmetros Lennard-Jones para a molécula de clorofórmio foram sugeridos no presente estudo. Efeitos de interações específicas do tipo pontes de hidrogênio sobre as propriedades termodinâmicas e estruturais desses líquidos também foram avaliados. Os resultados obtidos neste trabalho estão em ótima concordância com resultados teóricos e experimentais disponíveis na literatura. CNPq/FAPESP

ESTRUTURA ELETRÔNICA DE MOLÉCULAS BIOLÓGICAS

DARDENNE, L. E.; MAKIUCHI, N.

UnB

Com o desenvolvimento dos computadores e de programas, o estudo de propriedades eletrônicas de moléculas biológicas tem evoluído em duas vertentes básicas: uma em direção dos efeitos de muitos elétrons e outra em direção de sistemas cada vez maiores e mais complexos tal como o estudo de macromoléculas e moléculas biológicas.

O estudo da molécula retinal é de grande importância pois a absorção de um fóton por esta, na rodopsina, constitui-se no ponto inicial de todo o mecanismo da visão.

A isomerização da retinal, da forma 11-cis para all-trans, após a absorção do fóton é o mecanismo que possui maior aceitação para explicar o evento primário da transdução visual. Lewis⁽¹⁾ propôs, por outro lado, que a absorção do fóton causaria uma grande alteração na distribuição de carga da retinal, a qual poderia ser fundamental no modelo de transdução visual.

Neste trabalho apresentamos resultados referentes ao cálculo de primeiros princípios, "ab initio", em uma simulação do sítio de ligação da retinal na rodopsina, usando o programa GAMESS⁽²⁾. Analisamos o modelo de transferência de carga na transição do estado fundamental, para o primeiro estado excitado singleto, a partir dos cálculos Hartree-Fock e interação de configurações (CI), usando diferentes bases atômicas para a formação da função de onda.

(1) Aaron Lewis and V. del Priore 1988. THE BIOPHYSICS OF VISUAL PHOTORECEPTION, Physics Today, January:38-46.

(2) M. W. SCHMIDT, K. K. JENSEN, S. KOSEKI, M. S. GORDON, K. A. NGUYEN, T. L. WINDUS, S. T. ELBERT - QCPE BULLETINS, 10, 52-54 (1990).

EXTINÇÃO MONOCROMÁTICA EM CHAMAS.

FERRARI, C. A.; NAGAI, Y. E.; PENNA, A. F. S.

Depto. Eletrônica Quântica - IFGW - UNICAMP

A recente correção da expressão do coeficiente de absorção espectral para fuligem na região do visível, $K_{a\lambda} = 1/\lambda [1 + 5/2 + m^2/12]^2 (\pi D/\lambda)^2$, onde λ , m e D são comprimento de onda da radiação, índice de refração complexo e diâmetro da partícula de fuligem, respectivamente, despertou novamente a atenção dos pesquisadores na determinação precisa deste coeficiente. No limite de Rayleigh de pequenas partículas, para a teoria de Mie, o coeficiente de absorção espectral pode ser medido pelo coeficiente de extinção pois é desprezível o espalhamento. Com a montagem ótica, para tomada contínua de dados ao longo da chama e com o feixe de radiação laser com múltiplas passagens pela mesma, melhora-se as medidas.

Estrutura Eletrônica e Geométrica dos Clusters de Ga_nAs_m ($n,m=1-3$)

PIQUINI, P. C.; FAZZIO, A.

Universidade de São Paulo - IFUSP

CANUTO, S.

Universidade Federal de Pernambuco - UFPE

Neste trabalho realizamos cálculos Hartree-fock 'ab-initio' all-electrons para a determinação da estrutura eletrônica e geométrica dos clusters estequiométricos e não estequiométricos de Ga_nAs_m ($n,m=1-3$) e de seus íons positivos e negativos. Em contraste com resultados recentemente obtidos dentro da aproximação de Local-Density encontramos que a configuração de menor energia para o cluster Ga_2As_3 tem simetria C_{2v} . Notamos também que para um dado número de átomos de Ga e As, os clusters negativamente carregados são mais estáveis (energia mais baixa) que os neutros e estes mais estáveis que os positivamente carregados. Atribuímos esta maior estabilidade ao fato que a inclusão de um elétron usualmente aumenta a intensidade da ligação Ga-As. Apresentamos resultados de energia de ligação, potencial de ionização e afinidade eletrônica verticais e térmicos e hibridização para os clusters estudados. Comparações com resultados já obtidos serão também apresentados.

MODELOS TEÓRICOS PARA O COMPORTAMENTO DO RAIOS DA NUVEM DE ÁTOMOS APRISIONADOS EM ARMADILHAS MAGNETO-ÓTICAS

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

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

Originalmente proposta por Pritchard [1] e anos depois demonstrada por Raab [2], esta armadilha consiste de três pares de feixes contra-propagantes com polarizações opostas que se cruzam no centro de um campo magnético quadrupolar. A frequência dos feixes é próxima a de uma transição do átomo. A polarização circular dos feixes σ^+ , σ^- e o deslocamento Zeeman sofrido pelos níveis atômicos produzem uma força sobre o átomo similar a de um sistema massa-mola fortemente amortecido confinando-o a uma pequena região próxima ao ponto de campo magnético zero.

Os processos dinâmicos numa armadilha como esta são bastante complexos. Para entendermos a estrutura básica destes processos e interpretando nossos resultados experimentais utilizamos dois modelos teóricos bem simplificados dentro do limite Doppler.

No primeiro modelo teórico assumimos que o átomo de sódio é um sistema de dois níveis simples. O limite de resfriamento, em nosso modelo, é determinado pela emissão espontânea. Baseado nessa suposição calculamos a energia cinética mínima que o átomo pode ter neste tipo de armadilha e igualamos essa energia com a

energia potencial de mola originária da força de pressão de radiação. Da equação obtida conseguimos o comportamento do raio da nuvem como função de diversos parâmetros da armadilha.

Para refinar a teoria desenvolvemos um segundo modelo teórico onde levamos em conta a estrutura de níveis hiperfina do sódio.

Os dois modelos teóricos desenvolvidos foram comparados com os resultados experimentais e dentro de seus limites conseguiram refletir um pouco da dinâmica da armadilha.

[1] D. Pritchard, E. Raab, V.S. Bagnato, C. Wieman and R. Watts, Phys. Rev. Lett. **57**, 310 (1986).

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

Física Atômica e Molecular: Teoria II (ATO) - 20/05/93

Aplicação do método multicanal de Schwinger para a excitação do H_2 por impacto de pósitrons de baixa energia

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

Instituto Tecnológico de Aeronáutica - ITA

LIMA, M. A. P.

Instituto de Física Gleb Wataghin - UNICAMP

Apresentamos neste trabalho seções de choque diferenciais para a excitação eletrônica do singleto $B^1 \sum_g^+$ da molécula de H_2 para energias de 13.5, 17.5, 20, 25 e 30 eV do pósitron incidente. Para essa transição, que possui um potencial de longo alcance, as seções de choque serão obtidas através de um esquema que combina o Método Multicanal de Schwinger (MMS) para pósitrons juntamente com o Primeiro Termo de Born (PTB). Para os baixos valores do momento angular, as seções de choque foram obtidas pelo MMS, enquanto que para os elevados valores do momento angular, utilizamos o primeiro termo de Born.

UM ESTUDO SCF-LCAO-INDO/CI DE COMPLEXOS FORMADOS POR P_5 , P_6 , C_6H_6 e C_5H_5 COM Cr e Fe.

WERNECK, A. DOS S.; MAKIUCHI, N.;

DAVIDVIANNA, J. E.

UnB

O recente desenvolvimento na química de organometálicos com a descoberta de novos compostos tem acarretado estudos sobre a estrutura, estabilidade, ligação e reatividade destes com consequências importantes para a síntese química. Neste trabalho apresentamos um estudo com o método INDO-CI (intermediate

neglect of differential overlap-configuration interactions) sobre aspectos de estrutura eletrônica dos complexos formados da interação de P_6 , C_6H_6 com $(C_6H_6)Cr$ e da interação de P_5^- , $C_5H_5^-$ com $(C_5H_5)Cr^-$ e $(C_5H_5)Fe^+$. Na presente comunicação discute-se a distribuição de carga, e as diferenças de energia HOMO-LUMO e compara-se os resultados com os existentes na literatura (Polyhedron 8, 1135(1989), Nature vol. 232 1971), buscando-se informações para os complexos contendo P, recentemente sintetizados.

Excitações eletrônicas em CH_4 por impacto de pósitrons de baixa energia utilizando o método Multicanal de Schwinger (SMC).

SILVA, E. P. DA

Departamento de Física- UFC, Departamento de Física- ITA

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

Departamento de Física- ITA

LIMA, M. A. P.

UNICAMP

Mostramos seções de choque para excitação do estado singleto ($1t_2 \rightarrow 3s_{a1}$) 1T_2 para o metano, por impacto de pósitrons à baixas energias. Para estudar esta transição, utilizamos o método de Schwinger para diversos canais acoplados. Com o intuito de descrever corretamente a natureza dipolar desta transição, utilizamos um esquema que combina o método de Schwinger com o primeiro termo de Born (de fato este termo é utilizado apenas para altos valores de momento angular). Discutimos a convergência das seções de choque com respeito a outros canais acoplados e apresentamos os primeiros resultados com o SMC do cálculo do Z_{eff} , referente ao processo de aniquilação de positrônio em ambientes moleculares.

ESTUDO DE RESSONÂNCIAS EM SEÇÕES DE CHOQUE DE ESPALHAMENTO DE ELÉTRONS PELA MOLÉCULA DE H_2 : DISCUSSÃO E ANÁLISE ATRAVÉS DA DIAGONALIZAÇÃO DE TERMOS DA HAMILTONIANA

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

UNICAMP

Em estudos de seções de choque de espalhamento de elétrons por molécula de H_2 , utilizando o método multicanal de Schwinger (SMC), foram verificadas ressonâncias na região entre 13-16 eV. Para descobrir a origem dessas ressonâncias (se do tipo numérica ou essencial), analisamos os autovetores e autovalores da Hamiltoniana global (alvo + elétron) e do termo $\frac{PV+VP}{2}$ (potencial de espalhamento V projetado no espaço de canais abertos P) na mesma base de configurações do SMC. Verificamos que as ressonâncias podem desaparecer, quando retiramos desta base os autovetores

de $\frac{PV+VP}{2}$ com autovalores muito próximos de zero. Apresentaremos este argumento como indicativo e controle de ressonâncias espúrias que podem aparecer em cálculos utilizando o SMC devido à dependência linear das funções de base na região do potencial.

O MÉTODO DE LANCZOS E SUA COMPARAÇÃO COM A TEORIA DE PERTURBAÇÕES EM MECÂNICA QUÂNTICA

ALVES, D.; CABRERA, G.

Instituto de Física 'Gleb Wataghin', Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)

O método de Lanczos possui um duplo caráter de variacional e iterativo. A parte variacional se manifesta através da escolha inicial da função de onda, muitas vezes sugerida pela simetria do problema. A parte iterativa tem semelhanças com os métodos perturbativos, sendo este o motivo principal do presente estudo.

A função de onda que inicializa o processo de Lanczos é escolhida como sendo uma autofunção do Hamiltoniano não-perturbado, com a idéia de comparar com a teoria de perturbações ordinária, *a la* Rayleigh-Schrödinger. Esta escolha reduz a eficiência potencial do método de Lanczos, porém este converge mais rapidamente que a série de perturbações ordinária, e é válido inclusive em situações onde esta série diverge.

Cada passo do processo de Lanczos é comparado aos termos da série perturbativa. Também é feita a inclusão das simetrias do problema para uma comparação dos dois métodos na obtenção do resto do espectro de auto-valores, além do estado fundamental.

ESPALHAMENTO DE ELÉTRONS PELO RADICAL OH

FRANÇA, A.; PAIXÃO, F. J. DA; LIMA, M. A. P.

UNICAMP

Neste trabalho apresentaremos resultados teóricos para a seção de choque diferencial para o espalhamento elástico de elétrons pelo radical OH no intervalo de energia entre 5 e 20eV. Este trabalho faz parte de um programa de pesquisa que visa estudar a excitação por elétrons de moléculas de camada aberta e geometria arbitrária com métodos *ab initio*. Nós utilizaremos uma extensão recente do Método Multicanal de Schwinger feita especificamente para o estudo de moléculas com um elétron desemparelhado. São raros os cálculos teóricos *ab initio* para a colisão elétron-molécula de camada aberta, no caso deste radical trata-se do primeiro estudo *ab initio* que temos notícia. O radical OH tem um papel importante na química da atmosfera, em combustão e no meio interestrelar porém, ainda não existem dados experimentais para esta molécula que possibilitem comparação com os nossos resultados. Este cálculo

foi realizado utilizando-se o cluster de estações RISC-560 do convênio IBM-UNICAMP. Apoio: Capes.

FOTOIONIZAÇÃO DE CAMADA INTERNA DA MOLÉCULA DE ETILENO

RIBEIRO, E. M. S.; MU-TAO, L.; MACHADO, L. E.
UFSCar
 BRESCANSIN, L. M.
Unicamp

O método variacional iterativo de Schwinger^a foi utilizado para o estudo da fotoionização da camada mais interna ($C1s\sigma$) da molécula de etileno, cujo potencial de ionização (IP) é de 209.6 eV. Foi utilizada a versão do pacote computacional SVIM aplicável a moléculas de simetria C_{2v}^b , que contém o grupo de simetria da molécula D_{2h} . Apresentamos seções de choque integrais (σ) e parâmetros de assimetria (β) para fótons de energia entre o IP e 350 eV. Nossos cálculos convergiram com três iterações. Eles mostram que a hipótese de caroço congelado, adotada em nosso método, leva a resultados em boa comparação com resultados experimentais^c para energias alguns eV acima do limiar de ionização. A comparação de nossos resultados com outros^d que inclui efeitos de relaxação do caroço mostra que a baixas energias vários outros efeitos de muitos corpos podem ser importantes.

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

^bL. E. Machado, L. M. Brescansin, M. A. P. Lima, M. Braunstein and V. McKoy, J. Chem. Phys. 92, 2362 (1990).

^cA. L. D. Kilcoyne, M. Schmidbauer, A. Koch, K. J. Randall and J. Feldhaus, J. Chem. Phys., no prelo.

^dJ. Schirmer, M. Braunstein, Lee Mu-Lee and V. McKoy, a ser publicado.

ESPALHAMENTO DE ELÉTRONS POR MOLÉCULAS PESADAS: APLICAÇÕES DO MÉTODO MULTICANAL DE SCHWINGER COM PSEUDO-POTENCIAIS

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

Universidade Estadual de Campinas

BETTEGA, M. H. F.

Universidade Federal do Paraná

A modelagem numérica de plasmas frios (frequentemente utilizados em processamento de materiais) depende da disponibilidade de dados sobre os processos fundamentais que ocorrem na descarga. Especialmente importantes são as seções de choque de colisões elétron-molécula, uma vez que estas colisões são responsáveis por transferências de energia para as moléculas, dando origem à química capaz de alterar as propriedades do material tratado (condutividade térmica e elétrica, dureza, etching, etc). Porém, o cálculo "ab initio" desses dados é uma tarefa difícil. Essa dificuldade cresce

na medida em que o número de elétrons do alvo aumenta, como, por exemplo, nas moléculas CF_4 , CCl_4 , SiF_4 , $SiCl_4$, $SiBr_4$, e SiI_4 , que têm 42, 50, 76, 82, 154 e 226 elétrons respectivamente. Neste trabalho, estudamos o espalhamento elástico de baixa energia (0.2eV a 35eV), pelas moléculas citadas, através do Método Multicanal de Schwinger (SMC), utilizando pseudo-potenciais. Neste procedimento, os prótons e os elétrons de caroço de cada átomo são substituídos por um pseudo-potencial e os elétrons de valência, tratados de acordo com o método SMC. Os resultados mostrados estão de acordo com os dados experimentais disponíveis. Alguns aspectos da convergência também serão discutidos.

ESPALHAMENTO ELÁSTICO DE ELÉTRONS DE ENERGIAS BAIXAS E INTERMEDIÁRIAS POR MOLÉCULAS DE FORMALDEÍDO

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

O método variacional iterativo de Schwinger^a, em sua implementação para moléculas de simetria C_{2v}^b , foi utilizado no estudo do espalhamento elástico de elétrons por moléculas de formaldeído (CH_2O). Apresentamos seções de choque diferenciais ($d\sigma/d\Omega$) e integrais (σ) para energias do elétron incidente na faixa de 1-50 eV. Todos os cálculos convergiram com no máximo três iterações. Mostramos que a existência de um dipolo elétrico permanente na molécula torna a convergência das expansões em ondas parciais mais difícil na região de baixas energias (1-10 eV). Mesmo nessa faixa nossos resultados se comparam razoavelmente bem com outros resultados teóricos^c e experimentais^d disponíveis na literatura. Para energias mais altas não existem outros resultados para comparação.

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

^bL. E. Machado, L. M. Brescansin, M. A. P. Lima, M. Braunstein and V. McKoy, J. Chem. Phys. 92, 2362 (1990).

^cT. N. Rescigno, C. W. McCurdy and B. I. Schneider, Phys. Rev. Lett. 63, 248 (1989).

^dC. Benoit and R. Abouaf, Chem. Phys. Lett. 123, 134 (1986).

FOTOIONIZAÇÃO DE MOLÉCULAS DE H_2S NA FAIXA VUV

MONZANI, A. L.; RIBEIRO, E. M. S.; LEAL, E. P.;
 MU-TAO, L.; MACHADO, L. E.

UFSCar

BRESCANSIN, L. M.

Unicamp

O método variacional iterativo de Schwinger^a, em sua implementação para moléculas de simetria C_{2v}^b , foi utilizado para o estudo de fotoionização da molécula de H_2S . Apresentamos seções de choque integrais (σ) e parâmetros de assimetria (β) para o processo em que

o íon H_2S^+ é formado a partir da excitação para o contínuo de um dos elétrons dos orbitais de valência $2b_2$ ($IP = 15.1$ eV) e $5a_1$ ($IP = 13.2$ eV). A energia do fóton incidente varia desde o limiar de ionização até 50 eV. Todos os cálculos convergiram com no máximo quatro iterações. Nossos resultados são comparados com resultados teóricos^{cd} e experimentais^{ef} disponíveis na literatura.

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

^bL. E. Machado, L. M. Brescansin, M. A. P. Lima, M. Braunstein and V. McKoy, J. Chem. Phys. 92, 2362 (1990).

^cG. H. F. Diercksen and P. W. Langhoff, Chem. Phys. 112, 227 (1987).

^dM. Roche, D. R. Salahub and R. P. Messmer, J. Electron Spect. Rel. Phenom. 19, 273 (1980).

^eM. Y. Adam, P. Morrin, C. Cauletti and M. N. Piancastelli, J. Electron Spec. Rel. Phenom. 36, 337 (1985).

^fC. E. Brion, Y. Iida and J. P. Thomson, Chem. Phys. 101, 449 (1986).

ESPALHAMENTO ELÁSTICO DE ELÉTRONS DE ENERGIAS BAIXAS E INTERMEDIÁRIAS POR MOLÉCULAS DE



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

UFSCar

BRESCANSIN, L. M.

Unicamp

O método variacional iterativo de Schwinger^a, em sua implementação para moléculas de simetria C_{2v} ^b, foi utilizado no estudo do espalhamento elástico de elétrons por moléculas de H_2S . Apresentamos seções de choque diferenciais ($d\sigma/d\Omega$) e integrais (σ) para energias do elétron incidente na faixa de 1-50 eV. Todos os cálculos convergiram com no máximo três iterações. Nossos resultados mostram que o dipolo elétrico permanente da molécula torna mais difícil a convergência do cálculo numérico, na faixa de baixas energias (1-10 eV). Nossos resultados são comparados com outros disponíveis na literatura^{cdef}.

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

^bL. E. Machado, L. M. Brescansin, M. A. P. Lima, M. Braunstein and V. McKoy, J. Chem. Phys. 92, 2362 (1990).

^cK. Rohr, J. Phys. B11, 4109 (1978); comunicação pessoal (1992).

^dA. Jain and D. G. Thompson, J. Phys. B 16, 3077 (1983).

^eP. F. Tavares, Dissertação de Mestrado, IFGW-Unicamp (1988).

^fF. A. Gianturco, J. Phys. B 24, 4627 (1991).

Um Acoplamento Gravitacional Tipo Spin-Órbita.

MONACO, R. E. L.

Departamento de Matemática Aplicada-IMECC;
UNICAMP

CABRERA, G. G.

IFGW-UNICAMP

Ao considerar uma troca de gravitões entre duas partículas não idênticas de spin $\frac{1}{2}$, é obtida na primeira ordem perturbativa uma pequena correção na força de gravitação universal de Newton. Esta pequena força resulta ser análoga com o tradicional acoplamento Spin-Órbita da Física Atômica e Nuclear. Esta força estabelece uma correlação cinemática entre o campo gravitacional e o campo magnético intrínseco das partículas. O cálculo de esta nova força é realizada utilizando o formalismo da teoria quântica de campos, em particular via a matriz S com um propagador gravitacional no limite não relativista. Estabelece-se então um novo tipo de acoplamento minimal entre campo magnético e gravitacional, diferente do proposto por P. M. S. Blackett. Este resultado pode ter relevância num nível macroscópico, por exemplo, nas anomalias gravitacionais observadas em minas de sal, e no contexto da astrofísica, no cálculo da dinâmica das galáxias espirais.

THEORETICAL STUDY OF Ti_8C_{12} : OPTICAL SPECTRA, ELECTRONIC AND GEOMETRIC STRUCTURES

LIMA, G. A. R.; WATARI, K.; KINTOP, J.;

FAZZIO, A.

Instituto de Física da Universidade de São Paulo

We study the electronic and geometric structures of the Metallo-Carbohedrenes (Met-Car) - Ti_8C_{12} using a semi-empirical INDO/CI method. Through the calculations taking into account the Configuration Interaction, we also present the optical spectra of Met-Car for the first time. These theoretical spectra were obtained in the neutral, positive and double-positive charge states. The equilibrium geometry of Ti_8C_{12} is a structure with T_h point group symmetry and shows the Ti atoms moved radially outward relative to the perfect pentagonal dodecahedral structure. The neutral and positive charge states show hybridization between titanium 3d and carbon p electrons, which is responsible for the structural stability. We will discuss also results for Vanadium and Chromium.

Teoria de Estrutura Eletrônica I (ATO) - 21/05/93

ON POSSIBLE VERIFICATION OF NONLINEAR GENERALIZATIONS OF QUANTUM MECHANICS FOR ELECTRONS IN CROSSED MAGNETIC AND ELECTRIC FIELDS

DODONOV, V.

*Universidade Federal de São Carlos (on leave of absence
from Moscow Institute of Physics and Technology)*

MIZRAHI, S.

Universidade Federal de São Carlos

We investigate a nonlinear modification of the Schrödinger equation proposed recently by Doebner and Goldin ^a for a particle moving in a scalar potential and generalized by Dodonov and Mizrahi ^b to include a magnetic field. The model consists in adding to the right-hand side of the Schrödinger equation a term

$$\frac{i\hbar^2\gamma}{m} \left[(\nabla - \frac{ie}{\hbar c} \mathbf{A})^2 \psi + \frac{(\nabla - \frac{ie}{\hbar c} \mathbf{A}) \psi \cdot (\nabla + \frac{ie}{\hbar c} \mathbf{A}) \psi^*}{\psi \psi^*} \psi \right],$$

γ being a positive dimensionless constant. We present both analytical and numerical solutions of the new equation for different gauges and initial conditions and show that quantum fluctuations of the coordinates and momenta exhibit relaxation to the corresponding ground state values with the characteristic time $(\gamma\omega)^{-1}$, ω being the cyclotron frequency, while the first order average values of coordinates obey the equation of motion with some effective friction force proportional to the velocity and the coefficient γ . As a consequence, a component of the electric current directed along the electric field arises in the absence of any scattering processes, with the mobility coefficient γ/B , where B is the magnetic field inductance. This effect can be used for the experimental verification of the model.

^aH.D.Doebner and G.A.Goldin, Phys.Lett. A162, 397 (1992).

^bV.V.Dodonov and S.S.Mizrahi, submitted to Phys.Lett. A.

THEORETICAL STUDIES OF THE ABSORPTION SPECTRA OF MOLECULAR SYSTEMS IN CONDENSED PHASE

CANUTO, S.; COUTINHO, K.

USP e UFPE

The theoretical investigation of molecular clusters and molecular systems in condensed phase is a topic of considerable importance and interest. In recent years it has been felt an increased necessity of well-defined theoretical tools for investigating the properties of crystalline and disordered molecular systems in general. The basic strategy for theoretical calculations of small isolated

molecules has been laid down and includes sophisticated schemes both at the *ab initio* and semiempirical levels. For disordered systems, however, the situation is somewhat undefined.

Molecular systems in condensed phase may be conveniently divided in two categories. The first, includes crystalline systems with well defined structural parameters. Given these parameters the crystalline structure can be obtained in an unambiguous and clear way. In the second category one finds the disordered systems where the very definition of a structure is not possible. There are in fact many structures equally possible.

Specifically, for the theoretical calculation of the electronic absorption spectra of molecular systems in condensed phase, two basic points have to be considered. First, it is necessary an efficient quantum mechanical theoretical scheme for handling both ground and excited states of a very large system, or a large quantity of similar systems. Typically, from a quantum chemistry point of view, this calls for a semiempirical procedure able to handle, say, 300 to 500 atoms. The second basic point is particularly important for liquids, or disordered systems in general, and it refers to the determination of the structure of the system. A properly defined statistical procedure is necessary in this case.

We will present a scheme for the calculation of the visible and UV absorption spectra of molecular systems in condensed phase. It essentially amounts to a Monte Carlo statistic characterization of the structure followed by a quantum mechanical INDO-CI calculation of the excited states.

Multiplicidade, instabilidade e Bifurcação de soluções Hartree-Fock: Uma análise usando o método algébrico.

TEIXEIRA FILHO, R. M.; MALBOUSSON, L. A. C.

Instituto de Física - Universidade Federal da Bahia

VIANNA, J. D. M.

Departamento de Física - Universidade de Brasília

O método algébrico (MA) de resolução das equações Hartree-Fock (HF), recentemente publicado pelos autores, é usado para a determinação de curvas de energia HF dos sistemas N_2 e CH e para o estudo de situações críticas como o limiar de instabilidade e bifurcação de soluções para esses sistemas. Especificamente, são discutidas as soluções do tipo ASDW, CDW e RHF para o N_2 e soluções do tipo ASDW para o CH. Mostra-se que com o novo procedimento situações críticas como o limiar de instabilidade e o ponto (geometria molecular) onde ocorre bifurcação podem ser determinados com a precisão que se desejar. O trabalho indica que o MA tem características adequadas para o acompanhamento de soluções durante o processo de dissociação adiabática. Os resultados são comparados com aqueles obtidos por Igawa e Fukutone e por Lepetit, Malrieu e Pelissier, usando outros métodos.

POLARIZABILIDADES DOS ÍONS NEGATIVOS B^- , C^- E O^-

CASTRO, M. A. DE

UFG

CANUTO, S.

UFPE

MUKHERJEE, P.

Indian Association for the Cultivation of Science-Calcutta

Cálculos de polarizabilidades de íons negativos são em geral bastante problemáticos; as polarizabilidades destes sistemas são usualmente muito grandes e os campos elétricos aplicados devem ser suficientemente pequenos. Além disso o tratamento adequado de íons negativos exige conjuntos de funções base extensos, e os efeitos de correlação eletrônica em altas ordens são muito importantes. Devido a essas dificuldades somente existem cálculos de polarizabilidades incluindo correlação eletrônica para íons negativos que formam camada fechada, como o H^- , Li^- e F^- . Neste Trabalho serão apresentados resultados de cálculos para as polarizabilidades dos íons negativos de camada aberta B^- , C^- e O^- , executados nos níveis de teoria de perturbação de muitos corpos em quarta ordem (MBPT(4)) e coupled cluster. Nos Cálculos coupled cluster somente as substituições duplas são incluídas no processo iterativo, mas as contribuições das substituições simples e triplas são adicionadas de maneira semelhante a MBPT(4), com os coeficientes das substituições duplas obtidos via coupled cluster (CCD+ST(CCD)). Os resultados mostram grandes aumentos nos valores calculados com a inclusão de correlação eletrônica e grandes anisotropias.

SOLUÇÃO VARIACIONAL DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER PARA OS POTENCIAIS $V(x) = \beta x^2 + \lambda x^p$, ($p = 4, 6, 8$)

MATOS, J. M. O.; GONÇALVES, L. L.

Universidade Federal do Ceará, Departamento de Física

A equação de Schrödinger é resolvida numericamente para os potenciais unidimensionais $V(x) = \beta x^2 + \lambda x^p$, ($p = 4, 6, 8$), usando-se o método variacional de Rayleigh-Ritz em sucessivas aproximações. Os 21 primeiros autovalores são obtidos com a precisão de 30 algarismos significativos, assumindo-se como funções de base os auto estados do oscilador harmônico simples ($|n\rangle = N_n H_n \exp(-\omega x^2/2)$ onde ω é determinado minimizando-se a energia do pseudo estado $1/\sqrt{2}(|0\rangle + |1\rangle)$ para cada caso ($\beta = 0; 1e\lambda = 0, 001; 1, 0; 10, 0; 1000, 0; 40000, 0$). A precisão das funções de onda correspondentes é verificada pela comparação dos momentos de transição calculados via os elementos de matriz

$$\langle \Psi_i | x | \Psi_j \rangle$$

e

$$i/(\epsilon_j - \epsilon_i) \langle \Psi_i | p | \Psi_j \rangle .$$

As intensidades relativas das transições são obtidas e comparadas com os casos limites do oscilador harmônico simples e do poço de potencial quadrado. Os resultados encontrados são também comparados com aqueles obtidos por outros métodos.

THE ABSORPTION SPECTRA OF CLUSTERS OF K_3C_{60}

FAZZIO, A.

USP

COUTINHO, K.; CANUTO, S.

USP e UFPE

MOTA, R.

University of Utah - Salt Lake City

Potassium-doped C_{60} has been shown to have a single stable superconducting phase, K_3C_{60} , with a transition temperature of 19.3 °K. It is now known that the crystal structure of this compound has a face-centred cubic structure with a well defined stoichiometry. These results have stimulated a great interest in the study of the electronic structure of K_3C_{60} . In this contribution we present the results of configuration interaction calculations of the ground and excited states of several clusters of potassium-doped C_{60} . All calculations are made at the INDO-CI level and the results are presented for various clusters sizes. The absorption spectra obtained give interesting suggestions towards an understanding of the electronic properties of $C_{60} : K_n$.

Teoria de Estrutura Eletrônica II (ATO) - 21/05/93

MOMENTO DE DIPOLO, POLARIZABILIDADE E SUAS DERIVADAS PARA O MgC E CaC

CASTRO, M. A. DE

UFG

CANUTO, S.

UFPE

Após a descoberta recente no espaço interestelar do SiC, outros carbetos diatômicos são esperados serem observados. Devido à abundância cósmica os mais prováveis são o FeC, MgC, CaC e AlC. Destes sistemas o AlC é o único para o qual existem resultados experimentais [L B Knight, S T Cobranchi, J O Herlong and C A Arrington, Chem. Phys. 92,5856(1990)]. Cálculos de constantes espectroscópicas são disponíveis para o AlC [P E M Siegbahn, J Almlof, A Heiberg and B O Ross, J. Chem. Phys. 74,2384(1981)], MgC [M A Castro, S Canuto and F Müller-Plathe, ApJ 367,L69(1991)] e CaC

[M A Castro, S Canuto and F Müller-Plathe, Phys. Rev.A 46,4415(1992)]. Entretanto nenhum Cálculo de propriedades elétricas tem sido publicado para estes sistemas. Neste Trabalho serão apresentados resultados de cálculos para a polarizabilidade e o momento de dipolo do MgC e CaC na separação internuclear de equilíbrio. Estes Cálculos incluem correlação eletrônica por meio do método de teoria de perturbação de muitos corpos em quarta ordem, e utilizam extensos conjuntos de funções base, selecionados cuidadosamente. Os resultados mostram padrões de comportamento semelhantes para os dois sistemas, com grandes contribuições de correlação eletrônica, tanto para o momento de dipolo quanto para a polarizabilidade. Cálculos para estas propriedades foram também realizados em distâncias vizinhas à separação de equilíbrio e os resultados foram usados nos cálculos de derivadas em relação à distância internuclear.

APLICAÇÕES DA FUNÇÃO DE ONDA MULTIESTRUTURAL GENERALIZADA

NASCIMENTO, M. A. C.

INSTITUTO DE QUÍMICA, DEPARTAMENTO DE FÍSICO-QUÍMICA, UFRJ

A função de onda multiestructural generalizada combina as vantagens dos modelos VB e SCF-MO, preservando as estruturas químicas clássicas mas otimizando os orbitais de forma auto-consistente. Cada estrutura pode ser representada por uma função do tipo Hartree-Fock, ou ainda por funções do tipo MCSCF e CI que contêm, claramente descritos, os mais importantes efeitos de correlação. a função de onda final é obtida variacionalmente e consiste da superposição das funções de onda representando cada uma das diferentes estruturas consideradas. Esta função de onda é particularmente adequada quando a descrição do estado molecular requer funções de onda localizadas. A superposição de estruturas localizadas e não localizadas permite definir variacionalmente o grau de localização necessário à melhor descrição do sistema. Ela é também bastante conveniente para descrever efeitos de correlação eletrônica, mantendo uma forma compacta e fácil de se interpretar. Como cada uma das estruturas pode ser representada por uma função de onda correlacionada contendo os efeitos dominantes (claramente identificáveis), um número bastante reduzido de estruturas será necessário na função de onda MEG para se descreverem os efeitos menos importantes. a recuperação destes efeitos residuais, mas não desprezíveis, pelos métodos tradicionais, requer um grande número de configurações em cálculos do tipo CI ou CC, ou tratamento de alta ordem do tipo MBPT. Portanto, a função de onda MEG permite a introdução dos efeitos de correlação sem que se perca a visão simples fornecida pelas estruturas químicas e com moderado esforço computacional. Serão apresentadas aplicações da função de onda MEG no estudo de

espectros de fotoelétrons, transições de camada interna e na descrição de estados eletrônicos de políenos lineares.

APLICAÇÃO DO FORMALISMO DE ENTROPIA MÁXIMA NA FOTODISSOCIAÇÃO MOLECULAR

XAVIER JUNIOR, I. DE M.

DQF-UFPE

SILVA, J. J. DA; MORAES, F. J. S.

DF-UFPE

Conhecendo-se a superfície de energia potencial de um sistema poliatômico é possível determinar o papel da energia na ocorrência de uma fotodissociação molecular induzida por laser. Cálculos quânticos permitem estabelecer as seções de choque de estado a estado. Em algumas situações observa-se uma distribuição de estados dos fragmentos altamente específica, em outras obtêm-se distribuições estatísticas que se aproximam da distribuição uniforme. Nesta distribuição, todos os estados quânticos finais dos fragmentos são igualmente prováveis correspondendo assim a um estado de entropia máxima. A fotodissociação de uma molécula triatômica é descrita por um método algébrico de propagação de pacote de onda, dentro de um contexto de simetrias dinâmicas. Neste método, o pacote de onda se propaga através de um operador evolução temporal, que consiste de um produto de operadores unitários com parâmetros variacionais. A propagação temporal destes parâmetros obedece ao princípio variacional dependente do tempo de Dirac-Frenkel. A distribuição de estados vibracionais do fotofragmento diatômico obtida está em concordância com o formalismo de entropia máxima.

SUSCEPTIBILITY OF COOLED RESONANCE GAS

GHINER, A.; SURDUTOVICH, G. I.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

A connection of optical parameters of media with its microstructure or, in the other words, a so-called problem of local field is considered. For nonresonance case the local field corrections are essential for the condensed matter only, when $n\lambda^3 \gg 1$ (n is the density, and λ is the wavelength of radiation). In this situation an answer is given by Lorentz-Lorenz formula. For the domain $n\lambda^3 < 1$ this formula may not be applied, but then susceptibility usually is so small that problem of the local field not exists: the susceptibility is equal to the polarizability α of an isolated radiator multiplied by its density n . But for the resonance gas the product $n\alpha$ may be of the order of unity even for $n\lambda^3 \ll 1$, so that the local field corrections must be taken into account. It is necessary to obtain an analog of Lorentz-Lorenz formula for arbitrary values of the $n\lambda^3$ parameter. By

use of the method of integral equations [1] this problem is solved with the aid of special approach developed in [2].

The relations between micro- and macroscopic fields are derived. It is shown, that for an ideal gas Lorentz-Lorentz formula is valid for arbitrary densities. The results are given in terms of resonance gas correlation functions. The explicit formula for refractive index was obtained in the model of "incompressible" gas, when particles can not be closer to each other than on a definite distance. Such a situation due to the repulsion of resonance atoms in light field [3] was observed experimentally in the magneto-optical trap [4]. The essential distinction from Lorentz-Lorentz formula is discussed.

[1] M. Born, E. Wolf, Principles of Optics, Pergamon Press, Oxford, 1964.

[2] A. Ghiner, G. Surdutovich, submitted to Phys. Rev. A.

[3] N. Zhukova, A. Kazantsev et al, ZETP, 76, 896 (1979).

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

Física Atômica e Molecular: Experiência (ATO) - 21/05/93

ESTUDO DA INFLUÊNCIA DO DESBALANÇO DE INTENSIDADE E DESALINHAMENTOS ASSIMÉTRICOS DOS FEIXES LASER NAS CONFIGURAÇÕES ESPACIAIS DE ÁTOMOS CONFINADOS NUM TRAP MAGNETO-ÓTICO

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

IFQSC - USP

O fato de a luz exercer forças mecânicas sobre átomos permite o resfriamento e aprisionamento destes, existindo vários tipos de traps - armadilhas - capazes de aprisioná-los. Em nosso laboratório utilizamos um trap magneto-ótico espontâneo, que consiste em três pares de feixes laser contrapropagantes de polarizações circulares opostas arranjados em direções mutuamente ortogonais sintonizados numa frequência abaixo da frequência natural da transição considerada, e um campo magnético de gradiente constante, que é nulo no ponto em que os feixes se interceptam. Neste trabalho fazemos um estudo teórico, analítico e numérico, das configurações espaciais de átomos de sódio confinados neste trap utilizando um modelo bidimensional com quatro feixes laser gaussianos desalinhados no plano XY, formando um quadrado. Consideramos

aqui o átomo de sódio como um sistema de dois níveis (transição $3S_{1/2}(F=2) - 3P_{3/2}(F=3)$). Utilizamos desalinhamentos assimétricos em relação ao centro do trap, onde o campo magnético é nulo, bem como feixes laser de intensidades diferentes e quatro feixes não paralelos, onde os desalinhamentos nas direções x e y são funções lineares das coordenadas x e y respectivamente. Estes resultados são comparados com os obtidos para desalinhamentos paralelos e simétricos em relação ao centro do trap e feixes laser de mesma intensidade, de modo a observarmos a influência dos desbalanços de intensidade e assimetria dos desalinhamentos nestas configurações espaciais.

Estudos energéticos para as moléculas NH_3 , $NiNH_3$ e $FeNH_3$ TERRA, J.; GUENZBURGER, D. CBPF

Estudos Mössbauer no ^{57}Fe altamente diluído em amônia sólida (1) motivaram-nos a calcular a estrutura eletrônica e as interações hiperfinas Mössbauer, deslocamento isomérico e interações quadrupolar e magnética, na molécula $FeNH_3$.

Utilizamos o método DVM-Discrete Variational Method, na aproximação da densidade local em sete diferentes configurações eletrônicas, considerando os potenciais de troca e o de troca e correlação

A ausência de medidas experimentais da distância interatômica Fe-N, levou-nos a calcular a energia total para diferentes valores de Fe-N a fim de determinarmos a distância de equilíbrio. Determinamos também distâncias de equilíbrio para as moléculas NH_3 e $NiNH_3$ a fim de compararmos nossos resultados com aqueles existentes na literatura (2) obtidos por outros métodos.

(1) E. B. Saitovitch, J. Terra e F. J. Litterst, Phys. Rev. B 39, 6403 (1989).

(2) K. Hermann e P. S. Bagus Phys. Rev. B 28, 560 (1983).

ACRÉSCIMO CONTROLADO DE ÍONS NA CHAMA E SEU EFEITO NA FORMAÇÃO DE FULIGEM

FERRARI, C. A.; NAGAI, E. Y.; PENNA, A. F. S.
Depto. Eletrônica Quântica - IFGW - UNICAMP

Como é bem sabido pela literatura da área, ainda existe controvérsias quanto ao precursor no processo de formação de fuligem em uma chama de hidrocarbonetos. O presente experimento, da possibilidade de monitorar a injeção de íons atômicos em uma chama de ar-acetileno pelo Efeito Optogalvânico e, concomitantemente, medidas a extinção da radiação laser pelas partículas de fuligem suspensas. Esta montagem permite ainda, que

estas medidas sejam feitas, de maneira continuuapercorrendo verticalmente a chama em toda a sua extensão. Tenta-se desta maneira em primeiro lugar, evidenciar o papel do íon na formação da fuligem e se for o caso verificar a partir de que ponto, em relação a zona de reação o processo do aparecimento, da fuligem se desencadeia.

COMPORTAMENTO DO NÚMERO DE ÁTOMOS APRISIONADOS EM ARMADILHAS MAGNETO-ÓPTICAS

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

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

Os átomos em uma armadilha magneto-óptica estão sujeitos a uma força que é uma função complicada da posição e da velocidade [1]. Para ocorrer a captura destes átomos, eles têm que ter velocidades baixas o suficiente para que possamos confiná-los no centro da armadilha numa região de campo magnético nulo. O número de átomos aprisionados é determinado pelo equilíbrio entre a taxa de captura dentro da armadilha e a taxa de perdas. Neste trabalho utilizamos um método teórico simples onde todos os átomos que têm uma velocidade da ordem da velocidade de captura v_c são aprisionados [2].

Observamos, então, o comportamento do número de átomos de sódio aprisionados em uma armadilha magneto-óptica em função de diversos parâmetros e comparamos nossos resultados experimentais com o modelo teórico simples citado acima. Nossas medidas foram realizadas a temperatura ambiente ($\sim 18^\circ\text{C}$) e a temperatura de 50°C .

[1] R.J. Cook, Phys. Rev. A **20**, 224 (1979).

[2] A.M. Steane, M. Chowdhury and C.J. Foot, J. Opt. Soc. Am. B **9**, 2142 (1992).

ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL DO DIFLUOROMETANO

ZERBETTO, S. C.; VASCONCELLOS, E. DA C. C.
UNICAMP-IF-DEQ

Neste trabalho apresentaremos alguns resultados preliminares sobre o estudo do espectro de absorção no infravermelho do gás molecular $12\text{CH}_2\text{F}_2$ e de sua forma isotópica $13\text{CH}_2\text{F}_2$. Ambos são meios ativos extremamente eficientes para a geração de radiação laser no infravermelho longínquo", quando bombeados com laser de CO_2 na região de $10\ \mu\text{m}$. É de grande interesse o estudo de seu espectro de absorção", o que possibilitará posteriormente uma identificação das transições laser já observadas", além de uma possível previsão da ocorrência de novas linhas. Obtivemos espectros de absorção dos compostos $12\text{CH}_2\text{F}_2$ e $13\text{CH}_2\text{F}_2$ ", na faixa entre 400 e $4000\ \text{cm}^{-1}$ ", aproximadamente", utilizando um espectrômetro a transformada de Fourier (FTS). A ocorrência de linhas de laser próximas à

transições de interesse metrológico e astrofísico", torna o difluorometano uma fonte coerente de grande utilidade nessas áreas.

TEMPERATURE-ANISOTROPIC MOT

MILORI, D. M. B. P.; SURDUTOVICH, G. I.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

Magneto-Optical Trap (MOT) with different temperatures of windows and cell walls is suggested. In a MOT six orthogonal intersecting laser beams in presence of weak magnetic-field gradient produce a sample of cooled atoms. The number of trapped atoms is determined by the balance between the capture rate into the trap and the loss rate due to collisions with environment atoms into the cell. When free path length of an atom due collisions lesser than cell size the capture happens only for atoms moving along laser beams, i.e., outgoing from the windows, whereas the loss rate is primarily due to atoms going from all directions. These atoms are evaporating by cell walls. So as atomic streams from windows depend on its temperature very strong it is possible, by moderate heating of windows, appreciably increase these streams. At the same time cell walls may be cooled to diminish collision rate with vapor atoms. As a result steady-state number of trapped atoms increases in comparison with this number for temperature-isotropic MOT. This increase is equal to ratio of resonance gas densities at window and wall temperatures. For temperature difference of about $20\text{-}30^\circ$ the density of trapped atoms may be increased by the order of magnitude. (Supported by FAPESP and CNPq).

DIFERENTES MÉTODOS DE OBTENÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DAS FORMAS METAESTÁVEIS DE ALGUNS NITROCOMPOSTOS AROMÁTICOS

BASSI, D.

Instituto Tecnológico de Aeronáutica - ITA

SAKANE, K. K.

Universidade do Vale do Paraíba - UNIVAP

A presente comunicação é parte de um trabalho mais amplo que visa estabelecer a natureza conformacional de formas polimórficas de alguns nitrocompostos aromáticos pelos espectros Infravermelho e Raman. Neste trabalho, são discutidos diferentes métodos de obtenção das formas metaestáveis dos seguintes cinco compostos: sulfeto e seleneto de metila e o-nitrofenila; éter, sulfeto e seleneto de p,p' - dinitrodifenila. As formas metaestáveis (β) do sulfeto e seleneto de metila e o-nitrofenila foram obtidas pela indução com as formas estáveis (α) do seleneto e do sulfeto análogos, respectivamente. As formas (β) do éter, sulfeto e seleneto de p,p' - dinitrodifenila foram preparadas pela recristalização em etanol, sublimação a 140°C e indução com

sulfeto análogo respectivamente. Os espectros do Infravermelho da região de $900-600 \text{ cm}^{-1}$ são mostrados pois nesta região, aparecem as principais frequências que caracterizam o poliformismo.

SOBRE A POSIÇÃO DOS ÁTOMOS PARADOS NUMA MÁQUINA DE DESACELERAÇÃO DE FEIXES ATÔMICOS

LEITE, C. A. F.

Universidade Federal Fluminense, Niteroi -RJ-

BAGNATO, V. S.

IFQSC DFCM -USP- Sao Carlos -SP-

Realizamos a desaceleração de um feixe de átomos de Sódio neutros, por meio de um feixe laser contrapropagante ao mesmo. Utilizamos a técnica de sintonia Zeeman para compensar o efeito Doppler que faz com que os átomos saiam de ressonância com o laser desacelerador, à medida em que absorvem momenta dos fótons e perdem velocidade. Ao atingem velocidades próximas de zero, os átomos mostram uma forma espacial lembrando uma "taça". A forma peculiar com que esses átomos atingem o repouso foi analisada através da observação visual e do registro fotográfico. Pela análise numérica, baseada na força de pressão de radiação exercida pelo feixe laser desacelerador e na forma gaussiana do mesmo, pudemos explicar o fenômeno, o que constitui mais uma contribuição para a compreensão do processo de desaceleração de feixes de átomos neutros.

DESSORÇÃO DE ÍONS SECUNDÁRIOS DE H^+ POR ÍONS ENERGÉTICOS

PEREIRA, J. A. M.; LEITE, C. V. DE B.; BAPTISTA, G.; SILVEIRA, E. F. DA; MOURA FILHO, J. J. DE

Departamento de Física, PUC-Rio

A dessorção de íons de H^+ devido ao bombardeamento de superfícies orgânicas e metálicas é um processo que apresenta características ainda não bem entendidas. Este trabalho tem como objetivo contribuir para elucidar algumas destas características através do estudo do comportamento do rendimento da dessorção com a energia e estado de carga do íon incidente. Feixes de C, N e O com energias de 1,0 a 3,0 MeV foram utilizadas neste estudo. Observa-se que a emissão de íons secundários de H^+ depende do poder de freiamento (SP) e da carga do íon incidente no material. Os resultados obtidos indicam que o SP nuclear é o parâmetro básico no processo de emissão secundária de H^+ apesar da componente eletrônica do SP ser uma ordem de grandeza maior do que a nuclear. A análise do rendimento de dessorção de H^+ em função do estado de carga do íon incidente mostra uma dependência com o cubo da carga inicial do íon incidente, isto é, o rendimento de dessorção (Y_s) segue a relação $Y_s = \alpha q^3$ onde q é a carga inicial do íon incidente. Esta dependência é a mesma qualquer que seja a velocidade do íon, com pe-

quena dependência do parâmetro α com a velocidade. Os resultados acima sugerem que o processo de dessorção de H^+ ocorra via dois mecanismos. O mecanismo de volume, que depende do estado de carga de equilíbrio, da velocidade e da componente nuclear do SP e o mecanismo de superfície coulombiana, que depende principalmente da carga inicial do íon incidente. Desta forma o rendimento de dessorção total (Y) pode ser considerado como a soma $Y_T = Y_V + Y_S$ onde

$$Y_S = \alpha q^3$$

Estes mecanismos são considerados na discussão dos resultados experimentais que serão apresentados. Um estado detalhado sobre o comportamento do rendimento de dessorção de H^+ com o estado de carga é assunto de outro trabalho desta conferência.

DEACELERAÇÃO DE Cs PELA TÉCNICA DE SINTONIA ZEEMAN

SANTOS, M. S.; FLEMMING, J.; TUBOY, A. M.;

BAGNATO, V. S.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

Átomos de Cs neutros em um feixe atômico foram desacelerados por um feixe laser através da transição $6^2S_{1/2} (F=4) \rightarrow 6^2P_{3/2} (F'=5)$. Pela primeira vez a técnica de sintonia Zeeman foi aplicada ao Cs. Esta técnica baseia-se na utilização de um campo magnético de perfil espacial parabólico, de maneira que o efeito Zeeman compense o efeito Doppler e mantenha o átomo ressonante com o processo. Foi necessário usar um segundo laser ressonante com a transição $6^2S_{1/2} (F=3) \rightarrow 6^2P_{3/2} (F'=4)$ para contornar o problema do bombeamento óptico. Trabalhamos em regime de campo magnético fraco devido ao seguimento adiabático. Neste regime os spins nuclear e eletrônico mantêm-se acoplados, havendo então a probabilidade de ocorrer transições erradas. Fizemos uma simulação numérica do processo de desaceleração e observamos que existe um intervalo de "detuning" útil, fora do qual não há desaceleração. Para detecção da desaceleração usamos um método simples por nós desenvolvido, que dispensa o laser de prova. Conseguimos desacelerar os átomos até 900 cm/s, que equivale a 500 mK, com $\Delta = 155 \text{ MHz}$ deslocado para o azul. Da parte da distribuição de átomos que sofre a desaceleração (aproximadamente 20%), a velocidade final é de 10% da inicial.

DESSORÇÃO DE H^+ INDUZIDA POR ÍONS MULTIPLICAMENTE CARREGADOS

PEREIRA, J. A. M.; BAPTISTA, G. B.; LEITE, C. V. B.; MOURA FILHO, J. J. DE
Departamento de Física, PUC-Rio
 SILVEIRA, E. F. DA
Instituto de Física, PUC-Rio

Neste trabalho estudamos a desSORÇÃO de H^+ induzida por projéteis de C, N e O com diversas energias e diferentes estados de carga em alvos metálicos e orgânicos. O feixe de íons utilizado foi obtido com o Acelerador Van de Graaff da PUC-Rio com voltagens máxima de 4 MV. Com estados de carga de $1+$ e $4+$ e energias de 1,0 a 2,5 MeV. Os resultados obtidos para o rendimento de desSORÇÃO dos íons de H^+ sugerem que a contribuição devido a interação coulombiana depende da carga do íon incidente na seguinte forma $Y_S = \alpha q^3$. Nesta relação q é o estado de carga do íon incidente e α é um parâmetro que depende linearmente da velocidade do projétil. Em altas velocidades $v > v_0$ (velocidade de Bohr) observa-se uma tendência a saturação no valor do parâmetro α .

ESTUDO ESPECTROSCÓPICO DO COMPOSTO 2,5-BIS(2'-BENZOXAZOLIL) HIDROQUINONA E SEUS DERIVADOS METILADOS

ANDREAZZA, M. L.; CUNHA, S. L. S.
Instituto de Física, UFRGS
 SOUTO, A. A.; STEFANI, V.
Instituto de Química, UFRGS

Apresentamos um estudo espectroscópico do complexo molecular 2,5-bis(2'-benzoxazolil)hidroquinona e seus derivados metilados. Uma propriedade molecular importante, desta categoria de moléculas, é apresentar uma forma tautomérica, decorrente de uma transferência protônica, quando excitadas por luz ultravioleta. Observamos os espectros de emissão das soluções em DMF, quando excitados pelo laser de N_2 (337nm) e quatro linhas do laser de Ar^+ (458nm, 476nm, 488nm, 514nm). Observamos pela primeira vez laser na banda com máximo em 600nm, originária da forma tautomérica do derivado com uma metila. Observamos também emissão laser na banda violeta do derivado duplamente metilado, cuja transferência protônica é inibida pelas metilas e portanto não apresenta a banda de emissão próximo a 600nm. (Este trabalho foi parcialmente financiado pela FAPERGS e CNPq).

BIOFÍSICA

*Workshop: Interações Proteicas (BIO,
CRI, LIQ) – 19/05/93*

Interações Proteicas

SANTORO, M. M.

Departamento de Bioquímica e Imunologia, Instituto de Ciências Biológicas, UFMG

Uma interessante propriedade de macromoléculas biológicas é a habilidade de apresentar mudanças estruturais induzidas por temperatura. Estas transições são usualmente cooperativas e são fortemente influenciadas pelo solvente. A técnica de *Calorimetria Diferencial de Varredura* tem o potencial de analisar todas as transições estruturais que um sistema desenvolve quando é perturbado pela variação sistemática de temperatura. Esta técnica também pode ser usada para estimar constantes de ligação de modelos termodinâmicos formulados para descrever sistemas que envolvem interações proteínas-ligantes e proteínas-proteínas, com estequiometria de ligação 1:1 ou maior. Simulações mostram que esta técnica pode potencialmente medir constantes de ligação de até 10^{40} M^{-1} . Dados da Literatura serão apresentados e discutidos. Para a maioria dos sistemas estudados, as constantes de interação avaliadas por esta técnica comparam favoravelmente com valores da Literatura estimados por outras técnicas.

PRESSURE STABILITY OF PROTEINS: Implications for Protein Folding and Assembly

SILVA, J. L.

Depto. de Bioquímica, Instituto de Ciências Biomédicas, UFRJ

High temperature changes both the energy content and the volume of the system and since proteins are flexible polymers linked by bonds of strengths not much larger than the thermal energy, the internal interactions of proteins are changed by temperature in ways that cannot be easily foreseen. The effects of pressure are more amenable to interpretation than those of temperature. Application of pressure effects internal interactions exclusively by the changes in the distances (volumes) of the components, while the total energy of the system remains almost constant. The studies on protein dimers have given basic information on the thermodynamics and mechanism of subunit association against which we can measure the important differences seen in the association of oligomers of higher order, from trimers and tetramers to complex particles like virus. Arc repressor and other protein dimers dissociate to monomers under pressure and assume an intermediate conformation. Pressure dissociation promoted a decrease in the average energy of fluorescence emission and a decrease in the excited-state lifetime of the single tryptophanyl residue, Trp 14, suggesting exposure of this residue to an aqueous environment following dissociation. We examined the conformation and hydrodynamic properties of the dissociated monomer and compared them with the properties of the chemically and thermally denatured forms. There is a large increase in fluorescence of bis-ANS promoted by binding to the pressure-dissociated subunit in contrast to the absence of fluorescence in the condition of chemical or thermal denaturation. The fluorescence anisotropy experiments indicate the dissociated monomer is compact whereas the emission spectra and lifetime distribution of Trp 14 fluorescence suggest exposure of the nonpolar core. These data suggest that the pressure-dissociated monomer adopts a molten-globule conformation. The different denatured states of Arc repressor were also characterized by one-dimensional and two-dimensional NMR. The NMR spectra of the monomer under pressure are typical of a molten globule and they are considerably different from those of both the native dimer and the thermally or chemically denatured monomer. The presence of NOEs in the β -sheet region in the dissociated state suggests that the intermonomer β -sheet (residue 6-14) in the native dimer is replaced by an intramonomer β -sheet.

Similar properties have been found in other proteins such as the R17 phage coat protein and the liver alcohol dehydrogenase. A large specific volume change and the stabilization of the associated state by glycerol and NaCl demonstrate that the drifted state of dissociated monomers is characterized by binding of water to the subunit contacts resulting in the "molten" structure of the residues in the interface. These data suggest that for small dimers, the dissociation lead to molten-globule conformation that is probably the "physiological" state of the protein before association to the other subunit.

PROTEIN-NUCLEIC ACID AND PROTEIN-PROTEIN INTERACTIONS

ARNI, R. K.

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

Specific interaction of nucleotides or nucleotide sequences in both RNA and DNA are of key importance in understanding the mechanism of recognition. X-ray crystallographic structural studies of the complexes of proteins with nucleic acids provides us with powerful means of obtaining information regarding the requirements for specific recognition of nucleotides and nucleotide sequences by proteins which is of central importance in molecular biology. Ribonuclease T1 isolated from the fungus *Aspergillus oryzae* degrades single-stranded RNA to exclusively yield oligonucleotides with terminal guanosine-3'-phosphate. This cleavage involves the formation of an intermediate 2'-3'-cyclic phosphate, followed by hydrolysis. Crystallographic structures of this enzyme both in the uncomplexed (Arni et al., *Biochemistry*, 31, 3126-3135, 1992) and complexed with the specific inhibitor guanosine 2' monophosphate (Arni et al., *Acta crystallogr.*, B43, 548-554, 1987 and Arni et al., *J. Biol. Chem.*, 263, 15358-15368, 1988) provides us with valuable information regarding the possible mode of action and the structural requirements of this enzyme. The structure of the non-covalent complex of bovine and human prothrombin fragment 2 (molecular weight 14 000D) and human PPACK thrombin (Arni et al., *Biochemistry*, 1993, in the press) provides information about protein-protein interaction. Structural aspects of protein-nucleic acid and protein-protein interaction will be presented.

Teoria e Modelagem de Sistemas Anfílicos (BIO) - 19/05/93

simulações das moléculas do filme lipídico e da água.

MODELAGEM MOLECULAR DE MELANOTROPINAS NA INTERFACE MEMBRANA-ÁGUA

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

Instituto de Física - USP

MUNDIN, K. C.; BISCH, P. M.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CNPq

Foi verificado experimentalmente que melanotropinas (hormônios peptídicos relacionados com o processo de melanização) sofrem mudanças conformacionais quando passam do meio aquoso para a fase lipídica de membranas reconstituídas. Através de um programa computacional de modelagem molecular, atualmente em desenvolvimento, pretendemos simular o hormônio natural e alguns de seus análogos sintéticos, na interface membrana-água, com o objetivo de compreender e modelar as mudanças conformacionais observadas experimentalmente. Atualmente o programa permite tanto otimizar a geometria das moléculas, encontrando os mínimos conformacionais, como produzir simulações de dinâmica molecular a uma dada temperatura. O programa é ainda capaz de produzir gráficos de energia em função dos ângulos de torção da molécula. O meio solvente é simulado como um contínuo eletrostático, caracterizado por uma constante dielétrica ϵ ($\epsilon = 80$ para o meio aquoso). A membrana será simulada como uma discontinuidade neste meio, definindo-se uma região de baixa constante dielétrica ($\epsilon = 2$) correspondente a membrana. Espera-se ainda estender as simulações para situações mais realistas, introduzindo-se

A INFLUÊNCIA DA INTERAÇÃO ELÉTRICA NA ESTABILIDADE DOS FILMES DE LIPÍDIOS

SOUZA, E. R. DE; PINTO, N. M. A. C.

UFBA

Nesta pesquisa estudamos os efeitos provocados por interações elétricas na estabilidade dos filmes de lipídios e, em consequência, a sua repercussão nos processos de ruptura de tais sistemas. Usamos uma abordagem eletro-hidrodinâmica na aproximação de longo comprimento de onda, ou seja, para comprimento de onda da perturbação muito maior do que a espessura do filme, visto que resultados de pesquisas realizadas para diversos modelos de filmes líquidos mostraram que é nesta faixa de comprimentos de ondas que as instabilidades são mais favorecidas. Através de uma análise não-linear das equações que governam o movimento do sistema investigamos a ruptura do filme.

O interesse principal desta pesquisa reside no fato do filme de lipídios, constituindo-se de uma solução de hidrocarbono de espessura bastante estreita circundada por camadas de lipídios, apresentar uma estrutura muito semelhante à estrutura básica das biomembranas, as quais desempenham um papel muito importante em um grande número de fenômenos que ocorrem a nível celular, a exemplo da endocitose e da fagocitose.

**ESTUDO DA ESTABILIDADE MECÂNICA
DA MEMBRANA DO ERITRÓCITO UMA
APLICAÇÃO DA ANÁLISE
HIDRODINÂMICA LINEAR**

CORTEZ-MAGHELLY, C.

Depto de Fisiologia - UERJ

BISCH, P. M.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CNPq

Há sugestões (P.M. Bisch et al, J.Chem.Phys. 1985, 83: 5953-61); D.Gallez et al, Prog.Biophys.Mol.Biol. 1986, 48: 155-99) de que a Análise Linear em Modos Normais seja um método matemático adequado para o estudo da evolução de perturbações ondulatórias em membranas biológicas. No presente trabalho, essa análise é desenvolvida para um modelo que toma a membrana do eritrócito como um filme fluido, plano e infinito de espessura h ($z = -h/2$ a $z = h/2$) e de reologia intrínseca, que separa duas fases volumétricas; sendo o problema formulado do ponto de vista hidrodinâmico. Dessa forma, obtém-se a equação de dispersão típica do movimento da membrana. Nesta, dados numéricos relativos à membrana do eritrócito são aplicados e curvas de estabilidade crítica em função da força iônica, da carga superficial e do potencial transmembranar são obtidas e analisadas. Os resultados demonstram que a estabilidade da membrana aumenta com a diminuição do módulo da carga elétrica superficial externa e diminui com o aumento da negatividade interna. Por outro lado, verificou-se que o potencial transmembranar e a carga superficial externa têm importância fundamental no aumento da estabilidade que é observada quando a força iônica é diminuída. Os resultados são comparados com os experimentais obtidos por Coackley et al (Bioch.Biophys.Acta 1980, 602: 355 - 375).

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE UM
MODELO SIMPLES PARA MICELIZAÇÃO.**

BERNARDES, A. T.

UFOP

BISCH, P. M.

CBPF

HENRIQUES, V. B.

IFUSP

Moléculas anfílicas em água apresentam autoagregação, com formação de diversos tipos de estruturas, tais como micelas, bicamadas, vesículas ou membranas biológicas. Desenvolvemos a simulação numérica de um modelo microscópico do tipo gás de rede, de dois componentes, polímeros pequenos (anfílicos) e monômeros (água), com interações atrativas entre as partículas de "água" (água-cabeça polar) e entre as partículas de "óleo" (monômeros da cadeia hidrocarbônica) e repulsivas entre as partículas de água e óleo.

Nos estudos de simulação de Monte Carlo, no caso de trímeros em redes quadradas, obtivemos micelização es-

pontânea e polidispersividade. Também conseguimos determinar a Concentração Micelar Crítica para vários valores de temperatura.

*Proteínas, Membranas Lipídicas
(BIO) - 19/05/93*

**EFEITOS DA VARIAÇÃO DO pH NA
FORMA DA SORO ALBUMINA BOVINA
(BSA) OBSERVADAS POR SAXS.**

OLIVIERI, J. R.

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

Estudos anteriormente realizados sobre BSA em solução, utilizando várias técnicas, tais como sedimentação, dispersão dielétricas e espalhamento de raios a baixos ângulos (SAXS) tem conduzido a diferentes modelos para a sua forma, com pequenas variações entre eles. Esses estudos indicam que a forma da BSA pode ser aproximada por um elipsoide prolato, um elipsoide oblato, um prisma reto ou um prisma achatado. Nossos resultados, obtidos a partir de medidas feitas com SAXS, mostram a molécula de BSA dividida em três domínios, sendo cada um deles subdivididos em dois subdomínios, numa analogia muito grande com a HSA. Diferentes conformações estão sendo propostas para diversos pH's e analisados por comparação entre a função distribuição de distâncias $P(r)$ desses modelos teóricos com as obtidas experimentalmente. Grandes variações conformacionais são observadas em função da mudança do pH, indicando que a molécula de BSA é uma proteína muito flexível e apresenta formas semelhantes as da HSA.

**ESTUDOS POR ABSORÇÃO ÓTICA DE
METAHEMOGLOBINA DE *Glossoscolex
paulistus***

ZERI, A. C.; TINTO, M. H.; IMASSATO, H.; TABAK, M.

Instituto de Física e Química de São Carlos, USP

A oxidação da oxihemoglobina de *Glossoscolex paulistus* com ferricianeto de potássio em pH 7.0 leva à formação de metahemoglobina. A estrutura oligomérica desta proteína gigante é semelhante à de sua forma oxi e na cromatografia em Sephadex G-200 uma única banda é observada correspondente à proteína nativa de P.M. 3.1×10^6 Da. A estabilidade da metahemoglobina é menor do que a da oxihemoglobina, já que a pH 9.0 uma dissociação completa é observada obtendo-se duas bandas de P.M. cerca de 50000 Da (trímero) e 17000 Da (monômero). Na oxihemoglobina a banda

predominante a pH 9.0 é a fração 1/12 da Hb. A metahemoglobina a pH 7.0 contém uma fração considerável de aquometa e tanto a alcalinização quanto acidulação da solução levam à mudanças drásticas nos espectros de absorção com a evidente formação de hemicromos. Os espectros foram analisados através de sua decomposição em componentes gaussianas, afim de verificar as diversas formas em equilíbrio em solução em função do pH. Na faixa de pH entre 7.0 e 8.0 a forma aquometa (spin alto) transforma-se na forma hidróximeta (spin baixo). Simultaneamente ocorre a formação de hemicromo, o que pode ser visto pela falta de isobesticidade nos espectros. A alcalinização até pH 9.0 seguida de reacidulação, demonstra que a formação de hemicromo é irreversível e que o hemicromo formado apresenta uma transição ácido-alcalina diferente da que ocorre na metahemoglobina humana, uma vez que uma forma de spin alto é produzida a pHs mais alcalinos. A menor estabilidade da metahemoglobina e maior facilidade em formar hemicromos pode estar associada à dissociação que ocorre tanto em pH alcalino quanto ácido.

RE-FOLDING DE CITOCROMO C A pHs < 3 VARIAÇÃO DE ATIVIDADE DE ÁGUA

COLOMBO, M. F.; NEVES, A. C. D.

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

O processo de renaturação de proteínas globulares envolve um estado intermediário, "globulo derretido". Este estado retém boa parte da estrutura secundária mas muito pouco da estrutura terciária. O equilíbrio entre estas estruturas em solução depende do balanço entre as forças que os estabilizam e o conhecimento dos fatores determinantes deste equilíbrio é fundamental para o entendimento daquelas forças. Nos temos investigado o processo de desnaturação ácida de citocromo C na presença de solutos neutros com o objetivo de conhecer a possível contribuição da hidratação do polipeptídeo na estabilização dos diferentes estados estruturais encontrados em solução. A desnaturação, tem sido investigada por espectroscopia de absorção no visível de citocromo C. Experimentos de desnaturação ácida na presença e na ausência de sorbitol revelaram que a adição deste soluto propicia um aumento de estabilidade ao Citocromo em comparação à desnaturação na sua ausência. A análise do comportamento da energia livre de Gibbs em função do pH revela que cerca de seis e quatro prótons ligam-se ao polipeptídeo durante a transição estado nativo / desnaturado da proteína na presença e ausência, respectivamente, de sorbitol na solução. Esta diferença pode ser atribuída a existência de um estado intermediário entre os estados nativo e randômico cuja formação depende da ligação das cargas positivas e que é estabilizado pela presença do sorbitol. O efeito do aumento da concentração de sorbitol à solução, a pH, foi medido a diferentes pH's. Encontramos que a ΔG é uma função linear da atividade de

água indicando que a menor hidratação do estado de globulo derretido em relação ao estado desnaturado é responsável pela estabilização observada. A análise dos dados tem permitido determinar o valor desta variação de hidratação assim como o número de prótons envolvidos na transição. Estes resultados fornecem evidências adicionais de água desempenha um papel importante no balanço das forças intermoleculares que induzem "folding".

INTERAÇÃO DE DERIVADOS DE DIPIRIDAMOL COM ALBUMINA DE SORO BOVINO

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

Universidade de São Paulo-IFQSC

Os efeitos do dipiridamol (DIP), um vasodilatador coronariano, de inibir o transporte de adenosina e de fosfato em eritrócitos dependem fortemente dos substituintes no grupamento pirimido[5,4-d]pirimidina. Neste trabalho estudou-se quatro derivados de DIP, denominados, RA14, RA25, RA39 e RA47, utilizando-se espectroscopias de absorção eletrônica e de fluorescência em solução aquosa variando-se o pH na faixa de 2 a 13, e em presença de albumina de soro bovino (BSA) nos pH's 5 e 7. Os resultados obtidos mostram que os rendimentos quânticos, coeficientes de extinção e tempos de vida de fluorescência dos derivados estudados são similares aos observados para o DIP (BBActa, 1116 (1992) 241). Titulações potenciométricas dão valores de pKa's de 5,8 e 12,5 para RA39 e RA47, similar ao DIP, um único pKa em 5,8 para RA14 e pKa's em 2,25, 5,8 e 12,1 para RA25. O pKa em torno de 6,0 foi observado para todos os derivados nas titulações espectrofotométricas, sendo por isso associado a protonação dos nitrogênios do anel pirimido[4,5-d]pirimidina. Titulações do DIP e dos derivados RA14 e RA25 com BSA nos pH's 7,0 e 5,0 indicam diferentes constantes de associação. As constantes de associação e o número de sítios por molécula de proteína foram obtidos através dos gráficos Scatchard e são os seguintes: DIP pH 7- $3,0 \times 10^4 M^{-1}$ e $n=1,1$; DIP pH 5- $3,4 \times 10^3 M^{-1}$ e $n=0,84$; RA14 pH 7,0- $1,8 \times 10^3 M^{-1}$ e $n=0,4$; RA14 pH 5- $2,2 \times 10^2 M^{-1}$ e $n=0,29$; RA25 pH 7- $1,5 \times 10^4 M^{-1}$ e $n=1,1$; RA25 pH 5- $2,1 \times 10^3 M^{-1}$ e $n=1,1$. Para o DIP e RA25 ótimos gráficos são obtidos e n está em torno de 1 sítio, mas para RA14 o ajuste é pobre indicando fraca interação com BSA. Esses resultados podem ser relevantes para o efeito fisiológico do DIP a nível molecular. // Apoio: FAPESP, CNPq e FINEP

INTERAÇÃO DO HORMÔNIO MELATONINA COM MEMBRANAS LIPÍDICAS

SHIDA, C. S.

Instituto de Física da USP

CASTRUCCI, A. M. DE L.

Instituto de Biociências da USP

FREUND, M. T. L.

Instituto de Física da USP

A Melatonina (N-acetil 5-metoxitriptamina) é uma indolamina sintetizada a partir do amino-ácido triptofano na glândula pineal, da qual é o principal produto de secreção. Sua síntese está ligada ao ciclo circadiano, produzindo o empalidecimento de animais quando submetidos a períodos de escuridão. Outros estudos indicam que ela pode retardar o processo de envelhecimento e retardar, também, o desenvolvimento de processos como imunodeficiência e crescimento de tumores. Experimentos biológicos mostram que a Melatonina interage com diversos tipos de tecidos celulares, indicando uma não especificidade, e sugerindo uma possível interação da Melatonina com a fase lipídica da membrana celular. O trabalho foi realizado utilizando os fosfolípidos DMPG (dimiristoil fosfatidilglicerol) e DMPC (dimiristoil fosfatidilcolina), utilizando as técnicas de Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE) (método de marcador de spin) e fluorescência. Os resultados de RPE mostram um efeito maior em membranas modelo de DMPG, mostrando também que a interação deve ocorrer a nível da cabeça polar, uma vez que o efeito da Melatonina só é detectado quando são utilizados marcadores de spin que tenham o grupo nitróxido próximo à cabeça polar. Ao contrário dos resultados de RPE, a fluorescência mostra uma interação maior da Melatonina com DMPC. Foi desenvolvida uma técnica para solubilizar a Melatonina em solução aquosa e determinado o seu coeficiente de solubilidade. Testes biológicos realizados com esta preparação mostraram que a atividade biológica da Melatonina não é alterada. Foi também determinado o coeficiente de partição da Melatonina em membranas de DMPC e DMPG utilizando RPE e fluorescência.

ESTUDO DA CARGA SUPERFICIAL DE MICELAS E MEMBRANAS POR RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA DE MARCADORES NITRÓXIDOS.

COSTA, C. M. S.; ANTENEODO, C.; BISCH, P. M.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CNPq

BALES, B. L.

California State University, Northridge

É conhecido que a constante de desdobramento hiperfino do ^{14}N em espectros de ressonância paramagnética eletrônica de radicais nitróxidos é sensível à variação de polaridade do solvente no qual eles estão dissolvidos. Esse efeito sobre marcadores de spin anfífilicos tem sido muito utilizado para investigar a agregação de micelas de detergentes tais como CTAB. Neste trabalho medimos a constante de desdobramento hiperfino do marcador nitróxido 3-carboxy-proxyl em solução de CTAB 10^{-1}M (concentração muito acima da concentração micelar crítica), para diferentes concentrações de sal. Os resultados obtidos mostram uma diminuição significativa do valor da constante hiperfina à medida que a concentração de sal é aumentada. Esses resultados serão comparados com os obtidos para amostras contendo vesículas de fosfolípidos em presença de diferentes concentrações de sal. O método será aplicado ao estudo das variações da carga de superfície em membranas de fosfolípidos (lipossomos) induzidas pela presença de anestésicos locais.

EFEITO DA FORÇA IÔNICA NA CONCENTRAÇÃO DE COAGULAÇÃO CRÍTICA DE VESÍCULAS UNILAMELARES

BENATTI, C. R.; FEITOSA, E.

Departamento de Física, IBILCE-UNESP, São José do Rio Preto

Propriedades físicas e funcionais, como o tamanho e a permeabilidade, de vesículas (membranas fechadas de anfífilicos naturais ou sintéticos) dependem do método de preparação das mesmas. Vesículas pequenas, preparadas por sonificação em banho, têm sido muito pouco estudadas e caracterizadas estruturalmente. Utilizamos a técnica de espectroscopia UV e visível para determinar o efeito da força iônica, devido a presença de diferentes sais, no fator de estabilidade, ou concentração de coagulação crítica (ccc) de vesículas de cloreto de n,n' -dioctadecildimetilamônia (DODAC), preparadas por sonificação em banho. Os resultados mostram que a ccc depende não apenas do tipo de eletrólito presente como também da concentração monomérica. A ccc (estabilidade) decresce com a concentração de DODAC e para os sais cujo ânion seja distinto do contraíon (Cl^-) do monômero. A qualificação deste fenômeno, apesar de previsível, ainda não havia sido observado anteriormente. Apoio Financeiro: FINEP (PADCT) e

FAPESP (Projeto Temático)

DETERMINAÇÃO DAS CONSTANTES DE ASSOCIAÇÃO DA CLOROPROMAZINA A MEMBRANAS DE FOSFOLIPÍDIOS A PARTIR DA MEDIDA DO POTENCIAL SUPERFICIAL POR R.P.E.

ANTENEODO, C.; BISCH, P. M.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

MARQUES, J. F.

Université Libre de Brussels

Estudamos a adsorção do anestésico local cloropromazina (CPZ) em membranas de lipídios reconstituídas artificialmente (lipossomos multilamelares de "egg-PC"). O potencial elétrico superficial das vesículas, que é modificado em presença da forma carregada da droga, foi estimado a partir de medidas feitas mediante a técnica de ressonância paramagnética eletrônica (RPE), utilizando uma sonda paramagnética anfífila carregada positivamente. Esta sonda se particiona entre a fase aquosa e a fase da membrana em função do potencial elétrico superficial e, conseqüentemente, em função da fração de droga adsorvida na membrana. A partir dos resultados experimentais e utilizando um formalismo apropriado para descrever a adsorção da droga, é possível determinar a constante de ionização da droga na fase lipídica como assim também as constantes de associação de cada uma das duas formas da CPZ (carregada e neutra) às vesículas de fosfolipídios.

O PAPEL DO COLESTEROL NA INTERAÇÃO PEPTÍDEO-LIPÍDIO: UM ESTUDO POR RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA.

BIAGGI, M. H.; FREUND, M. T. L.

Instituto de Física - Universidade de São Paulo - SP

SCHREIER, S.

Instituto de Química - Universidade de São Paulo - SP

CASTRUCCI, A. M. DE L.

Instituto de Biociências - Universidade de São Paulo - SP

Este trabalho enfoca a interação do hormônio "α-Melanocyte stimulating hormone" (α-MSH, Ac-Ser-Tyr-Ser-Met-Glu-His-Phe-Arg-Trp-Gly-Lys-Pro-Val-NH₂) e do análogo [Nle⁴,DPhe⁷]-α-MSH com bicamadas lipídicas. Esse peptídeo é fisiologicamente importante no processo de pigmentação sendo que o análogo exibe maior atividade biológica. Embora o hormônio certamente interage com a membrana celular através de receptores proteicos (Castrucci et al. *Drugs of the Future*, 15, 41, 1990) supõe-se que a fase lipídica possa ser importante por catalisar a interação peptídeo-receptor (Sargent e Schwyzer, *Proc.Natl.Acad.Sci. USA*, 83, 5774, 1986). Filmes orientados e lipossomos de dimiristoil fosfatidil colina (DMPC) e dimiristoil fosfatidil glicerol (DMPG), com e sem colesterol, foram marcados

com 3-doxil-colestano (CSL). Ambos os peptídeos estão carregados positivamente em pH fisiológico, e mostram maior interação com bicamadas carregadas negativamente (DMPG) do que com as neutras (DMPC). Nas membranas planas com colesterol, os dois peptídeos têm efeitos opostos: enquanto o hormônio natural diminui a ordem e aumenta o movimento ao redor do eixo longo do CSL, a interação do análogo com a bicamada produz mudanças de ordem e mobilidade em direções opostas. Resultados similares, porém menos evidentes, foram obtidos com os mesmos lipídios em lipossomos. Considerando o efeito conhecido do colesterol em membranas, o presente trabalho mostra que a interação do α-MSH e colesterol não possa ser descartada. As diferentes interações dos dois peptídeos com os lipídios pode estar relacionados com diferentes conformações em meio aquoso ou na interface água/lipídio, podendo parcialmente explicar suas diferentes atividades biológicas. // Apoio Financeiro: CNPq, FAPESP, BID e FINEP.

ANÁLISE DA INTERAÇÃO PEPTÍDEO-MEMBRANA ATRAVÉS DA FLUORESCÊNCIA DO TRIPTOFANO

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

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

A interação do hormônio estimulante do melanócito, α-MSH, (responsável pela indução de pigmentação na maioria dos vertebrados) com modelos "in vitro" de membranas (vesículas com diâmetro aproximado de 1000Å) está sendo estudada através de espectroscopia de fluorescência. As propriedades exploradas são: (1) efeitos provocados pela mudança de polaridade quando o fluoróforo passa do meio aquoso para o interior da bicamada lipídica; (2) mudança nas taxas de supressão de fluorescência do hormônio provocada por tempol (um supressor solúvel em água, mas de difícil partição em membranas); (3) variação de grau de supressão provocada por marcadores de spin localizados em diferentes posições da cadeia hidrofóbica. Foram observados, na situação (1), deslocamentos espectrais de cerca de 10 a 15nm para o azul e aumentos de rendimento quântico do espectro de fluorescência do α-MSH na presença de vesículas de DMPG (dimiristoil fosfatidilglicerol), comparado com o espectro da solução de α-MSH em tampão Hepes (pH=7,2). Na situação (2) observou-se uma diminuição nas taxas de supressão de fluorescência do α-MSH na presença de vesículas de DMPG em relação à supressão da fluorescência do α-MSH em tampão. Estes resultados evidenciam a penetração do hormônio na membrana das vesículas. Na etapa (3) espera-se obter uma indicação da posição aproximada do aminoácido fluorescente do α-MSH (Tryptofano) dentro da membrana, através de diferentes graus de supressão de fluorescência pelos marcadores de spin ligados em diversas posições da cadeia hidrocarbônica. Apoio financeiro: CNPq, FAPESP e CAPES

Fotodissociação à baixa temperatura de nitrosil hemoglobina (HbNO) desnaturada

WAJNBERG, E.; ALVES, ODIVALDO C.
CBPF

Devido a sua sensibilidade à mudanças na vizinhança da heme, nitrosil hemoglobina é estudada por EPR como um modelo paramagnético para o complexo fisiologicamente importante oxihemoglobina.

Estudos de EPR à baixas temperaturas de HbNO desnaturada termicamente são realizados visando uma maior compreensão da estrutura dinâmica e sua relação com a função da proteína. À 80 K os espectros apresentam duas fases com tempo de transição bem definidos, e indicam que as mudanças conformacionais estão relacionadas com mudanças no equilíbrio entre Fe penta e hexacoordenado.

Fotólise de HbNO desnaturada termicamente é estudada por EPR à temperaturas de 5K a 20K, durante e após iluminação contínua com uma lâmpada uv de 1000 W, seguindo a intensidade do sinal.

As curvas de cinética do sinal do NO não são exponenciais como anteriormente observado em trabalhos com hemoproteínas. Observamos que, ao contrário de amostras nativas em solução, a recuperação do sinal de EPR é completa na proteína desnaturada.

Esses resultados fortalecem a relevância dos aspectos dinâmicos da estrutura proteica para as funções fisiológicas.

O PAPEL DAS MELANINAS EM SISTEMAS SUBMETIDOS À RADIAÇÃO.

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

Foram investigados os efeitos da radiação UV e X em sistemas contendo melanina, do ponto de vista de suas propriedades óticas. Procurou-se interpretar os resultados obtidos de acordo com os mecanismos moleculares de ação das melaninas, relacionados à uma possível ação protetora desses biopolímeros. Para tanto, foram irradiados sistemas proteína-melanina, constituídos por soluções de albumina bovina (BSA) com concentrações em massa crescentes de melanina de L-DOPA auto-oxidada e melanina natural extraída de olho de boi. As irradiações foram feitas com lâmpada UV e radiação X de baixa energia. Os efeitos das irradiações foram monitorados a partir das alterações nos espectros de absorção ótica e de fluorescência estática das amostras. A espectroscopia fluorescente é particularmente interessante, já que a melanina age como agente supressor da fluorescência da BSA. Foi verificada a relação dose-efeito e monitorada a variação do sinal num intervalo de tempo longo após as irradiações. Os resultados indicam que a radiação UV, embora diminua o "quantum yield" fluorescente da BSA, não altera a dissipação melanina-proteína. Ao contrário, a melanina parece exercer ação protetora quanto aos efeitos da irradiação X.

ATIVIDADE DA ÁGUA NA INTERAÇÃO DE MELANOTROPINAS COM MEMBRANAS-MODELO.

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

O hormônio melanócito estimulante (α -MSH), como diversos hormônios peptídeos, tem sua atividade biológica modulada pela interação com a fase lipídica que compõe a membrana celular. Verifica-se, através do estudo de fluorescência do resíduo triptofano, que o α -MSH interage com vesículas de lipídios carregados negativamente, passando do meio aquoso para a fase apolar da bicamada. Esse fenômeno tem uma componente de interação eletrostática que permite a acumulação do peptídeo na superfície da vesícula e uma componente de efeito hidrofóbico através do qual o peptídeo passa para a fase lipídica. Investigamos, neste processo, o papel das moléculas de água que compõem a camada de solvatação em torno do peptídeo. A interação entre o hormônio e as vesículas é estudada através da fluorescência do triptofano em soluções nas quais varia-se a atividade da água. Essa variação é feita pela adição de um soluto neutro, como glicose e polietilenoglicol, que não interage com o hormônio nem com as vesículas. Acompanhando a dependência das constantes de ligação hormônio-peptídeo em função da atividade da água, podemos avaliar o papel das forças de hidratação nessa interação.

Apoio Financeiro: CAPES, CNPq

Física Médica e de Radiações (BIO) – 20/05/93

Efeitos biológicos da radiofrequência (rf) no tecido epitelial da planta do pé de fetos de rato

DURAN, J. E. R.

Faculdade de Filosofia Ciências e Letras de Ribeirão Preto
- Universidade de São Paulo

ABUD, S. A. T.

Faculdade de Odontologia de Lins - São Paulo

STIPP, A. C. M.

Faculdade de Odontologia de Bauru - Universidade de São Paulo

Foram estudadas morfológica e morfometricamente amostras dos epitélios da planta do pé em fetos de ratos, cujas mães foram submetidas à radiação de rf de aproximadamente 20 MHz de frequência. A irradiação foi feita em um compartimento especialmente

construído para animais de porte pequeno. Este compartimento é parte de uma montagem que simula o sistema de irradiação utilizados nos tomógrafos de NMR. As fêmeas foram irradiadas durante 10 minutos, desde o primeiro até o vigésimo dia de gestação. A potência média eletromagnética aplicada às ratas prenhas foi de 7,4 mW aproximadamente, o que implica que a energia média absorvida pelo animal é da ordem de 1,06 cal. A razão de absorção específica (SAR) ou seja, a quantidade de energia por unidade de tempo depositada por unidade de massa do animal, foi de 30 mW/Kg. As comparações estatísticas dos resultados dos grupos tratados e controle, mostrou que a camada basal do epitélio da planta do pé, apresenta uma diminuição na espessura e na densidade de volume no grupo submetido ao tratamento. Este efeito biológico muito provavelmente é devido a uma mudança na morfologia das células desta camada como consequência do efeito dos campos eletromagnéticos nesta camada celular.

ESTUDO HISTOLÓGICO DO EFEITO DA APLICAÇÃO DE ULTRA-SOM À NÍVEIS HIPERTÉRMICOS EM FÍGADO ANIMAL IN-VITRU.

PELATTI, I.; PERIOTTO, R.; TEIXEIRA, C.; VERANI, N. F.; CASTRO, E. P. DE
Universidade Federal de São Carlos

A Hipertermia nesta última década, tem evoluído como modalidade de terapia de câncer, da mesma forma que a radioterapia evoluiu há 30-40 anos atrás. Hipertermia Localizada (aquecimento local do tumor entre 42,5°C a 43,0°C) possui efeitos tumorocidas em tumores sólidos. ^a. O Ultra-Som focalizado, tem mostrado ser uma excelente fonte para produção de hipertermia localizada, não-invasiva, e não apresentando efeitos colaterais significativos. Foi desenvolvido no laboratório de Ultra-som do DF-UFSCar, a instrumentação mínima necessária para a implantação da técnica de produção de hipertermia localizada com ultra-som; o que já foi apresentado em ENFMC anteriores. Esta técnica está sendo testada em água e fígado animal in-vitru. Estudos visando avaliar o quanto conseguimos controlar a extensão do campo ultra-sônico produzido pelos cabeçotes focalizadores estão sendo realizados. Os efeitos a níveis histológicos^b, produzidos em fígado animal in-vitru, pela aplicação de diferentes intensidades de Ultra-som e diferentes tempos de exposição estão sendo avaliados em conjunto com o Laboratório de Hidrobiologia-UFSCar. Os resultados desses estudos deverão ser apresentados no Encontro. Apoio FAPESP, CNPq, MIT(USA).

^aP.P. Lele, J. Goddard and M. Blanter., 73rd Scientific Assembly and Annual Meeting of The Radiological Society of North America. (1987)

^bF. Kristian et al. Cancer Research, 39, no 6, (1979)

SÍTIOS DE CO₂ EM HIDROXIAPATITAS DE ESMALTE DENTÁRIO ESTUDADAS POR ENDOR E RESSONANCIA TRIPLA GERAL

VUGMAN, N. V.

Instituto de Física - Universidade Federal do Rio de Janeiro

ROSSI, A. M.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

RIGBY, S. E. J.

Biology Department - University College London

As espécies paramagnéticas presentes em bioapatitas de tecido calcificado irradiado tem sido atribuídas a O⁻, CO₃⁻³ e ou CO. Existem controvérsias na literatura sobre a formação e localização das duas últimas espécies na estrutura da hidroxiapatita (1,2). Um maior conhecimento sobre estes radicais pode levar a um melhor entendimento sobre o papel que os grupos carbonato desempenham nos processos de descalcificação. Recentemente mostramos (3) que as espécies paramagnéticas predominantes devem ser atribuídas a grupos CO₂ girando ao redor de seu eixo principal de simetria, ou imobilizados na estrutura da bioapatita. Neste trabalho utilizamos as espectroscopias ENDOR e General Triple Resonance para estudar esmalte dentário fóssil no intervalo de temperatura 10 - 90K, a 9 GHz. Os resultados, que indicam a presença de tr es protons não equivalentes localizados respectivamente a 4.44Å, 4.62Å e 6.56Å do CO₂ paramagnético, sugerem fortemente que os centros paramagnéticos ocupam sítios de hidroxilas no eixo c dos cristais de bioapatita.

(1) Y. Doi, T. Aoba, M. Okasaki, J. Takaahashi and Y. Moriwaki, *Calcif. Tissue Inter.* 28, 107 (1979).

(2) H. J. Tochon-Danguy, M. Geoffroy and C. A. Baud, *Archives of Oral Biology* 25, 357 (1980).

(3) A. M. Rossi, N. M. Pinhal and N. V. Vugman, *Bull. Res. Mag.* in press.

UTILIZAÇÃO DE SQUIDS EM MAGNETOCARDIOGRAFIA: ESTUDO DE PACIENTES COM BLOQUEIO DE RAMO DIREITO DE DIFERENTES ORIGENS

BAFFA FILHO, O.; SOUSA, P. L. DE

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

VERZOLA, R. M. M.

Departamento de Ciências Fisiológicas-UFSCAR

WAKAI, R. T.

Department of Medical Physics, University of Wisconsin-Madison

A utilização de Dispositivos Supercondutores de Interferência Quântica (SQUIDS) para a medida de campos magnéticos de origem biológica tem possibilitado uma nova fronteira da pesquisa interdisciplinar envolvendo a física e as ciências biológicas denominada Biomagnetismo.

O magnetocardiograma (MCG), i. e., a medida do campo magnético produzido pelo coração com intensidades da ordem de pT, tem sido proposto para elucidar certas patologias associadas ao processo de despolarização deste órgão eletricamente excitável. A análise destes sinais revela, em alguns casos, detalhes que o eletrocardiograma não consegue mostrar devido à influência das correntes de volume condutor.

Utilizando uma grade padrão de 36 posições mediu-se o campo magnético normal ao tórax, com um gradiômetro de segunda ordem acoplado a um SQUID-*rf*.

Neste estudo 12 sujeitos normais e patológicos, portadores de anomalias de condução da corrente de despolarização, conhecida como bloqueio de ramo direito (BRD), foram investigados. O grupo patológico incluiu sujeitos com BRD devido à doença de Chagas e outras origens. A forma da onda de despolarização foi analisada em diferentes posições da grade de medida. Foi possível construir um índice envolvendo as amplitudes do sinal do MCG do complexo QRS em diferentes posições o que permite discriminar os processos de despolarização normais dos patológicos.

Apoio financeiro CNPq, FAPESP, CAPES e TWAS

MEDIDA DA MAGNETIZAÇÃO REMANENTE DE UM ALIMENTO TESTE PARA O ESTUDO DA DINÂMICA GÁSTRICA.

MIRANDA, J. R.

IBC-Dep. Biofísica-UNESP-Botucatu

BAFFA FILHO, O.; SOUSA, P. L. DE

FFCLRP-Dep. Física-USP

OLIVEIRA, R. B.

FMRP-USP

Traçadores magnéticos (TM) podem ser usados para monitorar funções de certos órgãos humanos e assim obter informações não apenas sobre a quantidade e localização, como também do grau de desordem destes TM.

Dentre as várias atividades do estômago está aquela de misturar o alimento ao suco gástrico para possibilitar uma melhor absorção pelo intestino.

Não existem registros na literatura de estudos desta função, pois em estudos anteriores de motilidade gástrica empregaram-se elementos radioativos e outros marcadores e/ou técnicas que não fornecem informações sobre o grau de ordenamento.

Através da marcação com pó de ferrita (TM) do alimento teste a ser ingerido e do monitoramento do campo magnético devido à magnetização remanente com o tempo, $M(t)$, realizado com um sensor do tipo magnetômetro de fluxo saturado, "fluxgate", podem-se obter informações sobre a randomização das pequenas partículas previamente magnetizadas com um campo

magnético externo de 13mT.

Estudos "in vivo" foram realizados com 5 voluntários nos quais mediu-se $M(t)$ sobre o estômago, obtendo um padrão de campo magnético consistente. Este traçado de $M(t)$ revela uma frequência associada à respiração superposta a um decaimento contínuo que está associado à desmagnetização.

A curva de decaimento de $M(t)$ permite inferir um tempo de mistura e assim, modelos para este processo podem ser propostos.

Apoio financeiro: CNPq, CAPES, FAPESP e TWAS.

Físico-Química de Macromoléculas (BIO) - 21/05/93

Separação de Biomoléculas por Eletroforese Capilar e Detecção por Fluorescência Induzida a Laser de N_2 .

KIST, T. B. L.; GRIENEISEN, H. H.

Instituto de Física - UFRGS

TERMIGNONI, C.

Centro de Biotecnologia - UFRGS

A eletrosmose em capilares finos apresenta, em certas condições, um fluxo laminar e um perfil de velocidade constante em praticamente toda sua seção transversal. O campo elétrico aplicado que promove a eletrosmose, ocasiona também a eletroforese das moléculas introduzidas na coluna. Desta forma, várias zonas surgem separadas umas das outras, e cuja separação da zona original depende principalmente das cargas médias e do volume hidrodinâmico das moléculas. Este método de separação, conhecido como eletroforese capilar e introduzido^a no início da década passada, apresenta muito bom desempenho na separação de moléculas e macromoléculas, principalmente de origem biológica. A nossa colaboração no desenvolvimento desta técnica foi a de implementar um sistema de detecção com um laser pulsado. Para tanto desenvolvemos um protótipo com as seguintes características: Um capilar de sílica fundida com 50 μ m de diâmetro interno e 0,6m de comprimento é preenchido com uma solução de $Na_2B_4O_7$ 20mM em H_2O e CH_3OH (15% V/V). Uma tensão de 18000 V dc é aplicada entre os extremos da coluna. O laser de N_2 opera em 337nm, com energia de $\sim 50\mu$ J por pulso e 10Hz de frequência. Como resultado obtivemos a separação de 14 aminoácidos e os peptídeos bradiginina, lisil-bradiginina e metionil-lisil-bradiginina. Serotonina e melatonina também foram separados entre si. Além da separação, o limite de detecção em concentração de 6nM para o aminoácido serina, com o marcador fluorogênico ortoaldialdeído, foi alcançado. Que para o volume injetado de 7nl corresponde a 42 attomoles (10^{-18} M). E em condições otimizadas o limite de

detecção para o neurotransmissor serotonina é de 150 attomoles.

^aJ.W.Jorgenson and K.D.Lukacs; *Analytical Chemistry*, 53, 1298(1981).

ELECTRON TRANSFER PROCESS BY PHOTOTHERMAL TECHNIQUE

CORNÉLIO, M. L.

IBILCE-DEPT-Física-UNESP-São José do Rio Preto

SANCHES, R.

DFCM-IFQSC-USP

A recent spectroscopic technique is used for monitoring nonradiative deexcitation process that occurs in solid samples, following their excitation by the absorption of photons. In this technique, called photoacoustic spectroscopy (PAS), the modulated (chopped) monochromatic beam of light is incident upon the sample material enclosed in a cell of constant volume. If the sample absorbs at the wavelength of incident radiation, on subsequent deexcitation, the absorbed energy may appear as heat and cause a periodic pressure variation in the gas surrounding the sample. This pressure variation occurs at the intensity modulation frequency and is detected by sensitive microphone transducer. The behavior of PAS signal is modified when electron donors(D) molecules (Octa-Ethyl-Porphyrin) are in presence of electron acceptors(A) (2,3-Dichloro-5,6-Dicyano-1,4-Benzoquinone). Both molecules are deposited in a rigid polymer matrix (PMMA), the donor concentration is kept constant while acceptor one is increased. This increasing promotes changing in the amplitude, phase and relaxation time of the PAS signal in a spectral region where photon absorption is due to the donor molecule ($\lambda_D = 620$ nm). Considering that in such particular region the heat generation is due to the donor molecule, no changing should be expected. Then the variation in the amplitude and phase indicate that a photoinduced electron transfer process is taking place. Evidences of fluorescence quenching in such system reinforce these results.

ADSORÇÃO DE 5-AMP E SÍNTESE NÃO ENZIMÁTICA DE 5-ADP EM PRECIPITADOS DE FOSFATO E PIROFOSFATO DE CÁLCIO

TESSIS, A. C. S. DA C.

Departamento de Bioquímica Médica/Instituto de Ciências Biomédicas/UFRJ

BARROS, F. DE S.; AMORIM, H. S. DE

Departamento de Física dos Sólidos/Instituto de Física/UFRJ

SOUZA, M. F. D.

Instituto de Biofísica Carlos Chagas Filho/UFRJ

Foi estudada a formação não enzimática de 5-ADP a partir de reações de fosforilação de 5-AMP na pre-

sença de superfícies de fosfato e pirofosfato de cálcio. Esta reação serve como modelo para o estudo de catálise heterogênea de transfosforilações em condições pré-bióticas. Os experimentos foram realizados tanto em meio completamente aquoso, como em meio contendo Me₂SO, para simular períodos de secagem dos ambientes aquáticos primitivos. A adsorção de 5-AMP nas superfícies minerais é o primeiro passo para reação de fosforilação. Foi observado que o nucleotídeo se adsorve em precipitados de fosfato e pirofosfato de cálcio de acordo com uma isoterma de Langmuir. Na presença de Me₂SO 60% a síntese de 5-ADP aumenta de um fator de 3 a 6 vezes para as superfícies de fosfato e pirofosfato, respectivamente, seguindo uma cinética de primeira ordem. As análises das estruturas dos precipitados por métodos de difração de elétrons e de raio-X mostraram mudanças no grau de cristalinidade dependentes do tempo de precipitação das amostras e da composição do meio (na presença ou não de Me₂SO). Essas mudanças seriam responsáveis pela modulação da quantidade de nucleotídeos adsorvidos na superfície das matrizes sólidas e da atividade catalítica dos precipitados.

INCREASED INTERACTION OF ACTINOMYCIN D TO LINEAR AND SUPERCOILED DNA

COVISSI, U. D. S.; DONELLI, S. R.; RUGGIERO NETO, J.; COLOMBO, M. F.

Depto de Física - UNESP São José do Rio Preto.

Intercalation of actinomycin D (Act D) to linear and closed duplex circular DNA (cd-DNA), has been studied by spectrophotometric titration and gel electrophoresis, in the presence of different cosolvents in order to estimate the entropic contributions, due to dehydration, in the intercalative process. The apparent binding constant of Act D to both forms of DNA showed a significant increase in the presence of sugars (fructose, glucose, sucrose and sorbitol) whereas an opposite effect is observed in the presence of alcohols (methanol, ethanol, glycerol, ethylene glycol and poly ethylene glycol). In the presence of sugars, a non linear dependence of $\ln K$ vs $\ln X$ (X is the cosolvent mole fraction) was observed suggesting that these cosolvents do not bind to DNA. In the presence of alcohols, the linear dependence in these plots, indicates competitive binding of drug and cosolvent. Gel electrophoresis studies on the DNA supercoil relaxation induced by Act D intercalation on pBR322 and pUC18, have shown that for a fixed drug to DNA ratio, increasing the amount of sugar results in a proportional relaxation of negatively supercoiled DNA. These data suggest that the effect of sugars on the drug binding constant to DNA is due to an increase in the intercalation excluding the possibility of drug stacking on the surface of the DNA. The

effect of sugars on the intercalation is probably due to changes in the activity of water.

CNPq, PADCT

**BUSCA DE ESTRUTURAS
INTERMEDIÁRIAS DE HB EM SOLUÇÃO
ATRAVÉS DO ESTUDO DO EFEITO
ALOSTÉRICO DE H_2O E Cl^- SOBRE A
OXIGENAÇÃO**

COLOMBO, M. F.

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

A impressionante capacidade de autoregulação de proteínas alostéricas está inerentemente associada à diferentes formas estruturais que estas proteínas adotam durante seu funcionamento. Na Hemoglobina (Hb), somente duas estruturas quaternárias eram conhecidas até muito recentemente, as estruturas T e R correspondentes à proteína totalmente desoxigenada e oxigenada, respectivamente. Uma evidência de que estas estruturas representam estados extremos de conformação em solução foi por nós encontrada ao medirmos a variação de hidratação proteica, Δn_w , durante o processo de oxigenação [M.F.Colombo, Science, 256. 655, 1992]. No presente trabalho, a dependência de Δn_w devido a oxigenação da Hb foi medida em função da atividade de íons Cl^- . Surpreendentemente, encontramos que a variação da hidratação da Hb induzida pela ligação de quatro moléculas de O_2 depende da concentração de íons $+Cl^-$ em solução. Para $[Cl^-] < 10mM$ a afinidade da Hb por O_2 é menos sensível à variações da atividade de água e Cl que para $[Cl^-] > 10mM$. Estes resultados indicam que as conformações oxi e desoxi-Hb em solução de baixa concentração de Cl são diferentes das conformações R e T clássicas. Se este for o caso, há uma grande possibilidade de estarmos detectando pela primeira vez a estrutura de um estado intermediário da oxigenação que poderá ser comparado com as estruturas da Hb R2 e Y recentemente descobertas.

**DIFERENÇAS ESTRUTURAIS ENTRE OS
PERICARPOS DE MILHO DE PIPOCA E
COMUM QUE FAZEM COM QUE O MILHO
DE PIPOCA ESTOURE.**

ZERBETTO, M.; PEREIRA, A. C.; VARGAS, H.

Instituto de Física-UNICAMP

MIRANDA, L. C. M.

Laboratório Associado de Sensores e Materiais-INPE

SILVA, W. J. DA; VIDAL, B. C.; MARTINS, M. E. Q.

Instituto de Biologia-UNICAMP

A condutividade térmica (k), "obtida via técnica de elevação de temperatura por iluminação contínua", e a difusividade térmica (α), "obtida pelo Método dos Dois Feixes", no pericarpo de milho de pipoca (casca) foram respectivamente 2.0 e 2.9 vezes maior que aque-

las encontradas no pericarpo de milho comum. Estes dados estão altamente correlacionados ($r = 0.94$) com a habilidade de estouro da pipoca. A rigidez do pericarpo foi 4.0 vezes maior no milho de pipoca. A Birrefringência foi 50% maior no pericarpo de milho de pipoca devido ao alto grau de empacotamento das fibras encontrado neste tecido. As propriedades térmica e mecânica do pericarpo mostram que este age como uma cápsula no modelo de vaso de pressão produzindo o estouro. Um balanço melhor entre as propriedades do pericarpo "qualidade do amido e tamanho do gr ao produzido como consequência da seleção feita pelo homem levou o milho comum a se transformar em milho de pipoca.

*Modelos Teóricos e Métodos Físicos
Aplicados Sistemas de Origem
Biológica (BIO) - 21/05/93*

**"FOLDING" DE PROTEÍNA NUMA REDE
CÚBICA: ALGORITMO PARA
ENUMERAÇÃO DE CONFORMAÇÕES
"CSA" (COMPACT SELF-AVOIDING
CONFORMATIONS)**

REIS, L. M. DOS

F.F.C.L.R.P.-USP-Depto de Física

CALIRI, A.

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

O modelo para a proteína consiste de uma cadeia de 27 monômeros, confinados em sítios de uma rede cúbica. Todas as conformações compactas (CSA) foram enumeradas pelo algoritmo que se segue. (1) Introduzir conectividade na rede: $C(M, N) = 1$ se M e N são primeiros vizinhos e $C(M, N) = 0$ caso contrário; (2) a partir de uma posição inicial, vamos passo a passo pelos monômeros seguintes, em direções permitidas pela conectividade da rede; (3) cada sítio é visitado somente uma vez; se encontramos um "dead end" voltamos para traz e tentamos outro caminho; (4) repetir sucessivamente até encontrar conformação CSA, onde todos os 27 monômeros estão posicionados na rede; (5) procurar nova conformação, isto é, voltamos um passo atrás e tentamos seguir adiante por outro caminho; não obtendo sucesso voltamos mais passos e tentamos outra direção, até chegar em uma nova conformação CSA; (6) repetir este procedimento até encontrar todas as 103.346 conformações CSA simetricamente independentes. Em seguida aplicando as 33 simetrias do cubo obtemos as demais conformações, perfazendo um total de 3.410.418. As seqüências de aminoácidos são representadas por um conjunto de interações randômicas (Matriz 27×27), e foram gerados 30 conjuntos de tais

interações e a energia para cada conformação *CSA* foi calculada (para cada conjunto, a energia das conformações *CSA* se distribui na forma de uma gaussiana). Através de Simulação Monte Carlo, discutimos características das seqüências bem sucedidas com relação ao "folding". A maior parte das seqüências não alcança a estabilidade conformacional requerida no estado "folded".

TUNELAMENTO DE ELÉTRON EM ESTRUTURAS SECUNDÁRIAS MODELOS DE PROTEÍNA.

ANDRADE, P. C. P. DE
UFMT

ONUICHIC, J. N.
Univ. of Calif. at San Diego

Utilizamos uma hamiltoniana "tight-binding" e o método da equação de Dyson ("The Stepwise Green's Function Method"¹) para computar elementos de matriz de tunelamento entre sítios doador e aceitador de elétron em sistemas modelo. O método é exato e computacionalmente tratável. Usamos uma representação simples de diferentes estruturas secundárias, (hélices- α , folhas- β) que aparecem com padrões distintos de conectividade em proteínas, e calculamos o elemento de matriz da função de Green de interesse. Os resultados estão de acordo com resultados antigos, onde notamos que o elemento de matriz de tunelamento em proteína pode ser dominado por poucos ou muitos "pathways" de tunelamento dependendo da estrutura secundária e terciária da proteína. Segmentos de hélice- α apresentam poucos caminhos dominantes enquanto que folhas- β podem ter muitos caminhos. Ambos os casos envolvem ligações de hidrogênio. O efeito da eliminação de ligações de hidrogênio em segmentos de hélice- α acentua a importância de poucos "pathways" (o acoplamento eletrônico diminui em 1 ou 2 ordens de grandeza) enquanto que para folhas- β , em alguns casos, pode causar o aumento do acoplamento em 2 ou 3 ordens de grandeza, evidenciando a presença de muitos caminhos de tunelamento com acentuada interferência destrutiva entre eles. * J.Chem.Phys.95 (2), 15 July 1991 **Apoio CNPq

RESPOSTA DE UM NEURONIO REGIDO PELAS EQUAÇÕES DE HODGKIN-HUXLEY SOB ESTIMULOS REGULARES, CAOTICOS E ALEATORIOS.

BALDO, M. V. C.

Instituto de Ciências Biomédicas I - Universidade de São Paulo

FIEDLER-FERRARA, N.; OIWA, N. N.
Instituto de Física - Universidade de São Paulo

Nosso objetivo foi estudar a relação entre o padrão de resposta, obtida por simulação, de um neurônio des-

crito pelo sistema de equações diferenciais proposto por Hodgkin e Huxley, e o padrão que caracteriza a estimulação. A idéia central foi verificar se a seqüência de intervalos temporais entre potenciais de ação sucessivos guarda alguma relação com as características do estímulo, para o qual utilizamos três padrões básicos: regular, gerado por uma oscilação senoidal; caótico, obtido a partir do mapa logístico e do atrator de Lorenz; e aleatório, obtido pela geração de valores randômicos. Os padrões de corrente, oscilando sobre uma corrente basal de $15 \mu A$, tiveram amplitudes de 1, 10, 33, 100 e 167 por cento dessa corrente basal. O sistema de equações foi integrado numericamente pelo método de Runge-Kutta de 4.a ordem, e a resposta analisada por meio do perfil de autocorrelação, de análise espectral, e do algoritmo proposto por Sugihara e May no qual se utiliza a primeira metade de uma série temporal para se prever a segunda. A resposta produzida pelo padrão senoidal, para todas amplitudes, caracterizou-se por um perfil periódico de autocorrelação; o espectro mostrou picos bem definidos e a correlação entre a metade prevista e observada da série foi se aproximando da unidade com o aumento da dimensão de imersão, independentemente do tempo de previsão. No entanto, nenhuma distinção observou-se entre as respostas obtidas dos padrões caótico e aleatório. Em todas, o espectro se mostrou contínuo, e tanto o coeficiente de autocorrelação quanto a correlação entre metades previstas e observadas (que poderia discriminar os vários padrões) não se desviaram significativamente do zero. A principal conclusão é que a dinâmica neuronal não preserva obrigatoriamente as mesmas características do padrão de estímulo, podendo destruir ou ao menos ocultar aspectos básicos desse padrão.

ESPECTRO VIBRACIONAL LONGITUDINAL DA α -HELIX.

FORNÉS, J. A.
UFG

Macromoléculas nativas de proteínas e suas análogas sintéticas têm a fórmula geral $(-CO - CHR - NH-)_n$ onde R são os resíduos de amino-ácidos. A estrutura secundária destes polipeptídeos, estabilizados por ligações de hidrogênio intramoleculares, é a bem conhecida hélice α de Pauling and Corey. A determinação do espectro vibracional da hélice α é um problema de interesse corrente na biofísica, basicamente porque as proteínas com esta estrutura secundária estão presentes numa variedade de sistemas biológicos macromoleculares. Não tem sido possível decompor o espectro medido de uma molécula de proteína em suas contribuições dinâmicas atômicas individuais. Também, a incerteza dos dados experimentais é aproximadamente 15%. Porém várias técnicas teóricas têm contribuído para incrementar o entendimento da dinâmica interna das proteínas:

análise de modos normais (normal mode analysis) e simulações da dinâmica molecular (molecular dynamic simulations). Nestas técnicas as equações clássicas do movimento dos átomos são resolvidas simultaneamente, todos os átomos e graus de liberdade da molécula são tratados explicitamente e alguns modos coletivos permanecem ocultos. Neste trabalho os modos coletivos de baixa frequência das vibrações das pontes de hidrogênio na hélice α são preditos usando o método de Dean, que considera as diferentes massas dos amino-ácidos envolvidos. O intervalo de frequência se estende até $\lambda = 0.01$ cm ($f = 1.88 \times 10^{12} s^{-1}$).

DESENVOLVIMENTO DE UM "SOFTWARE" PARA SIMULAÇÕES DE MECÂNICA E DINÂMICA MOLECULAR DE INTERFACES BIOLÓGICAS.

MUNDIN, K. C.; BISCH, P. M.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CNPq

PASCUTTI, P. G.

Instituto de Física - USP

É amplamente conhecido que a ação biológica de fármacos, hormônios e enzimas de membranas, depende essencialmente da organização molecular do meio inhomogêneo formado pela membrana celular e suas vizinhanças. As possíveis conformações espaciais destas moléculas, condicionadas pelas propriedades físico-químicas do meio, estão intimamente correlacionadas com sua atividade biológica. O desenvolvimento da modelagem de moléculas biológicas tem permitido um grande avanço na proposta de novas arquiteturas moleculares capazes de satisfazer propriedades específicas, permitindo assim, através de síntese química ou por engenharia genética, a obtenção de produtos com alta eficiência biológica. Entretanto, a maior parte dos desenvolvimentos de modelagem molecular estão restritos apenas a simulação de uma única molécula independente do meio solvente. Para evitarmos esta limitação, estamos desenvolvendo um código computacional, baseado no método de mecânica molecular, com o objetivo de simular, entre outras aplicações, a membrana biológica e a inserção, neste meio inhomogêneo, de moléculas de interesse, tais como fármacos, hormônios e proteínas de membranas. O programa atualmente é capaz de executar tanto cálculos de minimização de energia, localizando os mínimos conformacionais, como simulações de dinâmica molecular, outras facilidades estão em desenvolvimento. Existem atualmente vários programas computacionais disponíveis, tanto comerciais quanto acadêmicos, destinados a simulação de moléculas de interesse biológico, entretanto nenhum deles é suficientemente flexível e/ou facilmente adaptável ao estudo da organização molecular de interfaces biológicas.

Transporte iônico e processamento de informação num "demônio de Maxwell" biológico.

LIMA, N. F.; PROCÓPIO, J.; HENRIQUES, V. B.; ITO, A. S.

USP

O "modelo de acesso alternado" (Lauger¹) de transportador de íons através de membranas biológicas pode ser tratado como um "demônio de Maxwell" (DM), que adquire e processa informação sobre flutuações microscópicas de concentração iônica. Seu funcionamento não contraria a segunda lei da Termodinâmica, na medida em que é necessário, para sua operação cíclica, descartar a informação antiga. Esse passo, segundo a resolução recente que Bennett² e Landauer³ deram ao problema do DM, implica na redução da entropia do DM e do sistema sobre o qual ele opera, e exige por isso a participação de um corpo externo, que aumente compensatoriamente sua entropia. No presente trabalho vamos mostrar uma adaptação do modelo de acesso alternado ao esquema proposto por Bennet & Landauer, e demonstrar que a taxa de produção negativa de entropia, referente ao fluxo iônico, é em valor absoluto sempre menor que a taxa de produção positiva, necessária a que se processe o descarte de informação. Vamos ainda calcular a eficiência do transporte iônico nesse modelo e compará-la com a eficiência no modelo padrão.

(1) Phys. Rev. 67, p.1296, 1987.

(2) Sci. Am. 253 (7), p.48, 1985.

(3) Sci. Am. 257 (5), p.88, 1987.

Modelo para Transporte Ativo em Biomembranas com Formação de Dímeros e Complexos

VIEIRA, F. DE M. C.; BISCH, P. M.

CBPF

No transporte ativo a formação de dímeros entre as proteínas transportadoras e de complexos destas proteínas com outras moléculas, (ex. calmodulina), é bem conhecida, embora seu papel não seja totalmente entendido.

Baseados nos dados experimentais existentes, construímos modelos para o transporte ativo contendo dimerização e formação de complexos. O ajuste entre as curvas obtidas teoricamente e no laboratório é analisado.

O possível surgimento de oscilações temporais nos fluxos de transporte dentro do modelo é investigado. Este fenômeno vem tendo sua presença e importância cada vez mais evidenciada em sistemas biológicos, particularmente em transporte e sinalização celular.

Apresentamos resultados de simulação via automatos celulares de um modelo simplificado para transporte ativo que mostra padrões espaço-temporais de oscilações e ondas químicas. Discutimos a relação deste

modelo simplificado com as propostas de formação de dímeros acima relatada.

MODELOS DE POISSON-BOLTZMANN E DEBYE-HUECKEL PARA MICELAS ZWITTERIÔNICAS

FEITOSA, E.; AGOSTINHO NETO, A.

Departamento de Física, IBILCE-UNESP, São José do Rio Preto-SP

Micelas zwitteriônicas possuem uma estrutura aproximadamente esférica com duas superfícies carregadas, uma interior positiva e a outra exterior negativa. Utilizamos o modelo de um capacitor para calcular o potencial elétrico e a concentração eletrolítica em função da distância radial, até o raio da cela (onde o potencial e sua derivada espacial se anulam). Resolvemos numericamente a equação de Poisson-Boltzmann e comparamos os resultados com os da aproximação de Debye-Hueckel [Baptista, M.S. et al. *J. Phys. Chem.* 96 (1992) 6442]. O estudo comparativo mostra que, exceto para um pequeno intervalo para os valores de força iônica do meio, esses dois modelos diferem consideravelmente. Efeitos de íons multivalentes também são abordados, bem como os de interação específica (não-eletrostática), que permitem obter valores mais compatíveis com os esperados da densidade de cargas nas vizinhanças da micela.

Apoio Financeiro: FINEP (PADCT) e FAPESP (Projeto Temático)

DISTRIBUICAO DE CONTRAIONS EM TORNO DE UM POLIELETROLITO CILINDRICO

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

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

A distribuição de íons em torno de polieletrólitos altamente carregados, tem recebido grande atenção nos últimos anos, principalmente por ser responsável pelas propriedades coligativas apresentadas pelas soluções polieletrólíticas de diversos biopolímeros. Este interesse em parte é devido à simplicidade de aplicação da teoria de condensação de contraíons elaborada por Manning. No presente trabalho, calculamos a distribuição de contraíons em torno de um poliíon carregado imerso numa solução iônica 1:1, através do modelo celular (solução da equação de Poisson-Boltzmann) e do modelo de concentração de contraíons (Teoria de condensação de Manning). Estes resultados são apresentados na forma de gráficos de atividade aparente (γ_1) vs X , onde $\gamma_1 = C_l/C_{lt}$, e $X = C_s/C_p$, sendo C_l =concentração de íons livres; C_{lt} =concentração total de cátions monovalentes, C_s = concentração de sal suporte e C_p =concentração de grupos carregados do

poliíon. Os volumes de ocupação dos íons em torno do polieletrólito são calculados através dos dois modelos.

ESTUDO TEÓRICO SOBRE A FORMAÇÃO DE ESTRUTURAS DISSIPATIVAS EM CÉLULAS DE DIÁLISE.

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

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CNPq

COSTA, M. C. P.

Universidade Federal do Maranhão

As estruturas dissipativas em células de diálise são obtidas a partir de um processo de osmocentrifugação onde são utilizadas amostras de alta concentração de proteína em um gradiente de densidade submetidos a um campo centrífugo. Observa-se então a formação de estrias que ocupam toda a extensão da célula. Trata-se de um sistema hidrodinâmico em condições de não-equilíbrio que estamos tratando inicialmente a partir de relações lineares entre fluxos e forças termodinâmicas. Já foram obtidas equações de balanceamento da massa e energia a partir de um modelo esquemático para o sistema. No estágio atual, procuramos caracterizar a formação do gradiente de densidade supondo que corresponda a um estado estacionário, levando em conta a força externa que atua no sistema, devida ao do campo de centrifugação, a viscosidade do sistema e as diferenças de potenciais químicos verificados experimentalmente na célula de diálise.

ESPÉCIES CO₂- COM SIMETRIA ORTORROMBICA E AXIAL EM APATITAS DE ESMALTES DENTÁRIOS

OLIVEIRA, L. M. DE; ROSSI, A. M.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

VUGMAN, N. V.

Instituto de Física - Universidade Federal do Rio de Janeiro

Os espectros de RPE da parte mineral das hidroxiapatitas de esmalte dentário são constituídos, na região de $g=2$, por espécies paramagnéticas com simetria axial e ortorrômbica (1). A espécie axial é identificada como radicais CO₂- com movimento de rotação em torno do eixo c da apatita e ocupando sítios de OH- (2). Fragmentos de esmalte dentário com alto grau de cristalinidade, e amostras reduzidas a pó, foram estudadas por RPE em banda X e em banda-Q. Aquecimentos isotérmicos entre 150C e 200C revelam uma cinética de redistribuição térmica dos centros com simetria ortorrômbica nos centros paramagnéticos com simetria axial. Os resultados obtidos indicam que a espécie ortorrômbica é também um radical CO₂- situado no eixo c da apatita e imobilizado provavelmente por interações com grupos OH-.

(1) - A. M. Rossi and G. Poupeau, *Nucl. Tracks Radiat. Meas.* 17, 537 (1990)

(2) - A. M. Rossi, N. M. Pinhal and N. V. Vugman, Bull. Res. Mag. in press.

DOSIMETRIA POR RPE DE ARAGONITAS DE ORIGEM BIOLÓGICA

SCHRAMM, D. U. DA S.; SOBRAL, R. R.; ROSSI, A. M.

CBPF/CNPq

Materiais aragônicos (CaCO_3) têm sido utilizados na dosimetria por RPE de acidentes radiológicos e na datação geológica e arqueológica. Limitações na aplicação do método persistem pela falta de conhecimento sistemático dos centros paramagnéticos usados como marcadores de dose de radiação. Neste trabalho estudou-se as propriedades dosimétricas das espécies paramagnéticas criadas por radiação γ e por elétrons de 3 a 17 MeV em amostras de moluscos, corais e algas. As espécies que constituem o espectro de pó são atribuídas a radicais CO_3^- , CO_2^- e CO_2^- com simetria ortorômbica e isotrópica. Experiências de aquecimentos isotérmicos entre 150°C e 200°C indicam que as espécies CO_3^- e CO_2^- possuem estabilidade térmica para serem utilizadas na dosimetria de acidentes radiológicos. Os radicais CO_2^- possuem vidas médias variáveis de $(10^2 \text{ a } 10^6)$ anos o que permite a datação por RPE de amostras de até 105 anos. As curvas experimentais de produção dos centros paramagnéticos com a dose de radiação seguem funções exponenciais determinadas pelo modelo de Barabas et al, 1988*. Discute-se as limitações do método da aproximação linear para a obtenção da dose acumulada (DT).

*M. Barabas, A. Bach e Mangini, Nucl. Tracks Radiat. Meas. 14, Nos 1/2, PP 231 (1988).

DOSIMETRIA POR EPR DE FRUTAS TROPICAIS IRRADIADAS.

JESUS, E. F. O. DE; LOPES, R. T.

COPPE - UFRJ

ROSSI, A. M.

CBPF/CNPq

A irradiação de alimentos é um processo que vem sendo cada vez mais empregado para reduzir as perdas de estocagem e melhorar a qualidade dos alimentos. O controle de qualidade dos produtos irradiados industrialmente é um problema ainda sem solução definitiva, sendo a EPR uma das técnicas que melhor resultado tem apresentado nessa área. Nesse trabalho estuda-se a formação e a estabilidade de centros paramagnéticos criados por irradiação em frutas tropicais, sendo analisados diferentes tecidos constituintes e estabelecidos procedimentos para preparação de amostras que permitam uma dosimetria qualitativa e quantitativa. Manga, mamão, laranja e banana não irradiadas e irradiadas com doses até 10 KGy foram analisadas observando-se

sinais naturais na região de $g = 2,00$ que variam linearmente com a dose, quando as amostras não são tratadas. Amostras liofilizadas apresentam sinais que saturam na faixa de 2 KGy. A utilização dos centros paramagnéticos no controle de qualidade das frutas irradiadas é discutido.

DETECÇÃO POR RPE DE CARBONO 13 EM BIOAPATITAS

VUGMAN, N. V.; PINHAL, N. M.

Instituto de Física - Universidade Federal do Rio de Janeiro

ROSSI, A. M.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

A baixa abundância natural do carbono 13 (aproximadamente 1%) e a existência de sinais oriundos de espécies paramagnéticas orgânicas torna o seu espectro de RPE de difícil detecção nas bioapatitas. Sua observação permite diferenciar radicais CO_3^{3-} (1) de radicais CO_2^- (2) criados pelas radiações ionizantes em apatitas de tecidos calcificados. Fragmentos de esmalte dentário fóssil de mastodonte (5×10^6 anos) foram analisados por RPE em banda X (9 GHz) e em banda Q (35 GHz) nas direções principais dos tensores g . Os valores de A_{\perp} (^{13}C) e A_{paralelo} (^{13}C), 220 G e 170 G respectivamente, confirmam a presença de CO_2^- em bioapatitas como a espécie paramagnética principal criada por irradiação (3).

(1) Y. Doi, T. Aoba, M. Okasaki, J. Takaahashi and Y. Moriwaki, Calcif. Tissue Inter. 28, 107 (1979).

(2) F. J. Callens, R. M. H. Verbeek, D. E. Naessens, P. F. A. Matthys and E. R. Boesman, Calcif. Tissue Int. 44, 114 (1989).

(3) A. M. Rossi, N. M. Pinhal and N. V. Vugman, Bull. Res. Mag. in press.

DESENVOLVIMENTO DE UM BIOSUSCEPTÔMETRO AC PARA A GERAÇÃO DE IMAGENS DO TRATO GASTRO-INTESTINAL

MOREIRA, M.; BAFFA FILHO, O.

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

Um biosusceptômetro AC inicialmente desenvolvido para o estudo do esvaziamento gástrico e medidas de trânsito gastrointestinal^a está sendo aperfeiçoado para se obter imagens de marcadores ferromagnéticos (ferrita) incorporados a um alimento teste. Este sistema deverá ser constituído por um conjunto de gradiômetros de primeira ordem tanto para as bobinas de excitação como para as bobinas detectoras. Estão sendo otimizados os seguintes parâmetros: diâmetro das bobinas,

linha de base, numero de espiras. Experimentos estão sendo realizados para se verificar a validade dos modelos teóricos e para se medir a "point spread function" para o sistema e se avaliar a resolução espacial. Para se obter a imagem da região de interesse duas possibilidades estão em estudo: sistema de rastreamento de um pequeno conjunto de detectores ou arranjo multicanal completo.

Apoio financeiro CNPq, FAPESP, CAPES e TWAS

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

INFLUÊNCIAS DE DISTRIBUIÇÕES DE INTERAÇÕES RANDÔMICAS NO "FOLDING" DE PROTEÍNAS.

FARIA JUNIOR, M.

FFCLRP-USP

CALIRI, A.; SILVA, M. A. A. DA

FCFRP-USP

O modelo de Iori-Marinari-Parisi para um heteropolímero ("proteína") é descrito pela Hamiltoniana^a $H = \sum_{i=1}^N \sum_{j>i} \delta_{i,j+1} r_{i,j}^2 + \frac{R}{r_{i,j}^6} - \frac{A}{r_{i,j}} + \frac{\eta_{i,j}}{r_{i,j}}$, onde N é o número de monômeros da cadeia e i, j suas posições. A primeira parcela corresponde ao acoplamento harmônico entre os primeiros vizinhos, a segunda e terceira ao potencial Lennard-Jones usual e a quarta parcela corresponde à parte randômica da interação. O conjunto de números randômicos $\eta_{i,j}$ são sorteados a partir de uma distribuição Gaussiana e congelados para um dado sistema. Tal conjunto representa as interações complexas entre diferentes grupos de diferentes aminoácidos, efeitos do solvente, etc., que caracteriza o heteropolímero. Mostramos, efetuando simulações Monte Carlo com esse modelo, como diversas larguras de Gaussianas e conjuntos distintos de números randômicos podem afetar na dinâmica do "folding".

^aJ. Phys. A 24, 5349 (1991)

THEORETICAL AND EXPERIMENTAL RESULTS FOR THE MEAN DISTANCES BETWEEN MONOMERS AS A FUNCTION OF THEIR IONIZATION

RUGGIERO NETO, J.; CHAHINE, J.

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

Configuration of charged polysaccharides (polygalacturonic acid and chondroitin-sulfate) in solution has been studied through Monte Carlo Simulations, in order to obtain their end to end distances. The Polymers chain

with N monomers is placed in a cubic lattice and is represented by a self avoiding walk of $N-1$ bonds. The fraction of monomers ionized is varied from 0.3 to 1.0. The system reaches equilibrium by means of two kinds of movements. One of them called reptation, the polyelectrolytes advance in a random direction one lattice step. The other type of motion is called internal movement. It consists of one of two jumps of consecutive monomers to neighbors positions. After the movements the energy is computed and the new configuration is accepted according to Metropolis algorithm. The long range interactions has been described by the Debye Huckel potential. The distances between charged groups calculated from the end to end distances obtained from the simulations are in good agreement with the experimental values measured in conductimetric and potentiometric titrations.

FLUTUAÇÕES TERMODINÂMICAS EM BI-CAMADAS LIPÍDICAS COM RELEVÂNCIA A FORMAÇÃO DE POROS.

FORNÉS, J. A.

UFG

PROCÓPIO, J.

Instituto de Ciências Biológicas - USP/SP

As bi-camadas lipídicas são estruturas bi-dimensionais formadas por duas camadas de moléculas de fosfolípeos. Esta constitui uma estrutura extremamente delgada, aproximadamente 5 nanômetros de espessura. O mecanismo da estabilidade termodinâmica deste sistema num meio aquoso é complexo. Qualitativamente a estabilidade desta estrutura pode ser descrita em termos de duas forças opostas: As forças atrativas de Van der Waals e as forças repulsivas estéricas. Estas forças entram em jogo quando duas cadeias de hidrocarbonetos interagem numa espessura menor que 100 Å. De modo que as bi-camadas lipídicas possam conduzir pequenos íons são requeridos caminhos permeáveis especiais. Estas estruturas têm sido descritas como canais ou portadores. Apesar deste requisito, tem sido extensivamente reportado que bi-camadas nuas, exceto em condições bastante restritas, podem conduzir correntes elétricas na forma de saltos discretos de condutância. A condutividade elétrica de bi-camadas nuas e de membranas naturais tem sido geralmente explicada usando o conceito de poro lipídico. Neste trabalho é analisada a possibilidade que flutuações termodinâmicas de parâmetros físicos da membrana celular dêem lugar a defeitos na densidade molecular da mesma suficientemente grande para produzir passagem de íons. Flutuações no número N de moléculas de fosfolípeos ocorrem como consequência da energia térmica do sistema. São analisadas as flutuações globais do número de moléculas do sistema como também localmente em uma determinada área contendo um número N_0 de moléculas.

O FITOTRÔN

PENA, A. F. V.

FCT - UNESP - PRESIDENTE PRUDENTE

A Física faz parte desta pesquisa para enfrentar junto com os especialistas em solo o desafio de criar uma agricultura moderna. Para estudar uma cultivo, é necessário que os parâmetros do solo sejam mantidos estáveis e os resultados das medições físicas sejam adequadamente interpretadas. O Fitotrôn consiste numa

área de solo previamente caracterizado onde são colocados diferentes sensores e atuadores, controlados por um computador. Este monitora e mantém estáveis alguns parâmetros físicos e químicos mais importantes para o estudo de um cultivo. Estudos na temperatura e umidade do solo são mostrados assim como comparações com os dados obtidos com outros tipos de sensores

CRESCIMENTO, CARACTERIZAÇÃO E PROPRIEDADES DOS MATERIAIS

Crescimento e Caracterização (CCP) - 19/05/93

PREPARAÇÃO DE MONOCRISTAIS FOTORREFRATIVOS $Bi_{12}SiO_{20}$ E $Bi_{12}TiO_{20}$
CARVALHO, J. F.; PROKOFIEV*, V. V.; GALLO, N. J. H.; HERNANDES, A. C.

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

UNICAMP/IFGW/Laboratório de Óptica.

Os monocristais óxidos $Bi_{12}SiO_{20}$ (BSO) E $Bi_{12}TiO_{20}$ (BTO) são materiais de estrutura sillenita e exibem propriedades muito similares e de grande interesse científico e tecnológico. Eles são piezoelétricos, eletro e elastoópticos, ópticamente ativos e fotocondutivos. Entre as notáveis propriedades destes materiais, tem proeminência o efeito fotorrefrativo que os tornam excelentes para aplicações em gravações holográficas. Monocristais de BSO e BTO foram preparados no Grupo de Crescimento de Cristais do DFCM, IFQSC/USP, em equipamento especificamente montado para tal fim. Cristais de BSO foram crescidos pelo método de Czochralski a partir da composição estequiométrica $6Bi_2O_3 : SiO_2$. De acordo com o diagrama de fase do sistema binário $Bi_2O_3 - TiO_2$, o titanato de bismuto funde-se incongruentemente a $873^\circ C$, por esta razão os cristais de BTO foram crescidos por soluções a alta temperatura contendo excesso de óxido de bismuto. A velocidade de puxamento usada para o BSO esteve entre 2 e 4 mm/h, enquanto para o BTO ela variou de 0.3 a 0.8 mm/h. A velocidade de rotação em ambos os casos foi mantida em torno de 20 rpm. Cristais de boa qualidade óptica e com a composição estequiométrica desejada foram obtidos na direção de crescimento {100}. Neste trabalho apresentaremos os detalhes da tecnologia de crescimento e os resultados de investigações da composição química dos cristais por "electron-probe microanalysis". *Endereço atual: Universidade de Joensuu, Vaisala Laboratory, Physics Department, P.O.Box 111, SF-80101, Joensuu, Finland.

PURIFICAÇÃO DO ÍNDIO DE GRAU ELETRÔNICO A PARTIR DE SOLUÇÕES DE InP, InGaAs, InGaAsP E SUA REUTILIZAÇÃO EM CRESCIMENTO EPITAXIAL.

GONÇALVES, J. L.; CLERICI, J. H.

LPD/IFGW - Unicamp

TATSCH, P. J.

LED/FEE - Unicamp

O índio de grau eletrônico é usado como solvente nas soluções para crescimento de ligas de InP nos reato-

res de LPE (Liquid Phase Epitaxy). Normalmente as soluções são utilizadas uma única vez. Neste trabalho desenvolvemos um método de purificação dessas soluções e sua reutilização em crescimentos epitaxiais. O método consiste numa limpeza inicial com solventes orgânicos, aquecimento à temperatura de $550^\circ C$ e à pressão de $1,0 \times 10^{-4}$ Torr durante 3 horas e finalmente a cristalização a partir da fase líquida pela técnica de Czochralski. Crescimentos de camadas epitaxiais de InGaAs sobre substrato de InP feitos com índio purificado por este método apresentaram morfologia, características elétricas e de transporte idênticas às do índio de grau eletrônico importado.

PUXAMENTO DE FIBRAS MONOCRISTALINAS ÓXIDAS FOTORREFRATIVAS PELO MÉTODO LHPG.

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

Universidade de São Paulo, Instituto de Física e Química de São Carlos - DFCM, Grupo de Crescimento de Cristais.

PROKOFIEV, V. V.; KAMSHILIN, A. A.;

JÄÄSKELAINEN, T.

University of Joensuu, Department of Physics, Joensuu-Finland

Materiais fotorrefrativos têm sido amplamente estudados devido as suas interessantes características para armazenamento de dados, interconexões ópticas, espelhos conjugadores de fase, holografia interferométrica, etc. Recentemente, estudos sobre fibras ópticas monocristalinas de materiais fotorrefrativos, preparadas a partir de $BaTiO_3$, $MgO : LiNbO_3$, $Fe : LiNbO_3$, $Sr_{0.61}Ba_{0.39}Nb_2O_6$ (SBN61), $Ce : SBN61$ e $Bi_{12}SiO_3$ (BSO) também tem sido publicados. Neste trabalho, através da técnica de fusão a laser (LHPG), preparamos fibras monocristalinas de BSO e $Bi_{12}TiO_{20}$ (BTO). Basicamente esta técnica consiste em incidir sobre um nutriente (matéria prima) um feixe de laser de CO_2 (contínuo, com potência nominal máxima de 50 W) altamente focalizado com a finalidade de realizar a fusão controlada do material. Após a fusão do nutriente faz-se a "germinação da semente" num processo similar ao crescimento pela técnica de Czochralski. Entre outras coisas, a versatilidade do método permite crescer fibras com orientações pré-definidas, bastando para isto ter uma semente com a orientação desejada. Após a germinação, o crescimento propriamente dito processa-se pela translação ascendente e simultânea da semente e do nutriente, com velocidades diferentes ou não, e com a zona de fusão posicionada e fixa entre eles. Como caracterização foram realizadas medidas com Microscopia

Eletrônica, Difratomia de Raios X e verificação do comportamento fotorrefrativo através da técnica "two wave-mixing".

CARACTERIZAÇÃO DE FILMES DE PVDF UTILIZANDO GRADIENTES DE TEMPERATURA

ALVES, N.; PENA, A. F. V.

FCT - UNESP - PRESIDENTE PRUDENTE

O poli(fluoreto de vinilideno) (PVDF) é um polímero semicristalino que apresenta propriedades ferroelétricas, com figuras de méritos comparáveis aos cristais e cerâmicas. Para diversas aplicações estes materiais são muito vantajoso devido sua baixa densidade, alta resistência mecânica e maleabilidade. Outro aspecto importante para a construção de dispositivo é a facilidade com que os polímeros podem ser moldados. De um modo geral as aplicações mais importantes são os transdutores piroelétricos, eletro-mecânicos (por ex. alto falantes) e mecânico-elétricos (por ex. microfones). Filmes de PVDF, na fase β (ferroelétrica), devidamente polarizados, foram submetidos a gradientes de temperaturas definidos, com o objetivo de estudar o perfil de respostas às variações de temperaturas, visando aplicações como sensores. Para determinar as variações na carga, dois contatos metálicos de alumínio são metalizados em ambas as faces do filme. A variação da carga foi transformada em voltagem e medida utilizando dois sistemas: um milivoltímetro e uma placa de aquisição de dados que inclui um conversor AD de 12 bits, que permitiu o tratamento de dados utilizado para a determinação deste perfil.

CARACTERIZAÇÃO DE BIOTITAS DE PEGMATITOS ZONADOS POR ESPECTROSCOPIA MÖSSBAUER

MACEDO, W. A. DE A.

Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear, CNEN, Belo Horizonte

MARCIANO, V. R. P. R. O.; NEVES, J. M. C.

Departamento de Geologia, IGC/UFMG, Belo Horizonte

SVISERO, D. P.

Instituto de Geociências, USP, São Paulo

Dez amostras de biotitas naturais coletadas de pegmatitos zonados foram estudadas por espectroscopia de infravermelho, difração de raios X, análise química e, principalmente, espectroscopia Mössbauer. Os resultados de infravermelho permitiram a identificação do politipo 1M para todas as amostras. Os resultados Mössbauer indicaram Fe apenas em sítios octaédricos. Em nenhuma das amostras analisadas foi encontrado Fe em sítios tetraédricos, o que representa uma importante informação adicional para a interpretação cristaloquímica das análises químicas dessas biotitas. A razão Fe^{2+}/Fe^{3+} obtida por espectroscopia Mössbauer varia fortemente para as diferentes amostras, com valores desde 0.5 até 6.4, os quais são, em geral, maiores que

aqueles encontrados por análise química, o que é uma clara indicação da ocorrência de oxidação das amostras durante as análises por via úmida.

Os espectros Mössbauer de três das nossas amostras apresentaram, além dos dupletos correspondentes a íons ferrosos e férricos em sítios octaédricos, um duplete com parâmetros Mössbauer que não correspondem nem a Fe^{2+} nem a Fe^{3+} , indicando a existência de um estado intermediário atribuído a Fe com valência mista, em sítios octaédricos. A ponderação dos valores observados para os desvios isoméricos desses dupletos correspondentes à valência mista fornece valências da ordem de +2,7, indicando uma tendência a íons férricos. O desdobramento quadrupolar encontrado para esses estados mistos variam de 0,80 a 0,84 mm/s, estando muito próximos daqueles encontrados para Fe^{3+} .

Caracterização Ótica, Elétrica e Microestrutural de Filmes de Sulfeto de Cádmio Crescidos por Eletrodeposição

MATIAS, J. G. N.; JULIÃO, J. F.; MENDES FILHO, J.

UFC

ASSUMPTÃO, R. DE T.

UNICAMP

FANTINI, M. C. DE A.

USP

Filmes semicondutores de sulfeto de cádmio (CdS) foram crescidos por eletrodeposição galvanostática sobre substratos de titânio e vidro condutor de ITO. Com o objetivo de uma posterior utilização na fabricação de células solares fotoeletroquímicas (células fotovoltaicas de junção sólido-líquido), fizemos a caracterização ótica e elétrica desses filmes usando métodos eletroquímicos tais como espectroscopia eletroquímica de fotocorrente, característica corrente versus tensão e capacitância versus voltagem. Foi feita também uma caracterização microestrutural dos mesmos filmes pelas técnicas de difratometria de raios-x e microscopia eletrônica de varredura. Correlacionamos então as propriedades óticas e de transporte dos filmes com a sua cristalinidade e tamanho de grãos.

Financiamento parcial CNPq/RHAE

Caracterizando o Berilo

BLAK, A. R.

Instituto de Física da USP

A origem dos defeitos e o estudo de suas propriedades no berilo natural ($Be_3Al_2Si_6O_{18}$) não investigados através da correlação de resultados obtidos por Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE), Absorção Ótica (AO), Infravermelho (IR), Termoluminescência (TL) e Correntes Termicamente Estimuladas (CTE). Na natureza são encontrados berilos incolores (goshenita) e nas cores rosa (morganita), azul (água marinha), verde (esmeralda) e amarelo (heliodoro). As principais impurezas presentes nesse ciclo-silicato

são metais de transição, metais alcalinos e moléculas de H_2O , CO_2 e CH_4 . A água ocupa dois sítios distintos nos canais estruturais. Morganitas e Goshenitas iluminadas com luz ultravioleta (UV) apresentam hidrogênio estável à temperatura ambiente observado por RPE. Vacâncias de oxigênio dão origem a uma banda larga de AO na região do UV e são responsáveis pela estabilização de prótons nas vacâncias ou nos íons OH- adjacentes às vacâncias. A iluminação UV dissocia os íons OH^{--} deslocando o hidrogênio para um sítio intersticial, onde ele permanece armadilhado. A mudança de cor no berilo submetido a tratamentos térmicos entre 400 e 900 C está relacionada com a redução do Fe^{3+} para o estado divalente em duas posições diferentes da estrutura cristalina. Tratamentos térmicos acima de 900 C removem a água dos canais estruturais deixando íons alcalinos livres para se mover, favorecendo o processo de redução do ferro. Medidas de CTE e de IR permitem concluir que existe uma competição entre a formação de centros de hidrogênio e o processo de redução do ferro.

Forno para crescimento por puxamento de metais e semicondutores com baixo ponto de fusão.

CASTRO, A. C. DE

Instituto de Física e Química de São Carlos

Projetamos e construímos um forno para crescimento de cristais com baixo ponto e fusão. O corpo do forno é um tubo de quartzo com 85,5 mm de diâmetro e 450 mm de comprimento fixado a uma estrutura de aço inox por o-rings. O aquecimento é efetuado por uma resistência de grafite fixada por suportes também de grafite no interior do tubo de quartzo. Todas as partes que sofrem aquecimento direto são de grafite ou de quartzo. Os componentes de aço inox que entram em contato com a atmosfera interna são refrigerados a água. Pode operar em temperaturas de até 650°C com atmosfera inerte ou redutora com pressões de 10^{-6} torr a 1 atm. Estão previstos três formas de sustentação do cadinho: 1) fixo para cadinhos maiores que ocupem todo o interior da resistência; 2) móvel para quando há necessidade de se mover o cadinho em relação à resistência (bastante útil no resfriamento de materiais que expandem na solidificação) e 3) sobre uma balança para controle automático de diâmetro (ainda em desenvolvimento). Pelas suas características esse forno é bastante adequado para o crescimento de monocristais de metais com baixo ponto de fusão (*In*, *Sn*, *Pb*, etc.) e de compostos semicondutores com baixo ponto de fusão e pressão de vapor (*InSb*, *Bi₂Te₃* etc.). O tubo de quartzo permite uma ótima visão do interior do forno e do processo de crescimento tornando-o ideal para aulas de demonstração e para o treinamento de técnicos.

MODELO GEOMÉTRICO PARA ANOMALIA TÉRMICA DE SÓLIDOS AMORFOS

FURTADO, C. B. S.; MORAES, F.

Departamento de Física - UFPE

O comportamento dos sólidos amorfos a baixa energia de excitação, grandes comprimentos de onda, onde o sólido é visto como um continuum, é substancialmente diferente dos sólidos cristalinos. A baixas temperaturas surgem anomalias no calor específico, espectro Raman e na condutividade térmica. Alguns modelos^a que tentam elucidar estas anomalias invocam potenciais anarmônicos, mas sem explicações para o seu aparecimento. No nosso trabalho mostramos que tais anarmonicidades podem ser justificadas pelo fato da geometria local do sólido sofrer modificações devido ao stress dos defeitos do material. Assim esses defeitos vão provocar uma mudança na curvatura local do continuum contribuindo para a anarmonicidade do potencial. Fazemos um modelo simples considerando osciladores harmônicos em espaços de curvatura constante negativa e positiva e adaptamos a teoria de Debye para estes espaços curvos. Mostramos que no limite de curvaturas pequenas (limite quase-euclidiano) obtemos contribuições anarmônicas para o potencial com as consequentes implicações para o calor específico.

^a V.G. Karpov, M.I. Klinger and F.N. Ignat'ev, Sov. Phys. JETP 57, (2), 439-448, (1989); V. Buchenav, Yu. M. Galperin, V.L. Gurevich, and H.R. Schober, Phys. Rev. B43, (6), 5039-5045.

MEDIDAS DINÂMICAS DA FLUORESCÊNCIA DE CENTROS $Pb^{+}(1)$ EM $BaLiF_3:Pb$

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

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

DENIS, J. P.; TERCIER, N.

Laboratoire de Physicochimie des Matériaux-Meudon, France

Centros de cor associados a íons de Pb^{2+} em matrizes de $KMgF_3$ apresentaram ação laser sintonizável entre 855 e 965 nm. Esses centros podem ser descritos pela mesma aproximação teórica aplicada aos centros laser ativos de $Tl^0(1)$ em cristais de KCl. Centros isoeletrônicos $Pb^{+}(1)$ foram criados anteriormente em cristais de $BaLiF_3:Pb$ submetidos a irradiação com elétrons de alta energia. Esses defeitos apresentaram três bandas de absorção centradas em 735, 476 e 305 nm (17 K) às quais corresponde uma única banda de emissão assimétrica centrada em 880 nm. No presente trabalho foram determinados outros parâmetros espectroscópicos importantes para a análise desse tipo de centro como um possível meio laser ativo tais como tempo de decaimento e sua evolução com a temperatura para a emissão característica de 880 nm. O valor obtido foi da ordem de 1.25 μs e permaneceu praticamente inalterado no intervalo de temperaturas compreendidas entre 10 e 300

K. São apresentados ainda dados referentes à espectroscopia resolvida no tempo dessa emissão obtidos com o intuito de se analisar mais detalhadamente a assimetria da banda observada.

Apoio CNPq-RHAE, FAPESP

Limites para determinação da energia de ativação dos processos termicamente estimulados usando o método da subida inicial

NASCIMENTO, A. E. DO; VALÉRIO, M. E. G.;

LIMA, J. DE

UFS

Boa parte do esforço empregado no estudo dos processos termicamente estimulados tem sido no sentido de desenvolver métodos de análise que permitam extrair dados dos resultados experimentais. O método da subida inicial é comumente empregado para determinação da energia de ativação desses processos devido a facilidade de aplicação. Neste trabalho simulamos, usando um microcomputador, as curvas de emissão termoluminescentes a partir de diferentes expressões para intensidade TL. O método da subida inicial é utilizado para diferentes frações da altura de pico, e as energias de ativação são calculadas a partir das retas com os melhores coeficientes de correlação. São discutidos os limites para utilização do método, as correções necessárias e as aplicações do mesmo em outros processos termicamente estimulados.

Interacciones Hipercfinas en el BaBiO₃ y Ba₂BiO₄

GARCIA, A. L.; PRESA, P. DE LA

Universidad Nac. de La Plata - La Plata

Los compuestos BaBiO₃ y Ba₂BiO₄ han sido estudiados para determinar, además de otras características, el estado de oxidación del Bi. En estos materiales los estados de oxidación han sido propuestos como 3+ y 5+ en lugar de 4+. Estudiamos ambos sistemas mediante Correlaciones Angulares Perturbadas Diferenciales en el Tiempo en el rango de temperaturas de 73 K a 1073 K. El análisis de los espectros muestra un factor de atenuación correspondiente a un proceso de relajación rápido que permanece aproximadamente constante en todo el rango de temperaturas. Por otro lado este comportamiento con la temperatura es similar al BaHfO₃ cúbico y a otras perovskitas cúbicas que también muestran un parámetro de relajación admiten un estado 4+ en el metal rodeado por el octaedro de oxígenos.

INFLUÊNCIA DA TEMPERATURA DE DEPOSIÇÃO NA ESTRUTURA DE LIGAS DE a-GeN_x:H

LOPEZ, J. V.; MARQUES, F. DAS C.

Inst. de Física-UNICAMP

Os nitretos de germânio amorfo hidrogenados (a-GeN_x:H) podem ser potencialmente utilizados como semicondutores, camadas isolantes, ou camadas an-

tirefletoras devido à possibilidade de preparação destas ligas com diferentes banda proibida dependendo do conteúdo de nitrogênio. Neste trabalho apresentamos resultados de análises de espectros de infravermelho na faixa de 400-4000cm⁻¹ de amostras de a-GeN_x:H. Os filmes foram preparados por rf-sputtering utilizando um alvo de Ge em atmosferas de i) Ar + N₂ + H₂ e ii) Ar + NH₃, mantendo as mesmas condições, variando apenas a temperatura de deposição. Os espectros de infravermelho da maioria das amostras apresentam modos vibracionais em torno de 700, 1150 e 3200cm⁻¹, associados aos modos Ge-N stretching, e N-H bending e stretching respectivamente. As concentrações de hidrogênio e nitrogênio foram estimadas pela integração do coeficiente de absorção destas bandas. observamos que à medida que diminuimos a temperatura de deposição dos filmes a concentração de nitrogênio e hidrogênio aumentam. Além disso, observa-se um aumento de intensidade de uma banda de absorção centrada em 1520cm⁻¹, associada ao modo N-H₂ bending, que aparece muito fracamente nos filmes preparados em temperatura elevadas. Neste trabalho também apresentamos um estudo sistemático dos espectros de infravermelho em função do tempo de exposição ao meio ambiente. Observamos que nas amostras preparadas em temperaturas superiores a 100°C não se observa alterações significativas nos espectros infravermelho. Entretanto, as amostras preparadas em temperaturas abaixo de 100°C não são estáveis, apresentando contaminação atmosférica, observado pelo surgimento de várias bandas em torno de 2700-3800, 1450 e 500 cm⁻¹. Apoio: CAPES FAPESP.

AGREGAÇÃO INDUZIDA PELO Al³⁺ EM SOLUÇÕES SÓLIDAS DE FLUORETO DE CÁLCIO COM AlF₃, YbF₃ E LaF₃

VALERIO, M. E. G.

Depto. de Física - UFSE

BLAK, A. R.

UFUSP

TRZESNIAK, P.

Depto de Física - EFEI

CHADWICK, A. V.

Chemical Laboratory - University of Kent at Canterbury

JACKSON, R. A.

Chemical Department - University of Keele

Apresentamos, pela primeira vez, estudos empregando Simulações Computacionais Estáticas e TSPC e TSDC em soluções sólidas de CaF₂ com AlF₃, YbF₃ e LaF₃. Os espectros de TSDC revelaram que: i) abaixo de 270K, as amostras só com Yb³⁺, La³⁺ e as multipopuladas possuem a banda dos dipolos 1|0|0|1₁ e dos defeitos 1|0|1|2₁, e as amostras pura ou só com Al³⁺ não apresentam nenhuma banda; ii) acima de 270K, as amostras pura ou só com La³⁺ apresentam uma banda em 300K, atribuída a deslocamentos, e uma relaxação próxima à temperatura de polarização. As de-

mais amostras apresentam uma banda predominante próxima de 380K além desta última. TSPC combinado com TSDC mostrou que as bandas em 300K e em 390K são devidas a fenômenos localizados de polarização e despolarização. Os resultados de Simulação Computacional mostraram que: i) para os íons La^{3+} e Yb^{3+} , o dipolo nn é o mais estável enquanto que, para o Al^{3+} , é o nnn; ii) o complexo $1|0|1|2_1$ é mais estável que o complexo $1|0|1|2_1$; iii) o La^{3+} deve formar preferencialmente dímeros enquanto que o Yb^{3+} e o Al^{3+} formam os complexos cubo-octaedrais; iv) nas soluções multidopadas, o Al^{3+} produz uma redução na energia de ligação dos agregados cubo-octaedrais. Considerando as diferenças entre as intensidades das diversas bandas de TSPC e TSDC das amostras multidopadas e das monodopadas, as concentrações de cada metal trivalente e as energias de formação e ligação dos diversos defeitos, foi possível verificar a existência de complexos mistos e estudar as "reações" envolvidas nestes processos. As principais conclusões são: i) a banda em 390K é devida ao agregado cubo-octaedral; ii) o Al^{3+} gera preferencialmente agregados grandes do tipo cubo-octaedral; e iii) nas soluções multidopadas, o Al^{3+} atua como "indutor" destes agregados às custas dos defeitos simples (dipolos e complexos $1|0|1|2_1$). (CNPq, FAPESP e Programa BID-USP)

MORFOLOGIA DAS FIGURAS DE ATAQUE QUÍMICO EM FIBRAS MONOCRISTALINAS DE $Bi_{12}SiO_{20}$ (BSO) E $Bi_{12}TiO_{20}$ (BTO).

LIMA, C. J. DE; CARVALHO, J. F.;
ANDREETA, M. R. B.

Universidade de São Paulo, Instituto de Física e Química de São Carlos-DFCM, Grupo de Crescimento de Cristais.

Materiais fotorrefrativos têm sido amplamente estudados devido a sua importância no desenvolvimento de dispositivos envolvendo holografia, espelhos conjugadores de fase, modulação eletroóptica, etc. Os paraelétricos $Bi_{12}SiO_{20}$ (BSO) e $Bi_{12}TiO_{20}$ (BTO), pertencentes à família sillenita têm estrutura cúbica e, quando crescidos ao longo da direção $\langle 110 \rangle$ demonstram ser interessantes para aplicações em holografia. Utilizando a técnica de puxamento de fibras monocristalinas por fusão a laser (Laser Heated Pedestal Growth-LHPG) foram preparadas fibras de BSO e BTO. A técnica de puxamento de fibras LHPG, uma variante do refinamento por zona, consiste basicamente em incidir um feixe focalizado de laser de CO_2 sobre um nutriente (material de partida), dando origem a uma zona fundida, cuja dimensão é função da potência aplicada pelo laser. Após a fusão do nutriente, faz-se a "germinação da semente" num processo semelhante ao crescimento por Czochralski. Entre outras coisas, a versatilidade da técnica permite puxar fibras monocristalinas com orientações pré-definidas, bastando para isto ter uma semente com a orientação desejada. Um dos

fatores que afetam a qualidade dos dispositivos citados inicialmente está a quantidade de defeitos (deslocações, inclusões, etc.) presentes nos monocristais utilizados. A fim de caracterizar estes materiais quanto à morfologia e à quantidade de defeitos estudamos, através de ataque químico, fibras monocristalinas de BSO e BTO preparadas por LHPG. Este estudo tem por objetivo comparar a forma e a densidade das figuras de ataque químico reveladas em cristais de BTO e BSO crescidos por LHPG e pela técnica convencional, visando aprimorar a qualidade das fibras preparadas por LHPG.

CARACTERISATION D'UN CRISTAL $K_6Li_4Nb_{15}O_{30}$ PAR SPECTROSCOPIE RAMAN

FORTIN, W.; BOURSON*, P.; KUGEL, G.

Grupos MOPS (CLOES) Université de METZ - SUPELEC, 2 rue E. Belin 57078 Metz cedex 3 FRANÇA RITZ, D.

Centre de Recherche d'Optoélectronique SANDOZ-Huningue, 68330 Huningue FRANÇA

KLN est un cristal ferroélectrique de la famille des tungstènes bronzes. Certains cristaux de cette famille présentent des propriétés intéressantes en particulier dans des applications dans des dispositifs d'optique non-linéaire:

- (a) propriétés électrooptiques (modulation de la lumière par application d'un champ électrique);
- (b) génération de seconde harmonique (doublement de fréquence du rayonnement laser);
- (c) propriétés photoréfractives, en particulier miroir à conjugaison de phase.

Il est donc nécessaire de bien caractériser les échantillons car ces différentes propriétés physiques (ferroélectricité) sont sensibles à la concentration en Niobium et en Lithium.

Nous montrerons dans ce poster que la spectroscopie Raman peut être un outil non destructif intéressant pour connaître l'influence de la concentration de niobium et de lithium sur la dynamique cristalline du KLN et sur la température de transition de phase ferroélectrique-paraélectrique.

* Presente Adresse: Depto de Física - ICEX - UFMG CP 702, 30161-970 Belo Horizonte MG, Brésil

Crescimento e purificação de cristais de gálio CEOTTO FILHO, G.; ALMEIDA, A. G. DE; LEMOS, A. DE J.;

CARVALHO, R. S.; CARVALHO, A. T. G. DE
Universidade Federal de Viçosa — UFV

Cristais de gálio (Ga) foram crescidos pela técnica de Czochralski de modo a utilizar o efeito de segregação de impurezas como uma etapa no processo de obtenção de Ga de alta pureza (99,9999%). A idéia é que a repetição da operação de cristalização pode propiciar cristais cada vez mais puros. A caracterização das principais impurezas (Fe, Mn, Mg, Al, Sn, In e Zn) foi feita

por espectroscopia de absorção atômica. Os parâmetros de crescimento estão sendo ajustados de modo a otimizar o processo. Pretendemos estudar também a correlação entre a direção de crescimento e a eficiência na segregação de impurezas. Paralelamente, realizamos experimentos para purificação de gálio via refinamento zonal. A partir de amostras com 2% de contaminação foi possível alcançar, até o momento, 99,99% de pureza. Comparações entre as técnicas de crescimento de cristal e refinamento zonal serão apresentadas.

FILMES DE KCl E KCl:Li

SOMMA, F.; CREMONA, M.; MONTEREALI, R. M.

ENEA e Universidade de Roma "La Sapienza"

NUNES, R. A.; CARMO, L. C. S. DO

PUC/Rio

Os cristais de halogenetos alcalinos tem sido estudados intensamente nos últimos anos, e têm sido produzidos seja puros, seja com dopagens controladas, ou ainda de forma mixta. O estudo de defeitos opticamente ativos que podem ser facilmente produzidos por meio de radiações ionizantes tem sido um campo de particular interesse e que se desenvolveu desde que lasers de estado sólido sintonizados puderam ser construídos baseados nestes materiais. Entre os halogenetos alcalinos, o KCl tem sido o mais estudado, sendo o Li um dos dopantes usualmente acrescentados. O estudo de filmes destes materiais é bastante recente, e implica em uma análise estrutural das amostras produzidas em função de parâmetros de crescimento (velocidade, temperatura, tipo de substrato, técnica de produção, etc...) e também da possibilidade de dopar e produzir defeitos de forma controlada. Neste trabalho nós apresentamos os resultados da produção e caracterização de filmes de KCl puros e dopados com Li. Estes filmes se apresentam policristalinos, com parâmetros de rede igual aos dos cristais de volume ($d=3,14\text{Å}$), domínios de cristalização tendo dimensões entre 2000 e 5000 Å e os planos cristalinos organizados de forma a apresentar uma orientação privilegiada constituída de planos (100) paralelos à superfície do filme. A produção de defeitos opticamente ativos (centros de cor) foi feita com bombardeamento de elétrons de baixa energia (3keV) cuja profundidade de penetração se limita ao filme produzido. Foi constatada a presença de centros característicos do KCl puro e, nos filmes dopados, centros característicos de KCl dopado com lítio (centros F_A).

SÍNTESE E PURIFICAÇÃO DE FLUORETOS PARA O CRESCIMENTO DE CRISTAIS LASER ATIVOS

BALDOCHI, S. L.; RANIERI, I. M.; SANTO, A. M.

E.; MORATO, S. P.

IPEN - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares

Os fluoretos, devido à sua alta susceptibilidade à hidrólise, apresentam normalmente, impurezas associadas à água. A presença destas impurezas, mesmo

em baixas concentrações, pode levar a uma degradação das propriedades ópticas e mecânicas dos cristais, bem como alterar seu comportamento na fusão (congruente e ou incongruente). À fim de minimizar este tipo de contaminação é aconselhável proceder à síntese controlada e se necessário à purificação dos compostos obtidos antes do processo de crescimento de cristais laser ativos. No presente estudo, trabalhamos com duas matrizes: $\text{LiYF}_4:\text{TR}$ ($\text{TR} = \text{Nd}^{3+}, \text{Ho}^{3+} \text{ e } \text{Tm}^{3+}$) e $\text{BaLiF}_3:\text{M}$ ($\text{M} = \text{Pb}^{2+}, \text{Ni}^{2+}$). As propriedades laser da matriz LiYF_4 (YLF) dopada com elementos de terras raras são amplamente discutidas na literatura. Por outro lado, a matriz BaLiF_3 (BLF) é uma perovskita, pouco estudada do ponto de vista de crescimento e aplicações ópticas; contudo, investigações recentes mostraram que cristais com estrutura perovskita são matrizes interessantes para lasers de estado sólido. Foi realizada a síntese através do método de hidrofluorinação dos óxidos ou carbonatos correspondentes e a purificação através do método de refino por zona dos compostos obtidos, que foram caracterizados a cada etapa pelos métodos de difração de raios-X, espectrometria de emissão atômica e espectroscopia de absorção óptica no IR. Os resultados obtidos são apresentados e discutidos para cada método de caracterização utilizado.

CARACTERIZAÇÃO "IN SITU" E MORFOLOGIA DE GaAs CRESCIDOS POR MBE

LIMA, A. P.; SHIBLI, S. M.; CESCHIN, A. M.;

QUIVY, A. A.; ROVIRA, P. I.; LEITE, J. R.

Laboratório de Novos Materiais Semicondutores do IFUSP

KIYOHARA, P. K.

Laboratório de Microscopia Eletrônica do IFUSP

A técnica de crescimento de semicondutores por MBE (Molecular Beam Epitaxy) consiste basicamente na incidência de um ou mais feixes térmicos moleculares ou atômicos em um substrato cristalino, sob condição de ultra alto vácuo (UAV). A baixa velocidade de crescimento (da ordem de $1\mu/\text{h}$) aliada à alta velocidade de interrupção dos feixes (0,1 s) possibilita a construção de heteroestruturas com interfaces bem abruptas. O sistema MBE do Laboratório de Novos Materiais Semicondutores do IFUSP, para crescimento de materiais do grupo III-V, possui um canhão de elétrons de alta energia para caracterização "in situ" pela técnica de RHEED (Reflection High Electron Energy Diffraction). Das oscilações do feixe especular do diagrama de difração do RHEED, determinamos as velocidades de crescimento e as composições das ligas. À partir destes dados fizemos as curvas de calibração das células de efusão (velocidade de crescimento \times temperatura das células) de Ga, Al, As e In. Além disso, pudemos determinar o modo de crescimento, a rugosidade da superfície e a desoxidação do substrato observando as variações da intensidade do feixe especular e dos padrões de difração do RHEED. A morfologia da superfície das

camadas crescidas foi analisada através de micrografias ópticas (no próprio laboratório) e eletrônicas, com um microscópio de varredura Jeol JSM 840A do Laboratório de Microscopia Eletrônica do IFUSP. À partir destas foi possível avaliar a densidade de defeitos ovais e otimizar as condições de crescimento e preparação do substrato.

Termoluminescência (TL) e Absorção Óptica (AO) de vidros de Borato de Lítio dopados com Cu^{2+} .

CHINAGLIA, E. DE F.; TRIPPE, S. C.; TATUMI, S. H.

* Laboratório de Dosimetria, Departamento de Física Nuclear, Instituto de Física, Universidade de São Paulo

MATUSOKA, M.

Laboratório de Dosimetria, Departamento de Física Nuclear, Instituto de Física, Universidade de São Paulo

WATANABE, S.

* Laboratório de Dosimetria, Departamento de Física Nuclear, Instituto de Física, Universidade de São Paulo

Foram produzidos vidros de borato de lítio, puros e dopados com diferentes concentrações de Cu e estudadas suas propriedades de absorção óptica e de emissão termoluminescente. Uma parte das amostras foi devitrificada em forno a 800°C e resfriados rapidamente até a temperatura ambiente, formando uma estrutura cristalina conforme análise de difração de raios-X. Após pulverizadas e peneiradas para as medidas TL, essas amostras foram irradiadas com raios- γ de ^{60}Co a uma exposição de $1,1 \times 10^3 \text{C/kg}$. Com a outra parte das amostras, sem devitrificação, foram efetuadas também medidas TL e de AO, sendo as amostras irradiadas com a mesma dose do estudo anterior. Para os dois conjuntos de amostras foi observado resposta termoluminescente, sendo que as amostras devitrificadas apresentam mais picos de emissão TL com maior intensidade do que as não devitrificadas. As medidas de AO foram realizadas para as amostras não devitrificadas, pois as devitrificadas são opacas. Foi observado que a densidade óptica cresceu com o aumento da concentração de Cu. Foi observado ainda que: 1) a radiação parece produzir defeitos na rede que passa a absorver comprimentos de onda menores de 800 nm, independente da concentração do Cu. 2) Para as concentrações abaixo de 0,16%, a radiação parece produzir uma banda na região de 18000 cm^{-1} (550 nm) que antes de irradiado era inexistente. Medidas complementares com uso inclusive de outros métodos como EPR estão sendo presentemente realizadas.

Efeitos da Dopagem com Cu e da recristalização do vidro de borato de Lítio na Termoluminescência (TL).

TRIPPE, S. C.; CHINAGLIA, E. DE F.; TATUMI, S. H.; DANTAS, N. O.; MATUSOKA, M.; WATANABE, S.

* Laboratório de Dosimetria, Departamento de Física Nuclear, Instituto de Física, Universidade de São Paulo

Foram produzidos vidros de borato de lítio, puros e dopados com concentrações diferentes de Cu, e foi estu-

dados o efeito de recristalização (devitrificação) nas suas propriedades de TL. Exceto o vidro contendo 0.075 % (em peso) de Cu e não devitrificado, o vidro sem impureza e os vidros dopados com Cu e submetidos a alguma forma de recristalização, apresentaram em suas curvas de emissão, um pico em torno de 178°C . Na curva de emissão do vidro com Cu, sem devitrificação, foram observados dois picos, um em 138°C e outro, muito largo, em cerca de 400°C . A recristalização produziu novos picos cujo número depende do processo de devitrificação. As curvas de absorção óptica (AO) mostraram que, o Cu^{2+} produziu bandas de absorção em torno de 12500 cm^{-1} e, a altura das bandas é proporcional a concentração de Cu.

Propriedades e Caracterização - 19/05/93

MEDIDAS DO ÍNDICE DE REFRAÇÃO NÃO LINEAR EM VIDROS ÓXIDOS DE METAIS PESADOS - II

REYNOSO, V. C. S.; BARBOSA, L. C.; ROJAS, R. F.; CESAR, C. L.

UNICAMP/IFGW

ALVES, O. L.

UNICAMP/IQ

Estudamos neste trabalho o sistema de vidros da família $\text{Bi}_2\text{O}_3 - \text{PbO} - \text{B}_2\text{O}_3 - \text{GeO}_2$ em relação ao comportamento de suas propriedades ópticas. Usando modelos conhecidos para materiais amorfo^a fez-se medidas da borda de absorção óptica destes vidros na forma de filme fino produzido pela técnica de assopramento. O gap óptico é influenciado profundamente com o aumento da concentração de Bi_2O_3 . Utilizando a técnica da Refração Parcial Molar^b determinamos as distâncias de ligação inter-iônicas^c $\text{Bi} - \text{O}$ e juntamente com os valores obtidos para cada composição do índice de refração linear medidos^d em $\lambda = 638 \text{ nm}$; com os gaps ópticos estimamos os índices de refração não lineares utilizando o modelo de Lines^e. Encontramos que os valores destes índices de refração não linear aumentam com a concentração de Bi_2O_3 . Tal procedimento demonstrou ser um método simples e alternativo à outras técnicas, descritas na literatura. Serão apresentadas outras propriedades deste sistema de vidro e suas correlações com a composição. (TELEBRAS/PDO)

^aJ. Tauc, R. Grigorovici and A. Vancu, Phys. Status Solidi 15,627 (1966).

^bR. C. Turnbull and W. G. Lawrence, J. Am. Cer. Soc. 35, 48 (1952).

^cE. Kordes, Z. Phys. Chem. B44, 249 (1939).

^dR. Swanepoel, J. Phys. E: Sci. Inst. 16, 1214 (1983)

^eM. E. Lines, J. Appl. Phys., 69, 609 (1991).

ESTUDO DO PERFIL DE CONCENTRAÇÃO DURANTE O CRESCIMENTO E A DISSOLUÇÃO DE CRISTAIS DE IODETO DE MERCÚRIO.

HERNANDES, A. C.

USP/IFQSC/DFCM/Grupo de Crescimento de Cristais

PIANO, E.; DALL'AGLIO, G. A.; BEDARIDA, F.;

PONTIGGIA, C.

Università di Genova, Italy

O crescimento e a dissolução de monocristais de α -HgI₂ em solução é estudado com um Dispositivo de Medida de Fase por Difração (DMFD). O princípio físico desta técnica é simples: um raio de luz passando por um meio não homogêneo sofre uma deflexão devido a um gradiente de índice de refração. Durante o crescimento ou dissolução de um cristal em solução ocorre a formação de um gradiente de concentração (ou índice de refração) na interface cristal/solução. Como consequência, um feixe de laser cruzando a célula de crescimento sofrerá uma deflexão angular e modificará a forma, posição e intensidade de um padrão de difração. Analisando esses movimentos somos capazes de diagnosticar os processos de transporte de massa que ocorrem na interface de crescimento ou dissolução. O DMFD permite-nos, no momento, medir o perfil de concentração do "bulk" da solução até a 10 μ m da superfície do cristal. Durante as medidas um cristal foi crescido e dissolvido em diferentes condições de supersaturação. Os resultados obtidos mostraram que os fenômenos de transporte são dependentes da posição do cristal dentro da célula de crescimento e da sua característica de superfície. Em todos os resultados obtidos durante o crescimento do cristal encontramos uma "zona de inversão" no perfil de concentração, sempre presente a aproximadamente 50 μ m acima da superfície do cristal. Nessa região a posição do mínimo do padrão de difração, que revela o perfil de concentração, diminui ou estaciona em relação aos anteriores. Esse comportamento está sendo interpretado como o posição limite de uma camada de contorno de difusão.

ESPECTROS DE EMISSÃO TERMOLUMINESCENTE DE CRISTAIS DE FLUORETO DE LÍCIO COM IMPUREZAS DE Mg, Ti, Cu E P

YOSHIMURA, E. M.; OKUNO, E.

USP - Instituto de Física - DFN - Laboratório de
Dosimetria

SUNTA, C. M.

Atomic Energy Regulatory Board - Bombaim

Com o intuito de identificar os defeitos responsáveis pela emissão de luz durante o aquecimento de cristais de fluoreto de lítio, foi medido o espectro da luz TL emitida por cristais dopados com três conjuntos de impurezas: a) Mg e Ti (TLD-100), b) Mg e Cu, c) Mg, Cu e P. As amostras, na forma de pó ou de pastilhas, foram irradiadas com doses elevadas de raios X. A ter-

moluminescência foi observada através de um tubo fotomultiplicador acoplado a um monocromador de rede de difração, com ajuste manual de comprimentos de onda, cuja curva de transmissão foi determinada experimentalmente. Para os três cristais verificou-se que o máximo da emissão luminosa se dá entre 370 e 390 nm, para todos os picos TL observados acima da temperatura ambiente. Nas amostras contendo fósforo os picos de alta temperatura apresentam também uma emissão secundária em torno de 580 nm, mais notável que a observada para os picos de menor temperatura. Os resultados discordam do modelo atualmente aceito para a emissão de luz do TLD-100, que atribui ao Titânio o papel de centro de recombinação e emissor de luz.

PREPARAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DO SISTEMA VÍTREO Bi₂O₃-CdO-GeO₂ VISANDO DISPOSITIVOS ÓPTICOS

ARANHA, N.; BARBOSA, L. C.

UNICAMP/IF

MORENO, J. D.

UFMA

MENDES FILHO, J.

UFCE/DF

ALVES, O. L.

UNICAMP/IQ

Dando continuidade ao estudo do sistema vítreo Bi₂O₃-CdO-GeO₂^a, objetivando sua aplicação no campo da óptica não linear para dispositivos ópticos ultrarápidos, estamos atualmente analisando novas composições. Foram sintetizadas diversas composições em forno de resistência super kanthal, utilizando cadinho de alumina, onde variamos os tres constituintes. As amostras foram caracterizadas pelas técnicas de dilatométrica, densidade, índice de refração (ângulo de Brewster) e espectroscopia UV-Vis e IV. Apresentaremos os resultados preliminares deste sistema correlacionando - os com as propriedades mais importantes da óptica não linear. Por exemplo, tal sistema apresentou altos índices de refração lineares, em torno de 2,0 em 638 nm, valores estes que dependeram da concentração do óxido de metal pesado Bi₂O₃. Este elemento foi o que mais influenciou as diferentes propriedades deste sistema de vidro. Índices de refração desta ordem de grandeza são sempre uma indicação que suas propriedades ópticas não lineares são importantes, apresentando grande potencialidade no que diz respeito à aplicação no campo dos dispositivos ópticos. (TELEBRAS/PDO)

^aN. Aranha, L. C. Barbosa, O. L. Alves e F. M. S. Garrido, Anais XXXV Congresso Brasileiro de Cerâmica, vol II, 808 (1991).

ESTUDO DA QUALIDADE CRISTALINA DE MONOCRISTAIS DE BaLiF₃, CRESCIDOS PELO MÉTODO CZOCHRALSKI

BALDOCHI, S. L.; MAZZOCCHI, V. L.; PARENTE, C.
B. R.; MORATO, S. P.

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

Neste trabalho, curvas de intensidade de difração de nêutrons, obtidas pelo método do cristal girante ("rocking curves") com monocristais da fluoroperovskita $BaLiF_3$ crescidos pelo método Czochralski, foram relacionadas com parâmetros de crescimento envolvidos no método. A utilização de nêutrons permitiu uma observação global e simultânea de toda a massa cristalina. Três aspectos foram considerados no estudo, a saber, uniformidade do cristal, direção de crescimento e velocidade de rotação. Foram medidas diversas amostras, crescidas nas direções $\langle 100 \rangle$ e $\langle 111 \rangle$, com velocidades de rotação 10, 20, 30, 40 e 60 rpm, considerando-se duas regiões de observação: cone inicial e corpo. As curvas obtidas indicaram a $\langle 100 \rangle$ como sendo a direção de crescimento, que apresenta maior perfeição cristalina, quando o crescimento é realizado a partir de uma interface plana ($\omega = 30$ rpm). Entretanto, nos cristais obtidos nessas condições, observou-se a formação de trincas durante o processo de resfriamento, ou logo após a sua retirada do forno, além de segregação de impurezas na região central dos mesmos. Já para a direção $\langle 111 \rangle$, apesar das curvas de intensidade apresentarem uma largura de mosaico maior, raramente observou-se a formação de trincas. No que se refere ao aspecto velocidade de rotação, verificou-se que as velocidades de 20 e 60 rpm resultam na formação de vários domínios mosaicos, sendo os melhores resultados encontrados para velocidades de 30 e 40 rpm, que correspondem ao crescimento a partir de interfaces planas.

**DOPAGENS EM FIBRAS
MONOCRISTALINAS ATRAVÉS DA
TÉCNICA "PAINT-ON"**

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

*Universidade de São Paulo, Instituto de Física e Química
de São Carlos-DFCM, Grupo de Crescimento de Cristais.*

Recentemente, fibras monocristalinas estão emergindo como um novo componente com potencialidade para substituição de substratos planares em aplicações em telecomunicações, devido a rapidez dos processos de preparação (aproximadamente 60 vezes mais rápidos que os processos convencionais de preparação de monocristais), o seu baixo peso e custo, a sua forma geométrica (tornando-as flexíveis para pequenos diâmetros) conveniente para a utilização como guias de onda, geração de segundo harmônico, produção de componentes ativos de minilasers de estado sólido, dispositivos eletro e acústico-ópticos, fibras supercondutoras de alta temperatura crítica e em holografia entre outras aplicações. Utilizando a técnica de crescimento de fibras monocristalinas por fusão a laser (LHPG), foram produzidas fibras monocristalinas de $LiNbO_3$ e $LiTaO_3$ dopados através da técnica "paint-on". Esta técnica consiste na deposição do dopante sobre o ma-

terial de partida (nutriente) na forma de um filme espesso. Quando associada à técnica LIIPG, a técnica "paint-on" permite o desenvolvimento de materiais dopados com extrema facilidade, quando comparada a técnicas convencionais como por exemplo, Bridgman e Czochralski. Além de não utilizar cadinhos, estudos do efeito de dopantes nas propriedades físicas de monocristais podem ser rapidamente realizados, devido a possibilidade de se preparar dopagens diferentes, em regiões distintas da fibra, em um único processo de crescimento. A fim de demonstrar a versatilidade da técnica, fibras de $LiNbO_3$ foram preparadas com dopagens alternadas ao longo desta com Ferro, Cromo e Európio, o que seria impossível de se realizar em técnicas convencionais de crescimento de cristais.

**RELAXAÇÃO DIELÉTRICA DE ÍONS Cu^{+}
EM CaF_2**

OLIVEIRA, L.; LI, M. S.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

PEDRINI, C.

Laboratoire de Physico-Chimie des Matériaux

*Luminescents, Unité de Recherche Associée au CNRS 442,
Université Lyon 1 - France*

BILL, H.

*Départament de Chimie Physique, Université de Genève -
Switzerland*

Trabalhos anteriores [1] mostraram que as impurezas Cu^{+} em CaF_2 são responsáveis pelas bandas de absorção em 301 e 326 nm e por uma intensa fluorescência em 540 nm, tendo-se concluído que o íon Cu^{+} fica numa posição substitucional fora de centro. A introdução desta impureza na rede de CaF_2 , sugere a o problema de compensação de cargas, onde os resultados espectroscópicos não mostraram nenhuma evidência em relação a existência de pares de Cu^{+} e impureza-vacância (i-v). O íon Cu^{+} em posição fora de centro, pares de Cu^{+} e i-v formam dipolos elétricos, e neste trabalho, nos propomos a investigar, através da técnica de corrente termicamente estimulada (TSDC), a presença destes defeitos em CaF_2 . Os resultados indicam a presença de três bandas em temperaturas de 52, 144 e 187 K, cujas energias de ativação é de 0.14, 0.42 e 0.63 eV, com intensidade maior da banda em 144 K. Desde que, foram observadas três tipos de relaxação, isto sugere a existência de dipolos elétricos formados não somente por aqueles atribuídos ao efeito fora de centro, mas também a outros defeitos locais, como possivelmente os que são mencionados acima.

**DIFUSIVIDADE TÉRMICA DE CRISTAIS
 $BaLiF_3$**

DUARTE, M.; VIEIRA, M. M. F.; BALDOCHI, S. L.
IPEN - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares

Cristais de $BaLiF_3$ dopados com íons de terras raras constituem-se num meio laser ativo bastante promissor. O cristal $BaLiF_3$ é uma perovskita invertida com

estrutura cúbica, onde os íons de Li^+ e Ba^{++} estão em posições trocadas, resultando numa interação de campo cristalino diferente da estrutura perovskita clássica. As transições eletrônicas nesse cristal, quando dopado com íons de metais de transição, apresentam bandas largas, ideais para obtenção de laser sintonizável ou geração de pulsos curtos. A difusividade térmica, parâmetro de grande importância para o crescimento de cristais, engenharia de lasers e espectroscopia fotoacústica, entre outras áreas, foi determinada para um cristal de BaLiF_3 puro, à temperatura ambiente. Nessa determinação foi utilizado o método fotoacústico da diferença de fase, que consiste em se medir a diferença de fase do sinal fotoacústico quando se ilumina pela frente e por trás da amostra, para uma mesma frequência de modulação (Apoio FAPESP, CNPq/RHAE).

CARACTERIZAÇÃO DE INCLUSÕES FLUIDAS EM MINERAIS POR ESPECTROSCOPIA MICRO-RAMAN

PIMENTA, M. A.

Departamento de Física - UFMG Caixa Postal 702 - Belo Horizonte

FUZIKAWA, K.

CDTN - Belo Horizonte

A grande vantagem de se estudar inclusões fluidas em minerais por espectroscopia micro-Raman reside no fato desta técnica ser não destrutiva permitindo o estudo dos fluidos e sólidos nas condições de pressão em que se encontram dentro das inclusões. A luz do laser incide na amostra através da objetiva de um microscópio tornando possível a caracterização de inclusões de até $1 \mu\text{m}^3$. Uma série de minerais abundantes em inclusões fluidas têm sido estudados, como quartzos, topázios imperiais e esmeraldas. Os compostos encontrados com maior frequência nas inclusões são o CO_2 , NH_4 e N_2 . Pudemos também detectar a presença de H_2S em minerais encontrados próximos à jazidas auríferas. Algumas fases sólidas puderam ser identificadas através do espectro Raman, como carbonatos de sódio e magnésio em matrizes de quartzo e microcristais de quartzo em esmeraldas.

Suporte financeiro : FAPEMIG.

SOBRE UM NOVO MÉTODO DE MEDIÇÃO DAS PROPRIEDADES ÓPTICAS EM VIDROS - I

REYNOSO, V. C. S.; BARBOSA, L. C.; ROJAS, R.

F.; CESAR, C. L.

UNICAMP/IFGW

ALVES, O. L.

UNICAMP/IQ

Neste Trabalho, explicamos o método de assopramento de vidros óxidos de metais pesados após o processo de fusão dos seus componentes para produzir filmes finos com espessuras menores que $5 \mu\text{m}$, necessários para a

obtenção do espectro de transmissão na faixa de 200 - 2500 nm. Com os dados deste espectro fizemos o cálculo da espessura da amostra e dos índices de refração segundo o método desenvolvido por Swanepoel^a. Ajustamos estes índices de refração na equação de Sellmeier^b permitindo dessa maneira extrapolar às regiões de forte absorção no ultravioleta às regiões no infravermelho. Com esses valores encontramos o coeficiente de absorção e o gap óptico do vidro. Utilizando o modelo de dispersão dos índices de refração de Wemple^c, encontramos diversos parâmetros ópticos como a energia média das excitações eletrônicas E_s , denominada gap de Sellmeier, a energia de dispersão E_d e a energia de ligação inter-iônica E_l úteis para os cálculos do índice de refração não linear e a dispersão material $M(\lambda)$ do vidro. Procuraremos correlacionar algumas destas propriedades ópticas com as propriedades estruturais destes vidros. (TELEBRAS/PDO)

^aR. Swanepoel, J. Phys. E: Sci. Inst. 16, 609 (1983).

^bM. Rousseau, J. P. Mathieu, in: "Problems in Optics", 208 (1973).

^cS. H. Wemple, J. Chem. Phys., 67, 2151-68 (1977).

Propriedades e Caracterização I (CCP) - 20/05/93

ESTUDO TEÓRICO DAS PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DO SÓDIO SÓLIDO

ZUBOV, V. I.

UFG

ORTIZ, J. F. S.; TRETYAKOV, N. P.

Univ. Amizade dos Povos - Moscou - Russia

O método Correlativo Não-Simetrizado do Campo Autoconsistente ^{a, b} é aplicado ao cálculo das propriedades termodinâmicas do sódio. Os termos anarmônicos principais são incluídos na aproximação zero, e com a teoria de perturbações são calculados os termos de quinta e sexta ordem. Nos cálculos, é utilizado o potencial efetivo inter-iônico de Shiff, que contém oscilações de Friedel. São consideradas as primeiras correções quânticas. A dilatação térmica, os módulos de elasticidade, as capacidades térmicas isocórica e isobárica e o parâmetro e Gruneisen são calculados em função da temperatura e a pressão normal. Os resultados são comparados com dados experimentais, e também com dados de cálculos de outros autores, obtidos na aproximação quasi-harmonica. Discute-se o papel dos termos anarmônicos. A sua inclusão melhora a concordância dos resultados da teoria com os dados experimentais, embora no seu total a anarmonicidade nos metais alcalinos seja um pouco mais fraca do que nos cristais de Van der Waals.

^aV.I. Zubov, Phys.stat.sol.(b) 87,385,88,43 (1978)

^bV.I. Zubov, Int. J. Mod. Phys. B6, 367(1992).

ABSORÇÃO ÓPTICA E RELAXAÇÃO DIELÉTRICA DE ÍONS Cu^+ EM FILMES DE KCl

OLIVEIRA, L.; CRUZ, C. M. S.; SILVA, M. A. P.;
LI, M. S.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

Desde que sabemos que o íon Cu^+ ocupa uma posição substitucional fora de centro em alguns halogenetos alcalinos, investigamos no presente trabalho, se o mesmo efeito continua a prevalecer em filmes evaporados a partir da composição $\text{KCl} + 1\%\text{CuCl}$, utilizando a técnica de corrente termestimulada (TSDC) em temperatura abaixo de hélio líquido e observando a absorção óptica da impureza Cu^+ em diferentes temperaturas e concentrações. Entretanto, as restrições de dopagem e a formação de aglomerados existentes em monocristais são praticamente eliminadas através da absorção térmica. A posição e a área integrada sob a curva em função da temperatura, mostra a independência da força da oscilador com a temperatura, cujo valor determinado foi de 0.034. Uma banda em aproximadamente 49K é mostrada pela técnica de TSDC, com seu melhor ajuste sendo feito por uma distribuição de curvas singulares de TSDC's, com energias de ativação em torno de 0.152eV.

RESPOSTAS NÃO LINEARES NO KDP

MOREIRA, S. G. C.; MELO, F. E. A.

*Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará,
Campus do Pici, Caixa Postal 6030, Fortaleza, CE*

Efeitos não lineares bastante fortes foram observados no KDP e no sal de Rochelle, com bifurcações de frequência estimulante em duas ou várias frequências. O efeito é altamente dependente da temperatura, da intensidade e da frequência do campo aplicado.

Já na temperatura ambiente conseguimos observar efeitos não-lineares quando o estímulo é feito com uma onda quadrada. Porém para a temperaturas próximas de $T_c = 122\text{K}$ e $T = 90\text{K}$ aparecem novos efeitos de não-linearidade bastante interessantes, sendo neste caso o estímulo feito com um sinal senoidal de frequência bem definida.

A montagem experimental é bastante simples, onde no mesmo dielétrico formado pelo cristal se estimula e se retira a resposta do efeito do campo através de 3 eletrodos.

Para alguns valores da temperatura, frequência e intensidade do campo elétrico, se observa resposta altamente instável, sugerindo a possibilidade do sistema estar num estado caótico.

ABAFAMENTO DA TERMOLUMINESCÊNCIA À ALTA TEMPERATURA EM VIDROS ALUMINOBORATOS DE BÁRIO DOPADOS COM FERRO

OLIVEIRA, M. I. T. DE; PONTUSCHKA, W. M.;
RABBANI, S. R.

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

Amostras de vidro 20 mol% Al_2O_3 ; 50 B_2O_3 ; 30 BaO contendo 0,01; 0,1; 0,5 e 0,8 mol% de Fe_2O_3 , respectivamente, foram irradiadas com radiação γ à temperatura ambiente com doses de 10^2 , 10^3 e 10^4 Rad. Para cada amostra, a intensidade da termoluminescência (TL) avermelhada que se observa entre 370 e 480K cresceu com a dose de irradiação e apresentou um decréscimo com o aumento da concentração de Ferro adicionado à matriz vítrea. É proposto um modelo para explicar o mecanismo segundo o qual a presença de orbitais moleculares de Fe associado aos primeiros vizinhos de oxigênio impedem a reação de recombinação entre lacunas (h^+) e íons de Fe^{2+} , produzidos durante o processo de irradiação, com a captura de foto-elétrons por íons de Fe^{3+} . Discute-se a possibilidade de que o mecanismo de captura coerente de elétron e lacuna ocorrer também para esta luminescência, de modo análogo ao que foi proposto anteriormente para a TL azul que ocorre entre 80 e 320K.

MEDIDAS PIROELÉTRICAS EM CERÂMICAS DE TITANATO DE CHUMBO MODIFICADAS COM LANTÂNIO

BALTAZAR-RODRIGUES, J.; EIRAS, J. A.

UFSCar

O coeficiente piroelétrico de cerâmicas ferroelétricas de titanato de chumbo modificadas com lantânio (TL), foi medido segundo o método proposto por Byer e Roundy. Nesse método, as amostras são aquecidas uniformemente e a corrente liberada nas suas faces, devido a despolarização das mesmas pelo aquecimento, é medida com um eletrômetro de baixa resistência interna. O coeficiente piroelétrico é calculado pela equação

$$p(T) = i/A \cdot dT/dt$$

onde $p(T)$ é o coeficiente piroelétrico, i a corrente elétrica, A é a área da amostra e dT/dt a taxa de aquecimento. Foram usadas amostras com concentrações 10%, 15% e 20% em mol de La, com e sem 1% em mol de manganês. Essas amostras foram processadas pelo método convencional de mistura de óxidos, e polarizadas com 3,5 Kv/mm a uma temperatura de aproximadamente 80°C. Os materiais piroelétricos tem grande potencial de aplicação como sensores de infravermelho, no entanto, uma baixa velocidade de resposta pode torná-los pouco atraentes. O tempo de resposta esta relacionado a capacitância do material, e a redução da constante dielétrica pode ser feita pela adição de dopantes, que conseqüentemente, reduz a capacitância e aumenta a velocidade de resposta. Serão apresentados os valores dos coeficientes piroelétricos, das constantes dielétricas e a dependência desses valores com a concentração de La no material, sem e com a presença de dopantes.

CARACTERIZAÇÃO ÓPTICA E ESTRUTURAL DE FILMES DE $KCl:Cu^+$ EM DIVERSAS TEMPERATURAS DO SUBSTRATO.

OLIVEIRA, L.; LI, M. S.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

Filmes de KCl com impurezas Cu^+ , tem despertado enorme interesse, devido a sua alta transparência na região do visível e infra-vermelho, apresentando uma banda em 266 nm, cuja meia largura é de 26 nm e seu coeficiente de absorção está em torno de 10^4 cm^{-1} . Esta banda foi atribuída à posição fora de centro que o íon ocupa na rede cristalina, cuja estrutura é a mesma que do cristal de KCl (fcc). Neste trabalho, fizemos um estudo do comportamento óptico do filme, variando a temperatura do substrato, de ambiente a 250°C e paralelamente analisamos sua micro-estrutura. Os resultados indicam que o filme aumenta sua transparência e diminui a meia largura da banda em 266 nm, quando a temperatura do substrato, durante a evaporação é de aproximadamente 55°C. Acima desta, a área sob a curva (266 nm) começa a diminuir e sua meia largura torna-se cada vez maior, deslocando a banda para comprimentos de onda maior. Neste trabalho, também fizemos o mesmo tipo de análise submetendo o filme a diversos tratamentos térmicos.

Crescimento e Caracterização I (CCP) - 20/05/93

UM NOVO SISTEMA PARA CRESCIMENTO DE CRISTAIS POR SOLUÇÃO COM CONTROLE DA TAXA DE EVAPORAÇÃO

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

USP/IFQSC/DFCM/Grupo de Crescimento de Cristais

O crescimento por evaporação isotérmica do solvente é sempre desejável quando a dependência da solubilidade com a temperatura para o material a ser cristalizado é pequena ou negativa e quando é necessário que o cristal seja produzido sob condições de temperatura constante. Um outro fator que favorece este método é a simplicidade e baixo custo dos equipamentos envolvidos. Uma dificuldade da técnica é o controle da taxa de evaporação e, por consequência, da supersaturação da solução e da velocidade de crescimento. Neste trabalho apresentaremos os detalhes de construção de uma câmara de crescimento que permite um excelente controle da taxa de evaporação e os resultados de sua utilização para o crescimento de cristais de sal de Rochelle e KDP de bom tamanho e qualidade. Este equipamento, uma variação de outros já referidos na literatura, baseia-se no estabelecimento de duas regiões com

diferentes pressões de vapor no interior da câmara de crescimento através da manutenção de temperaturas diferentes nas mesmas. Como o solvente evapora (à temperatura T_1), ele dirige-se para a zona de pressão mais baixa onde é-lhe permitido condensar-se sobre as paredes (pouco umidificantes) de uma peça cônica cuja temperatura ($T_2 < T_1$) é controlada por fluxo de água. O solvente condensado desliza pelas paredes do cone e é captado numa bureta graduada (0.05ml) através de uma calha na base do cone. O controle da taxa de evaporação é feito ajustando-se a temperatura do cone de condensação. Construindo-se a curva "volume evaporado x diferença de temperatura entre a solução e o cone de condensação" pode-se determinar um programa ótimo de crescimento para cada material.

ESTUDO DE ENVELHECIMENTO EM CERÂMICAS FERROELÉTRICAS DE

$Pb(Zr, Ti)O_3$

LENTE, M. H.; GARCIA, D.; EIRAS, J. A.

Grupo de Cerâmicas Ferroelétricas - Depto. de Física - UFSCar

Envelhecimento ("ageing effects") de constantes dielétricas, elásticas e piezoelétricas de materiais ferroelétricos, tais como $BaTiO_3$ e $Pb(Zr, Ti)O_3$, resultam de vários processos que ainda não são bem conhecidos. Vários modelos que envolvem efeitos de volume, de movimento de paredes de domínios e de contorno de grãos são discutidos na literatura. Neste trabalho, o envelhecimento das propriedades eletromecânicas em cerâmicas ferroelétricas a base de $Pb(Zr, Ti)O_3$ ou PZT, com razão Zr/Ti próxima de um, foi estudado para diferentes "processos de polarização" (aplicação de campos elétricos de intensos). Todas as composições foram preparadas pelo método convencional de mistura de óxidos. O efeito de impurezas, com incorporação heterovalente, foi investigado através da dopagem de 1% em peso de Nb e La ao PZT. Ambos aditivos são reconhecidos como criadores de vacâncias nos sítios do Pb. Os resultados são discutidos utilizando-se o modelo de polarização de cargas espaciais.

TRANSIÇÃO DE FASE NO KDP INDUZIDA POR CAMPO ELÉTRICO

MOREIRA, S. G. C.; MELO, F. E. A.

Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Campus do Pici, Caixa Postal 6030, Fortaleza, CE

Estudos preliminares da variação da constante dielétrica com um campo elétrico DC (Bias) aplicado e também com campo de medida da ponte de capacitância AC, confirmam a existência de uma nova fase no KDP, descoberto por S.G.C. Moreira et al., abaixo de 90K.

A variação do campo produz anomalias em duas temperaturas distintas, $T_1 = 119K$ e $T_2 = 77K$, sugerindo transições de fase. As medidas foram feitas mantendo-se a temperatura constante e aumentando-se gradati-

vamente a intensidade do campo elétrico. Na temperatura ambiente $T = 22^\circ\text{C}$, não foi observada nenhuma alteração até terceira casa decimal do valor da constante dielétrica medida.

Escrevendo a constante dielétrica K_z dependente do campo aplicado como

$$K_z(E) = K_0 + \alpha E + \beta E^2$$

podemos ajustar os nossos dados obtidos experimentalmente e calcular os coeficientes α e β para alguns casos.

PREPARAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE VIDROS DA FAMÍLIA $\text{Li}_2\text{O-TiO}_2\text{-TeO}_2$

ROJAS, R. F. C.; BARBOSA, L. C.; REYNOSO, V. C.
UNICAMP/IFGW
ALVES, O. L.
UNICAMP/IQ

As propriedades que apresentam os vidros compostos baseados no TeO_2 mostraram grande interesse e possibilidades de aplicações tecnológicas e industriais, notadamente no campo da óptica não linear. Em nosso trabalho foram sintetizados vidros da família $\text{Li}_2\text{O-TiO}_2\text{-TeO}_2$ com diferentes composições molares. Foram preparados em cadinho de alumina em forno de resistência sofrendo posterior processo de recozimento. Pela técnica de assopramento, utilizando-se um tubo de sílica fino foram produzidos filmes finos de aproximadamente $0.6 - 1.1 \mu\text{m}$. Pelo método de Swanepoel^a foram realizadas medidas dos índices de refração linear entre $200 - 1500 \text{ nm}$. Seguindo o modelo de Wemple^b e da dispersão do índice de refração $n(\lambda)$, calculou-se a energia de excitação média E_g (Gap de Sellmeier) para os elétrons, e a intensidade do oscilador eletrônico E_d . Também foi calculado o parâmetro de dispersão da rede E_r . Foi avaliada a dispersão material $M(\lambda)$ dos vidros produzidos e foram determinados os comprimentos de onda de corte λ_c ($M=0$), para cada composição, encontrando valores entre $2,45$ a $2,56 \mu\text{m}$. Serão apresentadas outras propriedades físico-químicas deste sistema de vidro. (TELEBRAS/PDO)

^aR. Swanepoel, J. Phys. E, Sci. Inst., 16, 1214 (1983).

^bS. H. Wemple, J. Chem. Phys., 67, 2151 (1977).

Crescimento e Caracterização II (CCP) - 21/05/93

PREPARAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DO SISTEMA VÍTREO $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-GeO}_2\text{-Nb}_2\text{O}_5$ VISANDO DISPOSITIVOS ÓPTICOS

ARANHA, N.; BARBOSA, L. C.
UNICAMP/IFGW
ALVES, O. L.
UNICAMP/IQ

Os vidros estão recebendo grande atenção nesses últimos anos devido as suas propriedades características que podem ser exploradas no campo da óptica não linear^a. Dentro desta linha de pesquisa, a partir dos sistemas estudados por nosso grupo^b, sintetizamos um novo sistema vítreo da família $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-GeO}_2\text{-Nb}_2\text{O}_5$. As fusões foram realizadas em forno de resistência elétrica super kanthal utilizando cadinho de alumina. Os vidros obtidos foram cortados e polidos em lâminas de $0,5 \times 10 \times 12 \text{ mm}$, sendo em seguida caracterizados pelas técnicas de dilatométrica, densidade, índice de refração (ângulo de Brewster) e espectroscopia UV-Vis e IV. O sistema apresentou valores do índice de refração linear em torno de 2,0 e do coeficiente de dilatação linear α na faixa de $8,13 \cdot 10^{-6} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$. O "cut off" IV variou de 1400 a 1543 cm^{-1} e o "cut off" UV-Vis em 400 cm^{-1} . Serão apresentadas algumas correlações entre estas medidas e as propriedades ópticas não lineares dos mesmos. (TELEBRAS/PDO)

^aE. M. Vogel, Glasses as Nonlinear Photonic Materials, J. Am. Ceram. Soc. 72(1989)719

^bN. Aranha, O. L. Alves e L. C. Barbosa, Influência da Concentração de Nb_2O_5 e PbO em Vidros Fosfatos, XV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 88(1992)

FILMES MULTIESTRATOS DE LiF:NaF : CARACTERIZAÇÃO ESTRUTURAL E ÓPTICA

CARMO, L. C. S. DO; NUNES, R. A.;
MAURICIO, M. H. P.
PUC/Rio

SOMMA, F.; MONTEREALI, R. M.; CREMONA, M.
Universidade de Roma

Os cristais de halogenetos alcalinos são materiais bem conhecidos como hospedeiros de defeitos pontuais, denominados centros de cor. Estes defeitos foram, e ainda vem sendo estudados, devido às suas aplicações em lasers e dosimetria. Particularmente o Fluoreto de Lítio (LiF) e o fluoreto de sódio apresentam características que os tornam interessantes para estas aplicações, pois são materiais pouco higroscópicos e hospedam defeitos estáveis à temperatura ambiente. Cada um destes materiais apresentam espectro de absorção e luminescência que em boa parte se situam na janela de transmissão do outro. Estes dois materiais não formam uma solução sólida e, portanto, cristais mixtos não podem ser produzidos pelas técnicas convencionais de crescimento de cristais. Novos materiais com estrutura e estequiometria diferentes das normalmente produzidas pela técnica de crescimento de cristais de volume podem ser obtidos por técnicas físicas de crescimento de filmes finos. Desta forma, LiF, NaF e multiestratso de LiF:NaF (com monocamadas com espessuras entre 80 e 2500 \AA) foram crescidos sobre substratos amorfos a três temperaturas diferentes (100 , 200 e 300°C). A característica estrutural e morfológica destes filmes foram analisadas por difração de raios-X (Bragg-Brentano) e por microscopia

eletrônica de varredura. Estes filmes foram irradiados com feixes de elétrons com energia de 3 a 30keV com o objetivo de produzir os centros de cor. Os espectros de luminescência, obtidos por excitação com um laser de Ar, foram medidos nos três filmes. As emissões dos centros de cor dos filmes de LiF e NaF são similares às encontradas nos cristais de volume. O espectro obtido para o filme multiestrato de LiF:NaF não pode ser explicado pela simples superposição dos espectros dos filmes de LiF e NaF separadamente.

CARACTERIZAÇÃO DIELÉTRICA E PIROELÉTRICA DO COMPORTAMENTO RELAXOR DO PLZT 9/65/35 DOPADO

COM W, V, Cr E Mn.

MOREIRA, E. N.; EIRAS, J. A.

UFSCar

Materiais ferroelétricos, que apresentam transição de fase difusa e alta dependência da temperatura de máximo da permissividade dielétrica com a frequência, são conhecidos como relaxores ferroelétricos. Cerâmicas de $Pb_{0.91}La_{0.09}(Zr_{0.65}Ti_{0.35})O_3$ ou PLZT 9/65/35 apresentam características de relaxor ferroelétrico. A substituição de cátions tri, penta e hexavalentes nos sítios (Zr^{+4}, Ti^{+4}) do PLZT 9/65/35 modifica suas características de relaxor. Preparamos amostras de PLZT 9/65/35 "puras" e dopadas com W, V, Cr e Mn. Através de medidas da permissividade dielétrica em diversas frequências e da corrente piroelétrica, ambas em função da temperatura, estudamos o efeito da adição desses dopantes no PLZT. Dopantes trivalentes suprimem a relaxação e aumentam as temperaturas de máximo da permissividade dielétrica relativa, mantendo a transição de fase difusa. Dopantes penta e hexavalente provocam redução nas temperaturas de máximo da permissividade dielétrica relativa, mantendo as características de relaxor do PLZT 9/65/35.

CARACTERIZAÇÃO ÓPTICA DO CRISTAL LiCaAlF₆:Cr³⁺

DUARTE, M.; VIEIRA, M. M. F.; VIEIRA JR, N. D.

IPEN - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares

SHKADAREVICH, A. P.

Academia de Ciências da Bielorrússia, Minsk, Rússia

Dentre os lasers em desenvolvimento atualmente destacam-se os lasers vibrônicos, onde a espécie laser ativa é um íon substitucional em um cristal hospedeiro, que apresenta forte interação com a rede cristalina. Devido a essa interação, as transições ópticas apresentam bandas largas, podendo ser sintonizáveis e facilmente bombeadas por outros lasers ou por lâmpadas. Para os lasers vibrônicos, a espécie laser ativa que tem recebido maior atenção é o íon Cr^{3+} , cuja ação laser já foi observada em pelo menos 15 cristais hospedeiros. Dentre esses cristais destaca-se o $LiCaAlF_6:Cr^{3+}$ ($LiCAF:Cr^{3+}$) que é um novo meio laser ativo, para o

qual algumas propriedades ópticas ainda não foram determinadas. Neste trabalho pretende-se estudar as propriedades ópticas do cristal $LiCAF:Cr^{3+}$ (0,5 %), com destaque para a eficiência quântica de luminescência e a caracterização por espectroscopia fotoacústica, além da obtenção da ação laser. O trabalho está em andamento, sendo que na fase atual foi feita a espectroscopia óptica desse material (Apoio CNPq/RIIAE).

CRESCIMENTO E CARACTERIZAÇÃO DE MONOCRISTAIS DE $BaLiF_3:Pb$

BALDOCHI, S. L.; MORATO, S. P.

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares -

IPEN-CNEN/SP

Utilizando-se a técnica de crescimento Czochralski foram obtidos cristais de $BaLiF_3:Pb$ com concentrações da ordem de 1 mol%. A alta pressão de vapor do PbF_2 durante a fusão resulta, normalmente, em baixa incorporação de chumbo no cristal em crescimento. Devido a esta propriedade foram utilizadas altas concentrações de dopante no material de partida. Considerando-se o composto $Ba_{1-x}Pb_xLiF_3$ utilizou-se $x = 0.05, 0.1, 0.2$. Em todas as experiências observou-se a formação de chumbo metálico nas bordas do cadinho. Problemas com segregação foram observados somente para $x = 0.2$. O coeficiente de segregação do chumbo nesta matriz foi estimado a partir da determinação dos perfis de concentração obtidos por análises de fluorescência de raios-X e espectrografia de emissão atômica, sendo igual a 5×10^{-2} (para $x = 0.05$ a 0.1). Medidas de absorção óptica e luminescência, em amostras de diferentes concentrações, evidenciaram que o íon Pb^{2+} ocupa a posição substitucional ao Ba^{2+} sendo a neutralidade da rede mantida naturalmente sem a formação de defeitos ou qualquer outro mecanismo de compensação de carga.

Apoio FAPESP

SÍNTESE DE FILMES DE DIAMANTE

SALVADORI, M. C.; MAMMANA, V.

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo

Está sendo implantada no Instituto de Física da Universidade de São Paulo uma nova linha de pesquisa referente a síntese e caracterização de filmes de diamante. A aplicação tecnológica para filmes de diamante é bastante vasta. Este material reúne um conjunto de propriedades altamente desejáveis, como por exemplo: (1) possuir alta dureza; (2) ser resistente ao calor, à radiação e ao ataque ácido; (3) possuir alta condutividade térmica à temperatura ambiente; (4) ser um bom isolante elétrico, e poder ser dopado, se transformando num semicondutor; e, (5) ser transparente à luz visível e à radiação infravermelha. O equipamento construído consta de um sistema de deposição química a vapor (CVD) por plasma produzido por microondas. As fontes de carbono utilizadas podem ser várias, sendo a mais usual, a diluição de metano em hidrogênio com menos de 5% em volume; outros gases contendo carbono,

oxigênio ou gases nobres podem ser utilizados. Uma outra fonte de carbono possível para a síntese de diamante por CVD é o grafite, através de transporte químico. O equipamento permite o controle de vários parâmetros como: fluxo da mistura de gases (entre 0 e 500 ml/min); concentração dos gases; pressão no interior da câmara do espécime (abaixo da pressão atmosférica); temperatura de deposição (através da potência fornecida ao gerador de microondas); e, altura do substrato. O equipamento permite ainda a possibilidade de longas deposições, da ordem de alguns dias.

Propriedades e Caracterização II (CCP) - 21/05/93

CORRELAÇÕES ENTRE ESPECTROS DE ABSORÇÃO E DE EMISSÃO DE LUZ DE CRISTAIS DE FLUORETO DE LÍTIO COM IMPUREZAS DE Mg, Ti e OH

SANTOS, P. E. DOS; YOSHIMURA, E. M.; OKUNO, E.

USP - Instituto de Física - DFN - Laboratório de Dosimetria

LIMA, J. F. DE

UFS - Departamento de Física - Aracaju

A utilização de materiais termoluminescentes na dosimetria da radiação ionizante requer a aplicação de tratamentos térmicos adequados entre usos sucessivos, com a finalidade de manter características importantes como sensibilidade e reprodutibilidade. Evita-se também a influência da energia absorvida pelo cristal durante a irradiação e não completamente liberada durante o aquecimento rápido da medida da TL. Para alguns materiais, como o LiF:Mg, Ti, se observa que a curva de emissão TL se modifica fortemente com os métodos de condicionamento térmico, sem que se saiba ao certo como é afetada a distribuição de defeitos no cristal. Neste trabalho se utilizam as técnicas de absorção óptica nas regiões do visível, ultra-violeta (à temperatura ambiente, em cristais irradiados ou não) e infravermelho (à temperatura de liquefação do hélio, cristais não irradiados) para monitorar diversos defeitos presentes no cristal. Para os mesmos cristais se observa ainda o espectro da luz TL emitida. Tratamentos térmicos típicos são usados para condicionar as amostras. Claramente os centros relacionados com a presença de íons de magnésio se modificam, indicando estarem esses íons ora diluídos ora precipitados na solução sólida.

THEORETICAL ANALYSIS OF Ti DIFFUSION IN LiNbO₃ USING A CONCENTRATION DEPENDENT DIFFUSION COEFFICIENT AND TWO SITES DIFFUSION MECHANISM

NUNES, F. D.; JÚNIOR, J. S. DE A.;

SILVA, H. F. DA; MENDES FILHO, J.

*Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará
Campus do Pici - Cx. Postal 6030 Fortaleza - Ceará -
CEP 60451.970*

Optoelectronic devices for signal generation, transmission and processing, are of key importance for actual telecommunication. In these devices, such as optical switches, modulators, filters and others, optical waveguide on planar substrate are of key importance for many integrated optical devices. They can be manufactured by different processes using a large variety of materials as substrates and dopants. Basically, waveguides are made inducing spatial variation on the refractive index of some optical material. For LiNbO₃, in-diffusion of Titanium is the main and a well defined technological process. However, some physical points still remain unclear. One of them is: through what sites (Li or Nb) Ti diffuses in LiNbO₃? Also is not a closed question the understanding of the anisotropic diffusion behaviour between the two directions, perpendicular and parallel to the substrate surface where Ti source film is present. A larger diffusion along the parallel direction is experimentally observed. These questions require studies of the Ti site location in the mother material as well the diffusion process. In this work, Ti diffusion process in LiNbO₃ is analysed using: i) Ti two sites location and b) dopant concentration dependent diffusivity. In the case of Ti sites, is assumed that during diffusion the thermodynamic equilibrium between Ti molecules located in Li and Nb sites, is described by a Langmuir isotherm. It is shown that, as a consequence of existing a preferential location for Ti in LiNbO₃, occurs a nonlinear dependence of diffusivity on Ti concentration. Unidimensional diffusion calculations demonstrate that the stronger the nonlinearity the faster the diffusion mechanism which enlarges dopant penetration depth. This effect might explain the anisotropic bidimensional diffusion behaviour, experimentally observed, without use of ad-hoc assumptions. The understanding of this anomalous in Ti in-diffusion is important for manufacturing of optical waveguides purposes.

TRANSIÇÕES DE FASE DIFUSAS EM CERÂMICAS DE BaTiO₃ OBTIDAS PELO MÉTODO SOL-GEL

LOBO, R. P. S. M.; MOHALLEM, N. D. S.;

MOREIRA, R. L.

Departamentos de Física e de Química, Universidade Federal de Minas Gerais

Amostras cerâmicas de Titanato de Bário foram preparadas por diferentes métodos sol-gel. O estudo da evolução térmica da constante dielétrica destes materiais, na região da transição ferroelétrica, revelou a existência de uma transição de fase difusa. Assim, utilizando técnicas de transições difusas nós pudemos descrever a dependência dos parâmetros de ajuste com o tamanho de grãos e o método de preparação das amostras. Nós observamos que a temperatura média do in-

intervalo de transição decresce, enquanto a largura do intervalo cresce, com tamanhos de grãos decrescentes. Nós atribuímos este efeito a interações entre defeitos carregados na superfície dos grãos e o parâmetro de ordem.

Financiamento: FAPEMIG, CNPq e FINEP.

HIDRETOS METÁLICOS PARA FINS DE REFRIGERAÇÃO

MOKROSS, B. J.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

VEZIROGLU, T. N.

CERI - Clean Energy Research Institute - University of Miami - Coral Gables FL - USA

A viabilidade de utilizar pares de hidretos metálicos para construir bombas térmicas foi demonstrado por vários modelos de laboratório. A ausência de poluição e a segurança apresentada no manuseio destes materiais é que permitem o uso do hidrogênio como fluido de trabalho. O ciclo termodinâmico é analisado e o cálculo do coeficiente de performance é adequado às características físico-químicas e cinéticas do ciclo. Este estudo permite estabelecer uma metodologia para determinar os pares de hidretos mais adequados para o ciclo de refrigeração. Problemas referentes às características dos hidretos como condutibilidade térmica, resistência ao escoamento do hidrogênio em meios poroso, cinética da reação hidrogênio-metal e os efeitos devido à dinâmica do ciclo serão levados em consideração nos cálculos. O objetivo final deste trabalho é determinar a possibilidade de utilizar estes materiais para a construção de refrigeradores mediante o uso de sofisticada tecnologia baseada na reação química apresentada pelos hidretos metálicos. A avaliação deve levar em consideração pesos, custos, dimensões e segurança e deve ser competitivo com refrigeradores convencionais.

Propriedades e Caracterização (CCP)

- 21/05/93

Dimensionalidade da estrutura eletrônica de super-redes $\delta - GaAs$

GONÇALVES, L. C. D.; HENRIQUES, A. B.

Universidade de São Paulo

O $GaAs$ com dopagem planar ($\delta - GaAs$) é uma microestrutura semicondutora em que um plano de átomos dopantes é localizado dentro de algumas monocamadas do cristal. Apresentamos um estudo de amostras $Si - \delta - GaAs$, crescidas por MBE, utilizando a técnica de Shubnikov-de Haas em campos oblíquos e a técnica de fotocondutividade. O espaçamento entre planos dopantes foi variado entre 800Å e 100Å enquanto o nível de dopagem foi mantido constante em $2.0 \times 10^{12} cm^{-2}$. A dependência angular das oscilações de Shubnikov-de

Haas, em conjunção com um cálculo autoconsistente da estrutura de minibandas^a foram utilizados para reconstruir a superfície de Fermi. Para um período da super-rede pequeno ($\approx 300\text{Å}$), o potencial da super-rede se torna mais fraco, e, neste caso, a quebra das reflexões de Bragg (magnetic breakdown) foi detectada. Os espectros de fotocondutividade permitem identificar a posição do nível de Fermi, que é empurrado para cima quando o período da super-rede diminui. A concordância geral entre os resultados experimentais e os cálculos numéricos é bastante satisfatória. A evolução da forma da superfície de Fermi em função do período da super-rede constitui uma descrição muito evidente da transição de estrutura eletrônica bi-dimensional para tri-dimensional em $\delta - GaAs$.

^aA.B. Henriques and L.C.D. Gonçalves, Sem.Sci.Technol., no prelo

DESENVOLVIMENTO DA TEXTURA DE DEFORMAÇÃO EM CHAPAS LAMINADAS DE ZIRCÔNIO

MITTEREGGER, L. M. F. G.; LIMA, N. B. DE

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares -

IPEN/CNEN-SP - Caixa Postal 11049

As propriedades mecânicas das ligas de zircônio são, basicamente, relacionadas à estrutura hexagonal do zircônio, o que gera pronunciada anisotropia na ductibilidade e na dureza destes materiais. Portanto, o conhecimento da orientação cristalográfica é um fator determinante no processo de fabricação de materiais estruturais. A alteração da textura cristalográfica e da microestrutura durante a deformação plástica, chapas laminadas a frio, foi investigada em uma liga de zircônio, através das técnicas de difração de raios X e metalografia. A avaliação da orientação cristalográfica foi realizada por meio de figuras de polo incompletas, utilizando o método de Schulz. As rotações da rede causadas por deslizamento dos planos ocorrem gradualmente com o aumento da deformação. Além disto, alteram a orientação do cristalito, de tal forma, que o plano basal alinha-se em torno da direção de deformação compressiva. O desenvolvimento do grau e do tipo de orientação são discutidos em função do plano basal.

Correntes de Despolarização Termicamente Estimuladas (CDTE) em Berilo Natural.

VIANNA, C. A. P.; BLAK, A. R.

IFUSP

Neste trabalho é apresentada uma sistematização de medidas de CDTE em cristais de berilo, que é um ciclo-cilicato cuja fórmula estrutural é $(Be_3Al_2Si_6O_{18})$ na cor rosa (morganita). As amostras foram divididas em dois grupos. No primeiro grupo as amostras foram submetidas a uma série de tratamentos térmicos variando entre 400°C e 1100°C em dois intervalos de trinta minutos e no segundo grupo as amostras após serem submetidas ao tratamento térmico foram iluminadas com luz ultravioleta por sessenta minutos. Esta série de medidas

auxiliadas por espectros de absorção óptica na região do infravermelho serão utilizadas como ferramentas na proposição de um modelo que correlacione as variações na intensidade dos picos de CDTE com as variações de concentração de diversas impurezas: íons alcalinos, água do tipo I e do tipo II e de Fe^{+2} e Fe^{3+} na rede cristalina e dentro do canal estrutural do berilo natural.

Análise da eficiência de fontes de luz visível utilizadas para polimerizar resinas

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

Faculdade de Filosofia Ciências e Letras de Ribeirão Preto
- Universidade de São Paulo

VINHA, D.

Faculdade de Odontologia - Universidade de São Paulo

O objetivo do presente trabalho é obter a fonte luminosa que melhor polimeriza determinada resina. As resinas são utilizadas na odontologia para restaurações dentárias e principalmente na estética dos dentes, para completar seu tamanho devido quebra ou separação com outros dentes. Obtivemos gráficos das intensidades relativas das fontes luminosas em função do comprimento de onda, com o objetivo de determinar em que intervalo de comprimento de onda do espectro eletromagnético a intensidade de cada fonte luminosa é maior. Encontramos que 450 a 500 nm é a faixa de valores de λ onde as diversas fontes emitem radiação com maior intensidade. Para obter-se os coeficientes de atenuação linear da resina, foi necessário que o coeficiente de atenuação linear de lamínulas fosse calculado, porque elas são utilizadas neste trabalho devido a constituição da resina. Os resultados obtidos para o coeficiente de atenuação linear das lamínulas foram: fonte a: $\mu=0,818 \text{ cm}^{-1}$; fonte b: $\mu=0,719 \text{ cm}^{-1}$; fonte c: $\mu=0,673 \text{ cm}^{-1}$; fonte d: $\mu=1,326 \text{ cm}^{-1}$; e, fonte e: $\mu=1,509 \text{ cm}^{-1}$. Os resultados obtidos para calcular-se o coeficiente de atenuação linear das amostras foram tabelados e estão sendo analisados. Também estão sendo interpretados os resultados obtidos ao medir-se a intensidade transmitida pelas amostras previamente polimerizadas.

ESPECTROSCOPIA RAMAN EM CERÂMICAS FERROELÉTRICAS DO TIPO ABO_3

PIZANI, P. S.; GALZERANI, J. C.; GARCIA, D.; EIRAS, J. A.

Depto. de Física - UFSCar

A espectroscopia Raman tem sido utilizada no estudo de propriedades físicas de cerâmicas ferroelétricas do tipo ABO_3 , preparadas através da técnica de mistura de óxidos a diferentes temperaturas. Os espectros Raman foram obtidos sempre à temperatura ambiente e despolarizados, utilizando-se um espectrômetro Jobin Yvon modelo U1000, com sistema de contagem de fótons e detecção com fotomultiplicadora de GaAs. Como radiação excitadora, foi usada a linha 514,5 nm do laser de argônio. Em particular, cerâmicas de

$(Pb_{1-x}La_x)TiO_3$, com $x = 0.0, 2.5, 5.0, 10.0, 15.0$ e 20.0 , foram estudadas por espectroscopia Raman para duas temperaturas de de preparação (800 C e 1200 C). A influência dessas temperaturas no comportamento dos modos de vibração para as várias concentrações de lantânio pôde ser observada nos espectros. Além disso, um estudo do comportamento do "soft mode" de mais baixa frequência, no que concerne à largura de linha, foi feito para essas amostras. Um modelo simples que correlaciona a largura de linha com a concentração de dopante pode ser formulado.

Emissão Termoluminescente do Topázio

SOUZA, D. DO N.; VALÉRIO, M. E. G.; LIMA, J. DE
* UFS

Neste trabalho estudamos o espectro de emissão termoluminescente do topázio visando identificar os centros de luminescência e de armadilhamento responsáveis pelo processo de emissão TL do material. Foram utilizadas amostras de topázio provenientes de Acari - MG submetidas a diferentes tratamentos térmicos e de radiação. As medidas foram realizadas com um leitor TL construído no próprio laboratório e usando amostras em forma de pó de diâmetro entre 0,074 nm e 0,174 nm. A curva de emissão medida desde a temperatura ambiente até 450 oC apresenta três picos principais nas temperaturas de aproximadamente 105 oC, 180 oC e 225 oC. Os espectros de emissão TL dos três picos são compostos de bandas largas centradas em 400 nm. Estão sendo efetuados estudos para determinação dos parâmetros cinéticos associados com os picos TL.

CENTROS DE DEFEITOS PRODUZIDOS POR IRRADIAÇÃO COM ELÉTRONS EM CRISTAIS DE $BaLiF_3$.

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

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

Cristais puros de $BaLiF_3$ orientados na direção [111] e [100] foram submetidos a irradiação com elétrons de 1.5 MeV em temperaturas de 77 e 300 K. Os principais centros de defeitos formados foram caracterizados por intermédio de medidas de absorção ótica, emissão e excitação. Os espectros de absorção a 77 K apresentaram uma estrutura complexa correspondente à formação de agregados de centros F. Excitação no máximo das bandas de absorção permitiram a observação de quatro bandas de emissão mais significativas situadas na região compreendida entre 400 e 1050 nm. Entre essas destaca-se a emissão observada em cristais orientados na direção [100] em torno de 690 nm correspondente à banda de absorção em 625 nm. As principais diferenças atribuídas ao efeito da temperatura de irradiação e à ativação térmica pós-irradiação dos defeitos formados nos cristais com diferentes orientações são ressaltados. Apoio-FAPESP

**PROPRIEDADES
TERMOLUMINESCENTES DE QUARTZO
DE SEDIMENTOS ARENOSOS**

ARENAS, J. A.

Dep. de Física-Universidade de San Agustín-Arequipa-Peru

MATSUOKA, M.; WATANABE, S.

Ins.de Física-Universidade de-SP.

Foi aplicada a técnica de termoluminescência (TL) ao estudo das propriedades dosimétricas de grãos de quartzo extraídos de materiais coletados em afloramento de sedimentos arenosos, nas localidades de Hotel Gloria-Ilha de Cananéia-SP (proporcionadas por prof. Kenitiro Suguio do Instituto de Geociências-USP), em duas profundidades (basal e topo). A curva de emissão TL da amostra natural apresenta um pico a 290°C. A intensidade dessa emissão TL decresce exponencialmente com o tempo de irradiação à luz solar, aproximando-se a intensidade TL residual (amostra branqueada). A determinação da dose acumulada da radiação natural (DA) foi feita através de calibrações de dois tipos de amostras (natural e branqueada) com raios gama de ^{60}Co . Em ambas as calibrações a intensidade da emissão TL cresce não-linearmente com o aumento da dose de irradiação. Os valores da DA obtidos a partir das calibrações da amostra natural e da branqueada foram respectivamente de 220 e 140 Gy para a profundidade basal, e de 130 e 107 Gy para a profundidade topo. A diferença significativa nos valores da DA para a profundidade basal pode ser devido à irregularidade da curva de calibração na região da dose de 70 a 200 Gy.

**PSEUDO ORIENTED DIPOLE
CALCULATION OF LATTICE POTENTIAL
AND PHASE INTERPRETATION IN
KCN:KBr MIXED SYSTEM**

BOURSON*, P.; DURAND, D.

*Groupe MOPS (CLOES) University of METZ -
SUPELEC, 2 rue E. Belin 57078 Metz cedex 3 FRANÇA*

KCN presents a very interesting order disorder phase transition process, between a pseudo cubic phase where the CN- "dumbbells" are in fast reorientation and the ferroelastic orthorhombic phase where these dumbbells are oriented in the $\langle 110 \rangle$ particular direction. This structural modification is interpreted in terms of an interaction of the orientational degrees of freedom of the aspherical CN- molecules with the lattice strains.

If the CN- ions are progressively replaced by Br- ions, the interactions between CN- molecules change and induce a decreasing of the phase transition temperature and modifications of the structural phase at the transition.

In order to understand these modifications, we propose to apply to KCN:KBr mixed system a model used with success in KCN and RbCN. In this model, we calculate a lattice potential in which we introduce a three body interaction in the coulombian potential in order to take into account the anisotropic behaviour of the

alkali cyanide elastic constants with temperature. In a second step, we replace the CN- molecule by a dipole oriented along the principal directions $\langle 110 \rangle$, $\langle 001 \rangle$ and $\langle 111 \rangle$ of the pseudo cubic cell.

This new "Pseudo Oriented Dipole" potential (POD) is compared to the Pseudo Cubic one (TBI) as a function of temperature and CN- concentration. This comparison allows us to explain the phase transition process in this system.

* Present Address: Depto de Física - ICEX - UFMG CP 702, 30161-970 Belo Horizonte MG, Brazil

**TRATAMENTOS TÉRMICOS E
ILUMINAÇÃO ULTRAVIOLETA DA
AMETISTA**

CORTEZÃO, S. U.; BLAK, A. R.

Instituto de Física da Universidade de São Paulo

O quartzo apresenta defeitos formados durante o seu crescimento e por irradiações subsequentes. Devido a longos canais estruturais e por consistir de uma mistura de ligações iônicas e covalentes, não apresenta simetria cúbica e sua resposta à irradiação é complexa e depende da temperatura de irradiação, tratamentos térmicos previamente efetuados e impurezas presentes. A ametista faz parte do grupo do quartzo alfa, pertencente ao sistema trigonal. Sua estrutura consiste de tetraedros distorcidos cujos vértices são compartilhados entre si. Acima de 573 C, o quartzo alfa se transforma em beta de estrutura hexagonal. Trabalhos de centro de cor em ametistas indicam que a irradiação libera elétrons dos átomos de oxigênio que são capturados por íons de H+, Na+ ou Li+, sendo o processo reversível a temperaturas inferiores a 600 C. Medidas de absorção óptica mostram que o Fe3+ ocupa o lugar de um Si4+ da rede, sendo a carga positiva adicional fornecida por íons H+, Li+ e Na+ em sítios intersticiais ou buracos armadilhados em íons de oxigênio. A irradiação libera elétrons de átomos de oxigênio que são capturados pelos íons positivos compensadores de carga. Quando as ametistas são irradiadas e/ou tratadas termicamente, sua cor violeta pode se tornar amarelo-avermelhada, verde, marrom ou incolor. No presente trabalho estudaremos a resposta das ametistas à iluminação ultravioleta, antes e após tratamentos térmicos, através das técnicas de Absorção Óptica, Correntes Termicamente Estimuladas e, eventualmente, medidas de Ressonância Paramagnética Eletrônica, para que sejam conhecidos esses processos característicos do quartzo alfa.

**ABSORÇÃO ÓPTICA DE VIDROS
ALUMINOBORATOS DE BÁRIO DOPADOS
COM FERRO**

PONTUSCHKA, W. M.; OLIVEIRA, M. I. T. DE;
RABBANI, S. R.

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

Medidas de absorção óptica (AO) de amostras de vidros aluminoboratos de bário dopados com diferentes

quantidades de Fe_2O_3 e Fe_2SO_4 foram efetuadas em amostras contendo 0,01; 0,1; 0,5 e 0,8 mol% da impureza adicionada. O monitoramento da incorporação de Fe^{3+} foi feito com medidas da intensidade da linha de RPE em $g = 4,1$, com a preparação de um gráfico de calibração, permitindo inclusive a determinação da quantidade de ferro em amostras nominalmente não dopadas. O valor absoluto das concentrações é obtido com o auxílio de dados de espectroscopia Mössbauer e do fato, verificado por AO da banda de Fe^{2+} em 10.000 cm^{-1} , de que a quantidade de Fe^{2+} é proporcional à concentração de Fe_{total} . Os resultados são discutidos no sentido de esclarecer a relação entre o estado de oxidação dos íons de ferro e a estrutura local dos possíveis sítios tendo átomos de oxigênio como primeiros vizinhos.

ABSORÇÃO ÓPTICA DO QUARTZO

BEMELMANS, D.; BLAK, A. R.

Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Dentre os óxidos, o quartzo (SiO_2) é um material único, pois é extremamente estável e, geralmente, muito puro, sendo esse motivo muito interessante para a dosimetria da radiação e para a datação. O quartzo se apresenta na natureza de várias maneiras: incolor, rosa, marron (quartzo fumê) e roxo (ametista). Essas variedades alcromáticas podem ser estudadas através de medidas de absorção óptica (AO) na região do espectro óptico compreendido pelo infravermelho, visível e ultravioleta. Os resultados obtidos permitem a análise quase completa dos defeitos e impurezas responsáveis pelas diferentes cores dos vários tipos de quartzo encontrados na natureza. Alguns centros de cor formam-se a partir de condições especiais durante o crescimento cristalino. Este é o caso da presença de impurezas como o Fe^{3+} na ametista e o Al^{3+} no quartzo fumê substituindo o Si^{4+} na rede cristalina. A estabilidade do composto, nestes casos, é mantida por impurezas de metais alcalinos dispersos na rede. Vacâncias de oxigênio podem ocorrer tanto de forma intrínseca como causadas por danos de radiação nesses materiais.

CARACTERIZAÇÃO DE NÍVEIS PROFUNDOS EM ESTRUTURAS SEMICONDUTORAS ATRAVÉS DA TÉCNICA DE ESPECTROSCOPIA EM FREQUÊNCIA DE FOTOCONDUITIVIDADE

LOURENÇO, M. A.

Universidade Federal de Minas Gerais

A técnica de espectroscopia em frequência de fotocondutividade (PCFRS) possibilita o estudo dos mecanismos de recombinação e distribuição dos tempos de vida em materiais semicondutores. Esta técnica é adequada para a caracterização de defeitos eletricamente ativos em semicondutores, sendo complementar às técnicas existentes baseadas em medidas de capacitância, tais

como, Deep Level Transient Spectroscopy (DLTS). Um experimento de PCFRS consiste, basicamente, em excitar a amostra por meio de luz modulada senoidalmente e medir a componente alternada proveniente da amostra usando-se um "lock-in". Variando-se a frequência da modulação obtém-se a distribuição de tempos de vida diretamente. Neste trabalho apresentamos uma análise do sinal de PCFRS para experimentos realizados a diferentes temperaturas. Em particular mostramos como a técnica PCFRS pode ser utilizada para a determinação dos níveis profundos presentes em um material semicondutor e apresentamos resultados obtidos em amostras de silício policristalino.

Comportamiento con la Temperatura del EFG que actúa sobre ^{181}Ta en HfO_2

AYALA, A.; GARCÍA, A. L.; ALONSO, R.

Universidad Nac. de La Plata - La Plata

En este trabajo presentaremos el estudio del comportamiento con la temperatura del tensor gradiente de campo eléctrico hiperfino (HEFG) que actúa sobre la sonda ^{181}Ta en el HfO_2 medido usando la técnica de correlaciones angulares perturbadas diferenciales en el tiempo (TDPAC). Espectros temporales de gran resolución y estadística fueron tomados en el rango de nitrógeno líquido a 1473 K. Dos interacciones fueron detectadas, una correspondiente a la estructura monocúbica del HfO_2 y otra asociada a defectos. De los parámetros hiperfinos se dedujeron las tres componentes del HEFG y se encontró que V_{xx} , V_{yy} y V_{zz} tienen diferentes comportamientos con la temperatura. Estos resultados se analizan en término de los modelos conocidos de la dependencia del HEFG con la temperatura.

Estudio TDPAC del $SrHfO_3$

PRESA, P. DE; AYALA, A.; GARCÍA, A. L.

Universidad Nac. de La Plata - La Plata

Dentro del estudio sistemático de perovskitas (materiales del tipo ABO_3) ferroeléctricas y paraeléctricas, se realizaron medidas de Correlaciones Angulares Perturbadas Diferenciales en Tiempo (TDPAC) sobre $SrHfO_3$. Mediante esta técnica se midió el gradiente de campo eléctrico hiperfino sobre la sonda ^{181}Ta , en el rango de temperaturas comprendido entre 300 K y 1000 K. En ese rango de temperaturas no se observó la existencia de transiciones de fase estructurales. A diferencia de otras perovskitas de estructura similar, las interacciones hiperfinas en el $SrHfO_3$ muestran, a baja temperatura, comportamiento de tipo estático, que con el aumento de la temperatura, se transforma en dinámico. Se discuten los resultados y comparan con medidas de otros autores y otros materiales de igual estructura.

Formação de Dímeros Mistos no Fluoreto de Cálcio dopado com íons Terras Raras

SOUZA, S. S.; BLAK, A. R.

Instituto de Física da USP

Desenvolve-se, através de técnicas de simulação computacional estática, um estudo sobre a formação de dímeros mistos na matriz do CaF_2 dopado com íons terras raras. As impurezas trivalentes entram na rede substituindo o cálcio e a formação dos dímeros se dá pela agregação de dois dipolos. Várias configurações para os dímeros mistos foram propostas, tendo sido constatado que a configuração mais provável, dentre as estudadas, é aquela em os dipolos encontram-se dispostos paralelamente. Obteve-se também as energias de formação e ligação para todas as combinações de dímeros, ou seja, foram elaboradas combinações com os elementos Lu, Yb, Er, Tb, Eu, La e Gd. A simulação computacional foi feita usando-se os procedimentos computacionais inseridos no código IADES2 (Harwell Automatic Defect Examination System) cedido gentilmente pelo laboratório Harwell. O programa usa a estratégia da divisão do cristal em duas regiões, a interna que contém os defeitos e a externa considerada como um dielétrico contínuo. Os cálculos são efetuados levando-se em consideração um modelo específico para o potencial de interação entre os íons, dividido em potencial de curto e de longo alcance. Apoio CNPq

NÃO LINEARIDADES EM NOVAS MATRIZES VÍTREAS

CARDOSO, T. V.

FATEC-Sorocaba-CEETPS/UNESP

DUARTE, A. S.; ARANHA, N.; BARBOSA, L. C.;

ALVES, O. L.; FRAGNITO, H. L.

DEQ - IFGW / UNICAMP - C.P. 6165

O crescente interesse em sistemas de transmissão e processamento de sinais totalmente ópticos tem levado ao desenvolvimento de novas matrizes vítreas que possam ser dopados com érbio para a construção de lasers e amplificadores ópticos na região de $1,5 \mu\text{m}$, faixa preferencial dos sistemas de comunicação de última geração. Vidros dopados com Érbio que apresentem altas não-linearidades ópticas são atrativos pois permitiriam a realização de dispositivos fotônicos com ganho com aplicações, por exemplo, na construção de chaves ópticas rápidas e demultiplexadores de bits.

Estamos estudando as não-linearidades de duas novas matrizes vítreas a base de Telúrio e de Nióbio. Os dois sistemas aceitam bem as dopagens com terras-raras, revelando-se promissores meios amplificadores ópticos, uma vez que apresentam baixas energias de fonon de rede (faixa de $600\text{-}800 \text{ cm}^{-1}$ para os teluretos e de $1000\text{-}1200 \text{ cm}^{-1}$ para os vidros de Nióbio). A técnica de *varredura-z* [1] foi utilizada para as medidas do coeficiente não-linear do índice de refração, n_2 . Usamos um laser de Nd:YAG, com mode-locking e Q-switching, trabalhando a $1,06 \mu\text{m}$, com pulsos de duração temporal da ordem de 200 ns a uma taxa de 100 Hz. Os valores de n_2 obtidos são superiores ao da sílica. Não se observou também alteração significativa em n_2 quando se compara matrizes puras com matrizes dopadas com Érbio.

[1] Alexandre S. Duarte, Tese de Mestrado - Dezembro/92 - UNICAMP

EVIDÊNCIAS DO MOVIMENTO DE DESLOCAÇÕES EM CRISTAIS IÔNICOS SUBMETIDOS À APLICAÇÃO DE PRESSÃO MECÂNICA

MORAES, A. C. DE; YOSHIMURA, E. M.; OKUNO, E.
USP - Instituto de Física - DFN - Laboratório de
Dosimetria

A presença de deslocções em cristais iônicos é responsável por mudanças em muitas propriedades mecânicas desses materiais (por exemplo dureza e elasticidade). Esses defeitos extensos atuam também como "âncoras" para íons e vacâncias existentes nos cristais, podendo assim alterar a sua distribuição no volume das amostras. Esse fato possibilita o estudo da presença e a quantificação das deslocções por meio de dois métodos distintos: observação direta ao microscópio óptico das intersaecções das linhas de deslocções com a superfície do cristal (etch pits) produzidas por ataque químico adequado; e medida de correntes de despolarização acima da temperatura ambiente. Foram utilizados os dois métodos para estudar a variação na concentração de deslocções em cristais de fluoreto de lítio sem impurezas, quando submetidos a pressões mecânicas suficientes para produzir deformações permanentes. Dessa forma foi possível confirmar a identificação de uma banda de CDTE já observada anteriormente como sendo devida a deslocções.

VARIAÇÃO COMPOSICIONAL EM MONOCRISTAIS DE $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ CRESCIDOS PELO MÉTODO BRIDGMAN.

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

AMR/IAE - CTA

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

LAS/INPE

O método de crescimento de monocristais a partir do equilíbrio entre líquido/sólido tem resultado em compostos semicondutores de alta qualidade em termos de estrutura cristalina. No entanto, para compostos ternários tais como telureto de cádmio e mercúrio ocorre uma grande diferença na composição do sólido e do líquido como consequência da segregação do soluto, resultando na variação composicional do cristal obtido; tornando-se necessárias análises para se encontrar a região onde a composição é adequada para fins de confecção de detectores de radiação infravermelha termal. O objetivo deste trabalho é verificar como ocorre a distribuição do soluto ao longo do cristal de $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ (onde $x = 2$), crescido pelo método Bridgman.

RPE DE IMPUREZAS DE Fe^{+3} E Cr^{+3} EM
FIBRAS DE LiNbO_3 .

SANTANA, R. C.; TERRILE, M. C.; ANDREETA, M. R. B.; HERNANDES, A.; LIMA, C. J. DE
Universidade de São Paulo, Instituto de Física e Química de São Carlos - DFCM.

Neste trabalho estudamos, através da técnica de R.P.E., fibras monocristalinas de $LiNbO_3$ dopadas com Ferro e Cromo. O objetivo do trabalho foi verificar se os valores dos parâmetros de campo cristalino, fator-g e largura de linha nos espectros de absorção dos íons Fe^{+3} e Cr^{+3} , diferem dos encontrados para os monocristais de $LiNbO_3 : Fe^{+3}$ e $LiNbO_3 : Cr^{+3}$ crescidos pela técnica de Czochralski (CZ). Acreditava-se inicialmente que a alta velocidade de crescimento (60 vezes superior a da técnica de crescimento convencional) e à forte influência da superfície das fibras (a razão área superficial/volume é aproximadamente 50 vezes superior ao dos monocristais) poderiam alterar os parâmetros acima mencionados. As fibras foram crescidas pela técnica de fusão a laser, (LHPG), desenvolvida nos laboratórios do Grupo de Crescimento de Cristais do DFCM/IFQSC. O diâmetro das fibras foi de $700 \mu m$ e o comprimento de 8 mm. Os espectros de R.P.E. foram conseguidos usando um espectrômetro Varian, modelo E-109, banda-X (9.5 GHz), a temperatura de 300 K. O espectro do íon Fe^{+3} no $LiNbO_3$ é descrito pela Hamiltoniana de spin $\mathcal{H} = \beta(\vec{H} \cdot \vec{g} \cdot \vec{S}) + B_2^0 O_2^0 + B_4^0 O_4^0$, uma vez que o íon ocupa um sítio de simetria axial. Os valores de g , B_2^0 e B_4^0 , a variação angular e a largura de linha são semelhantes aos encontrados na literatura. Para o íon Cr^{+3} a Hamiltoniana é: $\mathcal{H} = \beta(\vec{H} \cdot \vec{g} \cdot \vec{S}) + D[S_z^2 - \frac{1}{3}S(S+1)]$. Os valores de g , D , a variação angular e a largura de linha também são semelhantes aos encontrados na lite-

ratura.

ESTUDO DA INFLUÊNCIA DE DEFEITOS TOPOLÓGICOS EM FENÔMENOS DE TRANSPORTE

FURTADO, C. B. S.; MORAES, F.
Departamento de Física - UFPE

Nos últimos anos, várias áreas da física procurou explorar os efeitos da topologia nas propriedades físicas de certos sistemas reais. A presença de defeitos topológicos tem se manifestado na física moderna: na gravitação (monopolos, cordas, barreira de domínio) e em matéria condensada (vórtices, desclinações, deslocamentos, solitons e barreiras de domínios). A presença de um defeito topológico em um meio elástico contínuo muda a topologia do espaço, de uma região simplesmente conexa para uma multiconexa. Por este motivo as características físicas de uma partícula movendo-se em um meio com defeito podem ser modificada em comparação a uma em um meio livre de defeitos^a. Investigamos o efeito da topologia em propriedades de transporte, em particular o efeito Hall, de sólidos amorfos, onde os defeitos topológicos são abundantes. Como passo inicial, resolvemos a equação de Schrödinger para o problema de espalhamento de uma partícula na presença de um defeito topológico submetido a um campo magnético uniforme. A generalização do problema para muitas partículas (o caso real em fenômenos de transporte) esta em andamento.

^aK. Kawamura, Z. Physik, B, 29, 101-106, (1978);
 V.A. Osipov Phys. Lett. A, 164 327-330, (1992)

CRISTALOGRAFIA

Cristalografia Orgânica, Difração de Raios X - Instrumentação (CRI) - 19/05/93

TRAÇADO DE RAIOS PARA A ESTAÇÃO DE ESPALHAMENTO DE RAIOS X A BAIXO ÂNGULO DO LNLS UTILIZANDO PROGRAMA SHADOW

BERNARDES, L. A.; VICENTIN, F. C.; TOLENTINO, H.

Laboratório Nacional de Luz Síncrotron
DACAL, L. C. O.

Instituto de Física Universidade Federal da Bahia

Durante os últimos dois anos vem sendo projetada e construída no LNLS uma estação para realização de experiências utilizando a técnica de espalhamento de raios x a baixo ângulo ⁽¹⁾. Como esse tipo de experimento necessita de um alto fluxo de fótons monocromáticos, é apropriado que se use uma óptica focalizante. Para tanto são utilizados basicamente dois elementos ópticos: um monocromador de cristal curvo e um espelho para raio x. Dadas as características desses dois elementos existem vários aspectos relacionados a óptica de focalização que precisam ser cuidadosamente analisados. O método mais preciso para esse tipo de análise é o uso de programas para traçado de raios. Esses programas permitem que se determine teoricamente as características geométricas do feixe no interior da estação. Além disso podem ser realizadas análises relacionadas a carga térmica, a qual os vários elementos da estação estarão submetidos. Finalmente podem ser avaliados efeitos referente a aberrações e imperfeições das superfícies focalizantes, o que torna o método de vital importância ao projeto de estações experimentais: Será apresentado uma análise completa da estação de SAXS do LNLS feita com o auxílio do programa para traçado de raios SHADOW ⁽²⁾. A análise inclui os dois elementos ópticos acima citados montados na geometria apropriada às características do anel brasileiro.

⁽¹⁾ B.Lai and F. Cerrina, Nucl. Instrum. Methods A 246,337 (1986).

⁽²⁾ L.A. Bernardes, H. Tolentino, A.R.D. Rodrigues, A. Craievich, I. Torriani, Rev. Sci. Instrum. 63(1) Part IIA, January (1992).

PREPARATION OF SOME HEAVY-ATOM DERIVATIVES FOR THE CRYSTALLOGRAPHIC STRUCTURE DETERMINATION OF GLUCOSAMINE-6-PHOSPHATE DEAMINASE FROM *Escherichia coli* K12.

FONTES, M. R. DE M.; HORJALES, E.; GARRAT, R. C.; OLIVA, G.

Instituto de Física e química de São Carlos, USP.

The enzyme Glucosamine-6-phosphate deaminase (G6PDA) is involved in the reversible conversion of D-glucosamine-6-phosphate (GlcN6P) into Fru6P and ammonia. The hexameric enzyme (mol.wt.=178200) exhibits an intense homotropic co-operativity towards GlcN6P which is allosterically modulated by the activator N-acetyl-D-glucosamine 6-phosphate (GlcNAc6P). Recently, we initiated the crystallographic study of G6PDA with the purpose of determining its tridimensional structure and biochemical mechanisms. The enzyme was crystallized in space group R32, with cell parameters $a = b = 125.9\text{Å}$ and $c = 223.2\text{Å}$ (Horjales et al., J.Mol.Biol., 226, pp1283, 1992). A search of the OWL sequences database has shown no significant homology with any other known protein family. Therefore the structure determination will have to be achieved through the Multiple Isomorphous Replacement technique. Several platinum and mercury isomorphous derivatives crystals were prepared and characterized. Derivatization is achieved with the soaking of native crystals in low concentration heavy-atom solutions (typically 0.05-0.2 mM) during 12-48 hours before diffraction data collection. Data collection was performed using a computer-linked image-plate area detector RAXIS-IIC from RIGAKU, fitted with a cooling device which kept the crystal at 4°C to minimize radiation damage effects. For the K_2PtCl_4 derivative, data was collected up to 2.5Å resolution and for the mersalyl acid derivative, to 3.0Å resolution. After merging of all equivalent reflections, including Bijvoet pairs, and scaling the intensities the native dataset, the average intensity differences were 27% (for K_2PtCl_4) and 15% (for mersalyl). The difference Patterson maps were interpreted and all heavy-atoms binding sites are currently being refined.

This work has received partial support from PADCT-SBIO, CNPq, FAPESP and FINEP.

**EXAFS DISPERSIVO COM FONTE DE
RAIOS X CONVENCIONAL: UMA
FERRAMENTA DE ANALISE
ESTRUTURAL VIAVEL**

ZANCHET⁽¹⁾, D.; TOLENTINO, H.

Laboratório Nacional de Luz Síncrotron

EXAFS (Extended X-Ray Absorption Fine Structure) é uma poderosa ferramenta de análise, que utiliza a informação contida nas oscilações do coeficiente de absorção no lado de alta energia da borda de absorção, na determinação da estrutura geométrica e eletrônica dos materiais. Para obter-se um espectro de EXAFS, necessita-se de um espectro contínuo de radiação na região de raios X, o que a torna uma técnica privilegiada nas fontes de radiação síncrotron. As fontes convencionais de laboratório geram espectros de radiação branca, porém de baixa intensidade. Este estudo foi feito no sentido de otimizar a utilização da intensidade fornecida por estas fontes e reduzir o tempo de aquisição de espectros de EXAFS. Utilizamos para tanto uma geometria dispersiva focalizante (uma banda passante de algumas centenas de eV em torno da borda de absorção é selecionada numa direção de dispersão, enquanto que uma focalização sagital é imposta na outra direção) associada a um detector unidimensional de fotodiodos (tipo RETICON). A óptica e o sistema de detecção foram caracterizados em termos de resolução em energia, aberrações, relação sinal ruído, estabilidade, etc ..., demonstrando a viabilidade técnica de EXAFS em laboratório. Um exemplo, é o espectro de absorção da borda K do Cu, obtido num tempo de 30 min. com um tubo de raios X de W foco fino operando em 30 kV e 18 mA. O sinal de EXAFS e a transformada de Fourier correspondente apresentam tão boa qualidade quanto os melhores resultados obtidos com fontes de luz síncrotron. Esta técnica poderá ser de grande valia na identificação em laboratório de novos problemas em ciências de materiais, antes de se buscar uma fonte de luz síncrotron. ⁽¹⁾ Bolsista de Verão LNL.

**ANÁLISE CONFORMACIONAL DA
MOLÉCULA DE 4,4'-DICHLORO-N,N-
DIETILBENCIDRILAMINA**

CASTELLETTO, V.

Universidade de São Paulo - São Paulo.

RIVERO, B. E.; PUNTE, G.

Universidad Nacional de La Plata - La Plata.

A bencidrilamina (I) e seus derivados apresenta atividade inibidora dos espasmos da musculatura lisa. Este trabalho se refere a parte de uma investigação sistemática sobre derivados de (I), com o intuito de determinar os parâmetros que governam a relação estrutura-atividade. Com este propósito chegou-se a estrutura cristalina de Hidroclorato de 4,4'-Dicloro-N,N-dietilbencidrilamina (II), sal utilizada para deter-

minações de atividade devido a sua grande solubilidade, por método de difração de raios-X de monocristal. Os resultados da resolução da estrutura cristalina e molecular de (II) mostraram que a molécula protonada apresenta em estado sólido uma conformação helicoidal C_2 , deformada, diferente da conformação helicoidal C_2 deformada adotada por (I), mesmo que similar aos outros derivados de (I) que apresentam como (II) maior atividade biológica que (I). Os dados obtidos sugerem que o aumento da atividade biológica pode ser associado a substituições que aumentam o efeito hidrofóbico ao mesmo tempo que conservam a disponibilidade do nitrogênio

**SISTEMA DE RESFRIAMENTO DE
AMOSTRAS POR FLUXO DE
NITROGÊNIO PARA MEDIDAS DE
DIFRAÇÃO DE RAIOS-X**

AMÁVEL, A. S.; SPEZIALI, N. L.

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais

O estudo de transições de fase termotrópicas (função da temperatura) de compostos sólidos atrai a atenção de pesquisadores de diferentes áreas da Física. Comumente uma transição de fase em compostos cristalinos tem como consequência alguma transformação estrutural; tal transformação pode ser detectada e, em muitos casos, identificada através de medidas de difração. Efeitos de absorção dos raios-X dificultam a construção de câmaras criogênicas para medidas de difração através de métodos que utilizam amostras monocristalinas. Uma técnica empregada para a solução do problema de medidas a baixas temperaturas é a utilização de um fluxo contínuo de gás frio envolvendo a amostra. Em sistemas criogênicos desse tipo, dois pontos são de importância fundamental: o controle do fluxo de gás sobre a amostra e o controle da temperatura desse gás. Foi construído um sistema para resfriamento de amostras usadas em técnicas de difração com monocristais. O desenvolvimento do projeto e resultados obtidos na fase de teste serão apresentados.

**DETERMINAÇÃO DO COEFICIENTE DE
EXPANSÃO TÉRMICA EM
MONOCRISTAIS COM DIFRATÔMETRO
DE DUPLO EIXO.**

WISNIEWSKI, C.; DENICOLÓ, I.; CAMARGO, P. C.
D.; CUSATIS, C.

DF/UFPR

Os parâmetros de rede de um monocristal sofrem variações em função da temperatura. Em materiais monocristalinos a técnica de difração de raios-x num difratômetro de duplo eixo tem demonstrado ser adequada devido a sua grande sensibilidade ($\approx 5 \times 10^{-8}$

rad) nas medidas de deslocamento angular da reflexão. Sendo o coeficiente de expansão térmica (α) do silício bem conhecido, utilizou-se o mesmo para calibração do equipamento. As medidas do coeficiente de expansão térmica feitas em silício (100) de alta resistividade (ρ) levaram a valores de (α) feitas em silício a temperatura de 25° iguais a $(2.60 \pm 0.02) \times 10^{-6} K^{-1}$. Estando a técnica implementada e a calibração com silício concluída pretende-se investigar o coeficiente de expansão térmica de ligas metálicas monocristalinas, como nióbio-molibdênio e cromo-vanádio.

STRUCTURE OF AN INTERMEDIATE IN THE SYNTHESIS OF CEMBRANES.

2-ISOPROPYL-5-METHYL-TRICYCLO[8.4.0.0^{2,7}]-4,9-TETRADECADIENEDIONE-3,6

ZUKERMAN-SCHPECTOR, J.

Instituto de Física e Química de São Carlos

IULEK, J.

Departamento de Química - Universidade Estadual de Ponta Grossa

Cembranes are substances with a wide range of biological activity, such as neurotoxins, citotoxins, anticancer, anti-mitotic and anti-inflammatory agents. Many of them have been tested mainly as anti-neoplastic agents. They are natural products, being found in vegetables and animals. Isolation from natural sources is quite difficult due to geographic location where these sources are found and the different concentrations found during the life cycle of the organism. For these reasons, T.J. Brocksom and his group at the Universidade Federal de São Carlos started a research program trying to find a route to synthesize these compounds. As the reactions in the proposed pathway may be regio or stereoselective, the knowledge of the stereochemistry of the intermediates is fundamental for planning each step in the synthesis. To accomplish this, the crystal structure determination of the above intermediate has been undertaken. Crystal data: $C_{18}H_{24}O_2$ crystallizes in space group $P2_1/n$ with $a = 12.664(1)\text{Å}$, $b = 9.424(1)\text{Å}$, $c =$

$12.883(1)\text{Å}$, $\beta = 107.53(1)^\circ$, $Z = 4$, $D_x = 1.23\text{gcm}^{-3}$, $\mu(MoK\alpha) = 0.73\text{mm}^{-1}$, $F(000) = 600$. The structure was refined to $R = 0.055$ for 1311 reflections and 183 parameters. One of the most important result was the finding that isopropyl, H(C1) and H(C7) are all in *cis* position. This work has received partial suport from CAPES, UEPG, CNPq, FAPESP and FINEP.

Progress in the refinement of the structure of KDPG-Aldolase

ARNI, R. K.

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

TULINSKY, A.

Department of Chemistry, Michigan State University, East Lansing, USA

KDPG Aldolase from the bacteria *Pseudomonas putida* occupies a central and pivotal role in the glycolytic pathway. It occurs in the Enter-Dourdoroff pathway of glycolysis (Enter and Dourdoroff, *J. Biol. Chem.*, 196, 853-862, 1952), which is a variation of the Embden-Meyerhoff pathway. It is one of the most thoroughly studied aldolases and has become a model for aldolytic catalysis. It functions via a Schiff-base mechanism and in contrast to other bacterial aldolases does not require divalent metal ions. The structure was determined at low resolution (Mavridis and Tulinsky, *J. Mol. Biol.*, 20, 4410-4416, 1976). We have collected high-resolution x-ray diffraction data and the electron density maps were improved by solvent flattening. The progress in the refinement of this structure will be presented.

Workshop: Cristalografia de Sistemas Macromoleculares (CRI, BIO, LIQ) - 20/05/93

Estruturas de Macromoléculas Biológicas por Difração de Raios-X em Monocristais

OLIVA, G.

Instituto de Física e Química de São Carlos, USP

Devido à sua capacidade singular de produzir modelos estruturais detalhados de macromoléculas, em termos das coordenadas tridimensionais de seus átomos, a Cristalografia de Proteínas tornou-se uma ferramenta central para a Enzimologia, Biologia Molecular e Imunologia. Até o presente, cerca de 500 estruturas de proteínas foram determinadas à média (2.5 Å) e alta (1.5Å) resolução e a informação estrutural acumulada até o momento é a responsável maior pelo nosso entendimento atual das bases moleculares da atividade biológica.

Quando combinada aos recentes desenvolvimentos na caracterização e produção de novas proteínas por técnicas de recombinação do DNA e engenharia genética, a Cristalografia de Proteínas, juntamente com as técnicas de predição de estruturas e computação gráfica molecular, são as ferramentas básicas para a análise racional do desenvolvimento de novas drogas e vacinas, bem como a engenharia de proteínas inéditas.

Dentro deste contexto, o Laboratório de Cristalografia do IFQSC em sua linha de pesquisas de Cristalografia de Proteínas, tem dedicado significativo esforço na cristalização de novas proteínas e a subsequente determinação estrutural destas macromoléculas biológicas.

Como resultado deste programa, vários cristais de novas proteínas foram obtidos e a determinação estrutural destas e outras macromoléculas biológicas está em andamento. Neste trabalho serão apresentados os resultados correntes na determinação estrutural das seguintes macromoléculas: Glicosamina-6-Fosfato Deaminase de *Escherichia coli*; Gliceraldeído-3-Fosfato Desidrogenase de músculo de pato e do *Tripanossoma cruzi*; Bothropstoxina da *Bothrops jaracassu* e Crotoxina de *Crotalus Durrissus Terrificus*; Lectina KM+ de *Artocarpus integrifolia*; Componente Sérica P da Amiloidose Humana.

Agradecimentos: CNPq, FAPESP, PADCT, FINEP, OMS.

Cristalografia de Materiais Fibrosos

MASCARENHAS, Y. P.

Instituto de Física e Química de São Carlos, USP

A caracterização estrutural de materiais fibrosos por difração de raios X exige uma metodologia especial devido as características próprias de tais moléculas. Em primeiro lugar devemos lembrar que essas moléculas são em geral de peso molecular extremamente alto, da ordem de milhões de daltons, e que não são em geral de constituição molecular constante podendo apresentar variantes. Por outro lado elas tem uma sub-periodicidade estrutural por se apresentarem numa conformação helicoidal característica e tendem, mesmo nos casos mais favoráveis, a se apresentarem ordenadas apenas uma direção, i.e., a direção do eixo da hélice. Assim, essas são as características principais que a análise por difração de raios X permite definir: uma cela unitária, o passo da hélice, a natureza da hélice e a periodicidade do empacotamento molecular.

Liquid crystalline phases of lipid-containing systems: structural analysis by X-ray diffraction techniques

DELACROIX, H.; GULIK, A.; GULIK-KRZYWICKI, T.; LUZZATI, V.

Centre de Genetique Moleculaire, CNRS, Laboratoire associé a l'Université P. et M. Curie, Av. de la Terrasse, 91198 Gif-sur-Yvette, France

MARIANI, P.

Istituto di Scienze Fisiche, Università di Ancona, via Ranieri, 60131 Ancona, Italy

VARGAS, R.

Centre de Genetique Moleculaire, CNRS, and Centro de Bioquímica y Bioquímica, IVIC, apdo 21827, Caracas 1020-A, Venezuela

Lipids are present at high concentration in a variety of cell organelles (membranes, chloroplast, mitochondria etc) whose physiological functions are associated with particularly ordered physical structures. However, lipids do not merely constitute passive barriers against diffusion. It is now well established in fact that lipid molecules may aggregate into a variety of structures by the interplay of parameters that often remain within the range of the physiological conditions, so that the view is now difficult to accept that non-lamellar phases are mere crystallographic oddities devoid of biological significance. However, from a technical standpoint, solving the structure of lipid-containing phases by using X-ray diffraction techniques is a peculiar exercise subject to unusual constraints. For example, the resolution of the scattering data is intrinsically low, as a consequence of the short-range disorder, while single crystals are difficult to grow, and the delicate phase equilibrium precludes the use of isomorphous replacements. With special emphasis on the X-ray diffraction techniques, we then review the structure analysis of lipid-water systems, discussing the identification of the different phases and the structural determination of lamellar, hexagonal and cubic phases. The principal methods to solve the crystallographic phase problems will be considered, and recent results will be reported. In particular, a systematic structural analysis based on X-ray diffraction experiments has permitted to identify on lipid-containing systems six different lyotropic cubic phases and to determine their structures. Three of them (Q224, Q230 and Q229, in our notation) can be described in terms of two three-dimensional networks of joined rods, mutually intertwined and unconnected. The structure of

the Q212 phase is derived from that of the Q230: one of the two networks of rods is preserved and the other is replaced by a lattice of closed micelles. Concerning the last two cubic phases, it has been recently showed that their structure consists of two types of disjointed and quasi-spherical micelles, embedded in a three-dimensional hydrocarbon (Q227) or water (Q223) matrix. 1. V. Luzzati, P. Mariani, H. Delacroix: "X-ray crystallography at macromolecular resolution: a solution of the phase problem". *Die Makromolekulare Chemie, Macromol. Symp.* 15, 1 (1988). 2. P. Mariani, V. Luzzati, H. Delacroix: "Cubic phases of lipid-containing systems: structure analysis and biological implications". *Journal of Molecular Biology*, 204, 165 (1988).

Cristalografia Inorgânica (CRI) -
20/05/93

CARACTERIZAÇÃO DE SUPER-REDES DE a-Si:H/a-Ge:H POR DIFRAÇÃO DE RAIOS-X

VELASQUEZ, E. L. Z.; FANTINI, M. C. A.
Instituto de Física, USP, São Paulo, SP

Estruturas de multicamadas amorfas de a-Si:H/a-Ge:H foram estudadas por difração de raios-X. As amostras, crescidas por descarga luminescente, com períodos entre 37Å e 232Å, foram depositadas sobre vidro e Si monocristalino para analisar o efeito da qualidade do substrato nas propriedades estruturais das multicamadas. Dos resultados deste estudo observamos que, para amostras crescidas sobre vidro com períodos grandes (entre 100Å e 200Å) e com menor número de camadas (de 30 a 60 pares), a periodicidade é mantida. Entretanto, para sistemas com períodos pequenos ($\leq 100\text{Å}$) e com número maior de pares de camadas (≥ 100 pares) há uma perda de periodicidade. Neste último caso, o tamanho da interface é comparável à espessura das bicamadas, o que se manifesta através da diminuição na intensidade difratada e do aumento na largura dos picos de difração, além do desaparecimento de reflexões de ordem superior. Outro fator que influencia a qualidade da multicamada é o tipo de substrato utilizado. Amostras crescidas sobre Si monocristalino apresentaram melhores propriedades estruturais, com respeito à periodicidade e interface abrupta. Os resultados experimentais foram comparados com simulações teóricas das intensidades difratadas. Modelos de multicamadas que consideram os casos de : interface abrupta, gaussiana, tipo seno e com variação na espessura das camadas foram aplicados para avaliar as imperfeições nas super-redes decorrentes de não uniformidade em espessura, mistura de materiais e rugosidade na interface.

INFLUÊNCIA DE SEMENTES ISOMÓRFICAS NA FORMAÇÃO DA FASE PZT OBTIDA A PARTIR DE SOLUÇÃO ORGÂNICA DE CITRATOS

ZAGHETE, M. A.; SANTOS, C. DE O. P.; VARELA,
J. A.

Instituto de Química - UNESP - Araraquara
LONGO, E.

Depto. de Química - Universidade Federal de São Carlos -
S. Carlos

Cerâmicas de PZT preparadas por solução orgânica de citratos se formam inicialmente com estrutura romboédrica, sem passar pelas fases intermediárias PZ e PT, como ocorre nas preparações por mistura convencional de óxidos. Além disso, a fase PZT pode ser observada a partir de 300° C. Verifica-se que carbonatos de Zr e Ti amorfos estão presentes nas amostras e são responsáveis pela formação inicial de PZT com estrutura romboédrica. Sementes de PZT tetragonal e romboédrico foram introduzidas nas amostras antes da calcinação, com o objetivo de verificar o seu efeito na cristalização do PZT. O método de Rietveld foi aplicado no refinamento das estruturas cristalinas presentes nas amostras, para permitir a determinação de suas proporções. A análise quantitativa foi realizada pelo método de Hill e Howard^a. Foi verificado que a sementação causa uma grande aceleração na cristalização do PZT, fazendo que o produto final seja obtido a um tempo e temperatura menores. Para o PZT sinterizado, foram analisados a superfície da pastilha e o pó (pastilha moída - que representa o volume de toda a amostra), e não foi observada diferença significativa na proporção das fases tetragonal e romboédrica do PZT.

^aR.J.Hill e C.J.Howard (1987), *J.Appl.Cryst.*,20,467-474.

INFORMAÇÕES ESTRUTURAIS DE LIGANTES DE Sn (FRAGMENTOS EM COMPLEXOS HETEROBIMETÁLICOS)

GUIMARÃES, B. G.; SPEZIALI, N. L.

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas
Gerais

SILVA, R. M.; AGUIAR JUNIOR, S. R.; DUARTE, P.
H.

Departamento de Química, Universidade Federal de Minas
Gerais

A caracterização de compostos de Sn do tipo $R_xSn(SPh)_y$ tem sido de nosso interesse, objetivando

posterior obtenção de complexos heterobimetálicos com ligação Nb-Sn. Até o presente momento, foram sintetizados três de tais compostos: $(Ph)_3Sn(SPh)$, I, $(Ph)_2Sn(SPh)_2$, II e $(Ph)_2Sn(Cl)(SPh)$, III. O estudo cristalográfico por difração de raios X, já concluído para o composto I, revelou simetria monoclinica com grupo de espaço $P2_1/c$. Os resultados obtidos para ângulos e comprimentos de ligação evidenciam a geometria tetraédrica quase regular do sítio ocupado pelo Sn, em concordância com propostas encontradas na literatura.^a Informações estruturais obtidas para II mostraram que este composto cristaliza-se em uma simetria triclínica. Valores de ângulos e de comprimentos de ligação apresentam uma maior deformação do sítio do Sn em relação a um tetraedro regular. A análise estrutural de III permitirá a comparação entre os três compostos do ponto de vista da substituição dos grupos ligados ao Sn. O estudo das diferenças estruturais existentes entre os vários compostos da família $R_xSn(SPh)_y$ - compostos I, II, III e outros - deverá permitir uma interpretação quanto ao favorecimento de determinadas reações para a obtenção de complexos heterobimetálicos.

^aR.L. Clark, M.E. Cradwick e J.I. Wardell, J. Organomet. Chem., 63, 279-285 (1974).

QUANTIZAÇÃO DE REFRAATÓRIOS SINTÉTICOS DE DOLOMITA POR DIFRAÇÃO DE RAIOS X

RIBEIRO, W. DE S.

Indústria Brasileira de Artigos Refratários - IBAR SA

SANTOS, C. DE O. P.; VARELA, J. A.

Instituto de Química - UNESP - Araraquara

LONGO, E.

Depto. de Química - Universidade Federal de São Carlos - S. Carlos

Amostras hidratadas de dolomita com 0 e 1% molar de ZrO_2 , sintetizadas e calcinadas a 1295, 1400, 1500 e 1600° C foram analisadas para se identificar e determinar a proporção das fases presentes. As análises foram realizadas fazendo uso do método de Rietveld com dados de difração de raios X^a. Radiação de cobre foi utilizada na coleta de dados, entre 15 e 80 graus (2θ), com tamanho de passo igual a 0.05 graus. CaF_2 foi utilizado como padrão interno para a determinação da proporção de amorfo. As fases identificadas foram MgO , CaO , $CaZrO_3$, $Ca(OH)_2$, e traços de Ca_3SiO_5 . As fases MgO e $CaZrO_3$ apresentaram valores próximos aos estimados pelo diagrama de equilíbrio. As fases CaO e amorfa apresentaram uma grande diferença dos estimados teoricamente, devido à formação de grande quantidade de $Ca(OH)_2$ com uma grande distribuição de tamanhos de cristalitos. A introdução de 4 fases de $Ca(OH)_2$, com diferentes larguras a meia altura melhorou sensivelmente o refinamento.

^aR. J. Hill e C. J. Howard (1987), J. Appl. Cryst., 20, 467-474.

Quasicristais e fases relacionadas no sistema Al-Cu-Fe

BALZUWEIT, K.

Departamento de Física da Universidade Federal de Minas Gerais

Os quasicristais, observados pela primeira vez em 1984 por Schechtman et al.^a provocaram quase que uma revolução na cristalografia por apresentarem elementos de simetria cristalograficamente proibidos. Os quasicristais observados apresentavam eixos de simetria cinco. Atualmente utiliza-se um espaço de dimensão seis para descrever os quasicristais, que quando projetado no espaço real (dimensão três) gera padrões que apresentam a simetria cinco. De um modo geral várias ligas metálicas apresentando a fase quasicristalina em uma pequena região dos respectivos diagramas de fase foram identificadas. No presente trabalho amostras de Al-Cu-Fe foram crescidas e caracterizadas. Neste sistema a fase quasicristalina também é observada entre diferentes fases cristalinas normais. O diagrama de fase desta liga mostra também a existência ccão entre o crescimento destas diferentes fases^b. Esta relação refletiu-se na orientação dos eixos cristalográficos das três fases vizinhas, quasicristalina, cúbica e monoclinica.

^aD. Schechtman, I. Blech, D. Gratias and J. Cahn, Phys. Rev. Lett 53, 1951 (1984).

^bK. Balzuweit, H. Meekes, G. van Tendeloo and J. de Boer, Phil. Mag. B 67 (1993).

Cristalografia Estrutural e Aplicada (CRI) - 21/05/93

ESTRUTURA DE FILMES DE SILÍCIO POROSO

TORRIANI, I. L.; TESCHKE, O.

Instituto de Física, UNICAMP

Desde a descoberta das singulares propriedades fotoluminescentes de filmes de silício poroso obtidos por via eletroquímica^a, numerosos trabalhos experimentais e teóricos foram desenvolvidos com o objetivo de descrever a estrutura e explicar as propriedades físicas deste material. O mecanismo responsável pela luminescência é ainda uma questão controversa, sendo atribuída a confinamento quântico em nanoestruturas do esqueleto de Si poroso ou à formação de compostos Si-O-H na superfície dos microporos. Nesta comunicação serão apresentados resultados do estudo de filmes obtidos a partir de substratos de Si(111) e (100), usando técnicas de difração de Raios X, microscopia eletrônica de transmissão e difração de elétrons. A fotoluminescência das amostras preparadas sobre ambos tipos de substratos

foi medida ^b, observando-se uma alta intensidade para as amostras com orientação {111}. Nossos resultados permitem concluir que o esqueleto de Si poroso possui características estruturais diferentes para as duas orientações estudadas e estas características podem estar correlacionadas com as propriedades fotoluminescentes do material.

^aL.T. Canham, Appl. Phys. Lett. 57,1046 (1990)

^bL.Tessler, F. Alvarez e O. Teschke, Appl. Phys. Lett., no prelo (1993)

An attempt of self-consistent evaluation of the Borrmann effect on a microscopic dipole-plane level.

KELLER, W. A.; VASCONCELOS, D. S. DE

Instituto de Física da Universidade Federal da Bahia Rua Caetano Moura, 123, Federação

Two way approach, the analytical and numerical, is assumed to simulate a non-absorbing transfer of energy along the reflecting dipole-planes.

In the analytical approach, a synthesis of three states of dipole vibrations is analyzed. The two of these states represent perfectly reflecting walls of a wave-guide and, the third main one, a free movement of EM waves inside the crystal space, allocated by the solution proposed. In both states a matrix solution, given in the form of the Chebyshev polynomials, is taken as a basis for calculations.

In the numerical approach, a kind of forced solution is looked for in which two EM waves of equal amplitude and unknown phase are incident on periodically spaced dipole planes at the same angle of incidence θ . The subject of investigation is to find an appropriate number of dipole planes which will result the $\pi/2$ -phase shift between the reflected and incident plane waves on both sides of the model. This looked for phase shift should guarantee an existence of the two perfect reflection states, representing a wave-guide model of the crystal and at the same time a periodicity of the looked for solution should appear, representing an effect otherwise known as Pendell osung.

ESPELHOS DE RAIOS X PARA USO COM LUZ SÍNCROTRON

VICENTIN, F. C.; BERNARDES, L. A.; TOLENTINO, H.; CRAIEVICH, A.

Laboratório Nacional de Luz Síncrotron

Os espelhos são elementos muito utilizados em linhas de luz síncrotron, desempenhando funções de deflexão, focalização e filtragem do feixe. Nosso propósito é de obter um espelho com curvatura variável cuja mecânica seja bastante simples - o que reduziria custos e simplificaria o alinhamento - para a região de raio X de 4 a 12 KeV. A idéia neste espelho é que o próprio peso já imponha a curvatura necessária, sendo que apenas pe-

quenos ajustes seriam realizados pelo sistema curvador. As dimensões do espelho ($80 \times 10 \text{ cm}^2$) foram escolhidas em função desta condição e dos parâmetros envolvidos nas estações experimentais. A curva de refletividade para o vidro foi determinada usando-se radiação $\text{CuK}\alpha$ (8KeV), sendo o valor obtido para o ângulo crítico igual a $(3,8 \pm 0,3)$ mrad e para a refletividade em 2,7 mrad igual a 87%. A curvatura produzida pelo próprio peso do espelho deu origem a uma imagem de dimensão vertical da ordem de 330μ para um feixe incidente de 1,5mm. Este tamanho de imagem é limitado pelas aberrações e pela não uniformidade do espelho. Depositamos sobre o vidro uma camada de ouro e determinamos, novamente, a curva de refletividade e a focalização para o espelho com cobertura de ouro. Para a deposição do ouro construímos uma evaporadora dedicada a este fim. Estamos projetando, também, a câmara que alojará o espelho, com os sistemas mecânicos de encurvamento e movimentação.

Simulação de Defeitos em Estruturas Homogêneas e Heterogêneas em Espalhamento Auto-consistente de Raios-X

VASCONCELOS, D. S. DE; KELLER, W. A.

Instituto de Física da Universidade Federal da Bahia Rua Caetano Moura, 123, Federação

A importância cada vez maior das estruturas heterogêneas, tipo GaAs, na indústria eletrônica gerou também um maior interesse nos métodos de investigação. A teoria geral da difração de raios-x, tanto do ponto de vista cinemático como do ponto de vista dinâmico, apresenta dificuldades para tratar esses tipos de estruturas, como observou Bartels(1). Esta dificuldade, entretanto, foi superada pela proposta de tratamento auto-consistente (2). Nossa preocupação atual seria investigar, através do formalismo auto-consistente, a influência de dois tipos de defeitos esperados nos perfis de difração. Um deles diz respeito à não periodicidade bem como o aumento da distância interplanar, das amostras finas de substâncias homogêneas em função do afrouxamento das ligações planares. O outro diz respeito ao aspecto heterogêneo das multicamadas. Com a junção de substâncias de diferentes parâmetros de redes é razoável esperar variação suave da distância interplanar de uma substância para outra. Estão sendo testados diferentes modelos de variação da distância interplanar, como por exemplo, dos tipos aleatório ou gradual (exponencial). Os resultados já obtidos mostram a grande sensibilidade dos perfis de difração à influência dos defeitos na periodicidade da rede cristalina, como o alargamento dos picos principal e secundários, bem como a mudança na posição dos picos secundários.

(1) Acta Cryst. (1986). A42,539-545

(2) Modified Bragg Law for Heterolayers Structure.

**ANÁLISE POR DIFRAÇÃO DE RAIOS-X
DE FILMES FINOS ELETROCRÔMICOS DE
ÓXIDO DE NÍQUEL**

FARIA, I. C.; GORENSTEIN, A.

Instituto de Física, UNICAMP, Campinas, SP

CARDONA, P. S. P.; FANTINI, M. C. A.

Instituto de Física, USP, São Paulo, SP

As propriedades estruturais de filmes finos eletrocrômicos de óxido de níquel foram investigadas por difração de raios-X. Os filmes, com espessura em torno de 1000Å, foram depositados por "sputtering" reativo sobre vidro, recoberto com um óxido semicondutor transparente. Além das análises por difração de raios-X, as amostras foram caracterizadas por voltametria cíclica, acompanhada de medidas transmitância, tensão mecânica e microbalança a cristal de quartzo. As medidas foram efetuadas para amostras em estado claro e escuro, sendo que a intercalação eletroquímica ocorreu em soluções aquosas (0,1M) de LiOH, NaOH, KOH e CsOH. As variações nas propriedades ópticas e estruturais dos diferentes filmes foram relacionadas, com base no grau de cristalinidade dos filmes e orientação cristalográfica preferencial dos grãos. A intercalação em soluções diferentes mostrou que o parâmetro de rede varia de acordo com o parâmetro de tensão mecânica.

**Crystal Structure Determination of the
non-covalent Complexes of Human and Bovine
Prothrombin Fragment 2 with Human PPACK
Thrombin**

ARNI, R. K.

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

PADMANABHAN, K.; PADMANABHAN, K. P.;

WU, T. P.

*Department of Chemistry, Michigan State University, East
Lansing, USA*

Prothrombin, the most abundant vitamin K dependent protein involved in blood coagulation is synthesized in the liver as a pre-propeptide of 622 amino acids. The N-terminal region of prothrombin preceding prothrombin 2 can be divided into two homologous segments with molecular weights of 23 000D (F1) and 14 000D (F2). F1 and F2 possess the kringle motif and display a high degree of structural and sequential homology. The N-terminus of F1 contains the unusual amino acid carboxyglutamate whose function is to bind phospholipids. The F1 kringle itself possesses no determined function. F2 has been observed to bind Ca²⁺ ions and to the heavy chain of Factor Va. We have crystallized and solved the structures of the non-covalent complexes of human and bovine prothrombin F2 with human PPACK thrombin (Arni et al., *Biochemistry*, 1993, in the press). The results of the crystallization, structure determination and modelling of the entire prothrombin structure will be presented.

FÍSICA ESTATÍSTICA E FENÔMENOS CRÍTICOS

Workshop: Transições de Fase e Fenômenos Críticos (EST, MMM) - 19/05/93

Transições de Fase em Sistemas com Autoassociação

AMARAL, L. Q.

Instituto de Física da USP

São revistas teorias e modelos para transições de fase envolvendo o estado líquido cristalino. A teoria de Landau¹ prevê transições do estado isotrópico (I) para o estado nemático^(N), mas sem informações sobre o nível microscópico. Outras teorias² preveem estas transições a partir de objetos definidos com forma anisotrópica. Cálculos com objetos esferocilíndricos³ permitem prever transições I-N-esmetico(E)- colunar(C). Estas teorias em geral se aplicam a cristais líquidos termotrópicos, em que o objeto básico é uma molécula anisotrópica. Enfatizamos neste trabalho teorias recentes^{4,5} que levam em conta o processo de autoassociação, característico de cristais líquidos liotrópicos, em que o objeto básico varia com a concentração relativa soluto/solvente. É possível assim compreender a ocorrência da transição I-hexagonal (H), sem a passagem pelas fases N e E, devido à polidispersão dos objetos. Essas previsões teóricas⁵ são comparadas com resultados experimentais obtidos recentemente⁶ em sistemas liotrópicos, focalizando-se a transição I-H num sistema binário e a transição I-N num sistema ternário (anfílico/água/decanol)

Referências

- 1- E.F. Gramsbergen, L. Longa and W. de Jeu, Phys. Rep 135, 195(1986).
- 2- C.S. Shih and R. Alben, J. Chem.Phys. 57, 3055(1972). R. Alben, Phys. Rev. Let. 30, 778(1973). R. Alben, J.Chem. Phys. 59, 4299(1973) J.P.Straley, Phys.Rev. A10, 1881(1974). Y. Rabin, W.E. McMullen, W.M. Gelbart, Mol.Cryst. Liq.Cryst. 89, 67(1982).
- 3- A. Poniewierski and R. Holyst, Phys.Rev.Let. 61, 2461(1988); J.A.C. Veerman and D. Frenkel, Phys.Rev. A41, 3237(1990); A. Poniewierski and T.J. Sluckin, Phys.Rev. A43, 6837(1991).
- 4- W.M. Gelbart, W.E. McMullen and A. Ben-Schaul, J.Physique 46, 1137(1985). W.E. McMullen, W.M. Gelbart and A. Ben-Schaul, J.Chem. Phys. 82, 5616(1985).
- 5- R. Hentschke, M.P. Taylor, J. Herzfeld, Phys.Rev. A40, 1678(1989); Phys.Rev.Let. 62, 800(1989) R. Hentschke and J. Herzfeld, Phys.Rev. A44, 1148(1991).
- 6- L.Q. Amaral, Liq.Crystals 7, 877(1990) L.Q. Amaral, A. Gulik, R. Itri and P. Mariani, Phys.Rev. A46, 3548(1992) R. Itri and L.Q. Amaral, Phys.Rev.E 1993 (in the press).

MAGNETIZAÇÃO REMANENTE EM ANTIFERROMAGNETOS DESORDENADOS A CAMPOS MAGNÉTICOS MUITO BAIXOS $Mn_{1-x}Zn_xF_2$, $K_2Fe_{1-x}In_xCl_5 \cdot H_2O$ E

$K_2Fe(Cl_{1-x}Br_x)_5 \cdot H_2O$

BEZERRA, C. C.; PADUAN-FILHO, A.

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

FRIES, T.; SHAPIRA, Y.

Department of Physics, Tufts University, Medford MA, USA

PALACIO, F.

Instituto de Ciencia de Materiales de Aragon CSIC, Universidad de Zaragoza, España

A magnetização em monocristais dos antiferromagnetos desordenados de baixa anisotropia $Mn_{1-x}Zn_xF_2$, $K_2Fe_{1-x}In_xCl_5 \cdot H_2O$ E $K_2Fe(Cl_{1-x}Br_x)_5 \cdot H_2O$ foi estudada em campos magnéticos a partir de $H < 10$ mili Oersteds aplicados ao longo do eixo de fácil magnetização. Em todos os casos foi observado que abaixo da temperatura de Néel ocorre o aparecimento de um momento magnético remanente M_r , ao longo da direção da fácil magnetização. A magnitude de M_r cresce rapidamente com o campo axial H para valores inferiores a 100 mili Oe, saturando para campos de poucos décimos de Oe. A magnetização remanente M_r é governada pelo campo axial presente quando a amostra é esfriada através da temperatura de transição T_n . Os dados sugerem que para um campo axial H nulo

seria obtida uma magnetização remanente nula. Quando a amostra é esfriada no campo magnético terrestre ela adquire um momento determinado pelo componente axial desse campo. As curvas de magnetização em função da temperatura, abaixo de T_n , não são afetadas por variações no valor de H ou mesmo pela mudança de sua direção, desde que este não exceda alguns Oe. Foi observado no sistema $K_2Fe_{1-x}In_xCl_5 \cdot H_2O$ que o valor de saturação de M_r aumenta com a concentração x . Para a amostra com $x = 0.15$ a $4.2 K$, M_r de saturação é de 0.12 emu/g o que corresponde a 0.2% da magnetização de saturação calculada para a rede antiferromagnética. Para o $Mn_{1-x}Zn_xF_2$ foi estudada uma amostra onde $x = 0.50$, aqui a magnetização de saturação M_r corresponde a 0.005 emu/g a $4.2 K$ ou seja tipicamente 20 vezes menor que no composto de Fe. As medidas realizadas no sistema $K_2Fe(Cl_{1-x}Br_x)_5 \cdot H_2O$ com $x = 0.25$ indicam a presença de um efeito análogo, porém duas ordens de grandeza menor que o observado no $K_2Fe(Cl_{1-x}Br_x)_5 \cdot H_2O$. A origem do momento remanente em campos tão baixos ($< 0.1 Oe$) não é conhecida, mas a sua existência em sistemas com sítios magnéticos desordenados é pela primeira vez aqui estabelecida. A observação do efeito em dois sistemas antiferromagnéticos diluídos com características estruturais e de interação distintas apontam para a sua universalidade. O comportamento de escala e o índice crítico β associado à magnetização remanente são discutidos.

COMPORTAMENTO CRÍTICO EM MAGNETOS ALEATÓRIOS

MONTENEGRO, F. C.

Departamento de Física - UFPE

Investigações recentes marcaram um considerável progresso no entendimento do comportamento crítico de sistemas magnéticos aleatórios. Notáveis controvérsias foram sancionadas em favor da existência de uma transição de fase em $d = 3$ no modelo Ising com campo aleatório (RFIM), o mesmo ocorrendo com vidros de spin Ising (ISG) tridimensionais. Muito embora dúvidas ainda persistam quanto a natureza de ambas transições. Novos desafios incluem o entendimento de fenômenos relacionados à presença de campos aleatórios fortes e à proximidade da concentração de percolação (x_p) em antiferromagnetos (AF) aleatoriamente diluídos¹. A *campo nulo*, o comportamento magnético dos compostos (AF) anisotrópicos ($d = 3$) $Fe_xZn_{1-x}F_2$ e $Mn_xZn_{1-x}F_2$ é o do modelo Ising com interações de troca aleatórias (REIM). Em altas concentrações de íons magnéticos ($x > 0.4$), a aplicação de um campo uniforme provoca uma escala de cruzamento REIM-RFIM na temperatura crítica (T_c) bem como na de equilíbrio (T_{eq}), i.e. $T_N - T_{c,eq}(H) \sim H^{2/\phi}$, onde $\phi = 1.4$ é o expoente universal que governa o cruzamento REIM-RFIM. Para $x_p < x < 0.4$, ($x_p = 0.24$) a presença de campos aleatórios fortes, faz com que lei de escala para a linha de equilíbrio $T_{eq}(H)$ passe a ser governada pelo valor $\phi = 3.4$. Esta mudança de curvatura marca a origem de uma fase vítrea na região superior de diagrama (H, T), em uma amostra com $x = 0.31$. O processo evolui para uma fase ISG dominando todo o diagrama (H, T) para $x \leq x_p$. No composto $Mn_xZn_{1-x}F_2$, efeitos ainda mais dramáticos ocorrem a caminho da percolação. Para $x = 0.35$, a linha crítica $T_c(H)$ passa a obedecer uma lei de escala com $\phi = 3.4$, mesmo em baixos campos. Este último fato descarta a ocorrência do cruzamento REIM-RFIM, pondo em dúvida até mesmo a própria existência de ordem AF de longo alcance, em $Mn_xZn_{1-x}F_2$, para $x_p < x \leq 0.4$.

F.C. Montenegro, A.R. King, V. Jaccarino, S-J. Han and D.P. Belanger, *Phys. Rev. B* **44**, 2155 (1991). D.P. Belanger and A.P. Young, *J. Magn. Magn. Mater* **100**, 272 (1991).

PHASE TRANSITIONS IN A DYNAMICAL SYSTEM

VASCONCELOS, G. L.

The James Franck Institute, The University of Chicago, Chicago, IL 60637

I discuss recent work^a done in Chicago on the dynamics of a spring-block model with nonlinear friction. The model, which was originally introduced to simulate earthquake dynamics^b, has three independent velocity scales that divide the behavior of the system into distinct regimes. Over much of the parameter space the system appears to be self-organized to what is reminiscent of a first-order phase transition: there is *hysteresis* as the system stores energy until a large rupture is *nucleated*. As the friction nonlinearity is varied the system undergoes a continuous (critical) transition to a regime where a global event is continually occurring. The nature of the "ordered state" in

the limit of vanishing nonlinearity will also be briefly discussed. It is suggested that the critical behavior exhibited by the model might be relevant to real systems such as avalanches in granular material, avalanche breakdown in semiconductors, and motion of flux lines in superconductors.

^aG. Vasconcelos, M. Sousa Vieira, and S. Nagel, Phys. Rev. **A44**, R7869 (1991); Physica **A191**, 69 (1992); Physical Review E (in press)

^bJ. Carlson and J. Langer, Phys. Rev. Lett. **62**, 2632 (1989); Phys. Rev. A **40**, 6470 (1989); and references therein

Transições de Fase Fora do Equilíbrio, Monte Carlo Quântico e Redes Neurais (EST) - 19/05/93

TRANSIÇÕES DE FASE FORA DO EQUILÍBRIO EM UM MODELO ESTOCÁSTICO PARA A REAÇÃO DE OXIDAÇÃO DO MONÓXIDO DE CARBONO.

TOMÉ, T.

Universidade de São Paulo

Um dos modelos microscópicos mais simples que descrevem a reação $CO + O \rightarrow CO_2$ sobre uma superfície catalítica é o modelo ZGB (proposto por Ziff, Gulari e Barshad). Este apresenta transição de primeira ordem para um estado absorvente de CO (rede completamente preenchida por CO). Incluímos no modelo o processo de desadsorção do CO a uma dada taxa k . Neste caso a fase absorvente de CO não está mais presente e podemos ter uma fase rica em CO e uma fase pobre em CO . Simulações de Monte Carlo mostram que a transição é ainda de primeira ordem para valores baixos de k , mas se torna contínua para um valor crítico k_c . Nossas análises indicam que a transição pertence à classe de universalidade do modelo de Ising.

Energia do estado fundamental da cadeia antiferromagnética de Heisenberg pelo método de Monte Carlo.

OLIVEIRA, M. J. DE

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

Apresentamos um método de Monte Carlo para o cálculo do maior autovalor e das propriedades do principal autovetor de uma matriz com elementos não negativos. O método pode ser usado para obter o estado fundamental e a energia do estado fundamental de qualquer hamiltoniano que possa ser transformado num operador cujos elementos de matriz sejam não negativos. Esse é o caso do modelo antiferromagnético quântico de Heisenberg definido numa rede bipartida. O método é aplicado ao caso de uma cadeia antiferromagnética de Heisenberg de spin-1/2. A energia do estado fundamental e o gap de energia singleto-tripletto são calculados para cadeias de até 48 sítios. Os resul-

tados são comparados com valores obtidos pelo método da potência para cadeias pequenas.

SOLUÇÃO DE QUEBRA DE SIMETRIA DE RÉPLICA PARA A CAPACIDADE DE ARMAZENAGEM ÓTIMA EM REDES NEURAIS

ERICHSEN JR., R.

Univ. Católica de Leuven, Bélgica

THEUMANN, W. K.

UFRGS

Estuda-se a capacidade de armazenagem ótima em redes neurais com interações sinápticas contínuas mediante o esquema de quebra de simetria de réplica de Parisi, permitindo uma fração mínima de erros de armazenagem regida pelo algoritmo de Gardner e Derrida. Além da solução simétrica achada por Gardner e Derrida para a capacidade de armazenagem acima da linha crítica de armazenagem sem erros, aparece continuamente uma solução assimétrica no primeiro passo do esquema de Parisi. Embora esta solução esteja associada a uma fração mínima de erros (energia do estado fundamental do sistema) maior que da solução simétrica, um argumento de compatibilidade termodinâmica (Elderfield and Sherrington) para vidros de spin sugere que a solução de quebra de simetria de réplica é a solução mais estável. O resultado indica que o espaço das interações sinápticas é não-conexo, em acordo com uma possibilidade sugerida por Gardner e Derrida. (R. Erichsen Jr and W.K. Theumann, J.Phys.A:Math. Gen.26(1993)L61-L68)

REDES DE NEURÔNIOS COM MULTI-INTERAÇÕES

ARENZON, J. J.; ALMEIDA, R. M. C. DE; IGLESIAS, J. R.

Instituto de Física - UFRGS

PENNA, T. J. P.; OLIVEIRA, P. M. C. DE

Instituto de Física - UFF

Consideramos dois modelos distintos de multi-interações entre neurônios considerando-os como correções ao modelo de Hopfield ^a. Um deles é uma generalização imediata do modelo de Hopfield original ao passo que o outro inclui misturas de memórias. Propriedades de equilíbrio são analisadas utilizando o método das réplicas e comparadas com simulações numéricas.

Também são estudadas as propriedades dinâmicas dos dois modelos: tamanho das bacias de atração e tempos médios de convergência. Embora um dos modelos apresente um comportamento em muito similar ao modelo de Hopfield original, o outro se comporta de um modo muito mais rico: dependendo da temperatura e da intensidade das conexões de quarta ordem, o sistema pode apresentar duas fases distintas de recuperação separadas por um 'gap'. Um algoritmo ótimo de aprendizado é proposto que aumenta sensivelmente a capacidade de armazenamento do modelo.

• J.J. Arenzon *et al*, 1993 *Physica A*

Propriedades Termodinâmicas, Transições de Fase e Fenômenos Críticos A (EST) - 19/05/93

Modelo de Ising com interações competitivas em presença de Campo Externo: Um ponto de Lifshitz Tricrítico
BARBOSA, M. C. B.
UFRGS

Nós consideramos um sistema de spins do tipo Ising em uma rede cúbica com interações competitivas entre primeiros e segundos vizinhos isotrópicas tanto ao longo dos eixos do cubo como ao longo das diagonais das faces. Analisamos o diagrama de fases deste sistema na presença de um campo externo H . Na ausência de flutuações, o diagrama de fases pouco difere do diagrama obtido para o modelo ANNNI na presença de campo, ou seja, há uma transição de segunda ordem entre uma fase paramagnética e uma fase modulada (magnetização não nula para vetor de onda $q_c/neq0$) que se torna contínua em uma linha de pontos tricríticos que acabam no ponto de Lifshitz. Na presença de flutuações, o cenário muda totalmente. A campo externo $H < H_c$, a transição para a fase modulada é de primeira ordem. Para valores maiores do campo externo, a transição passa a contínua em um ponto tricrítico. Variando-se os parâmetros da teoria, obtém-se uma linha de pontos tricríticos tais que $H \rightarrow 0$ para $q_c \rightarrow 0$, indicando que o ponto de Lifshitz é em verdade, um ponto de Lifshitz tricrítico.

ESTUDO DO DIAGRAMA DE FASES DO MODELO BEG BIDIMENSIONAL VIA DECAIMENTO EXPONENCIAL DA FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO

BARRETO, F. C. S.; FERREIRA, S. J.

Dept. Física, UFMG

BRAGA, G. A.

Dept. Matemática, UFMG

O modelo BEG (Blume-Emery-Griffiths) é definido pelo Hamiltoniano:

$$[-\beta\mathcal{H} = \mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \mathcal{K} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^E S_j^E + \mathcal{D} \sum_i S_i^E]$$

onde $S_i = \pm 1, 0$ é a variável de spin associada a cada sítio de uma rede quadrada e $\langle i, j \rangle$ indica um par de sítios vizinhos próximos. Através de desigualdades do tipo Griffiths para as funções correlação, obtemos decaimento exponencial para a função correlação de dois pontos e daí cotas superiores para a temperatura crítica associada com uma transição de fase de segunda ordem entre as fases ferromagnética (ordenada) e a desordenada.

MODELO DE BLUME-EMERY-GRIFFITHS A CINCO PARÂMETRO

RESENDE, H. F. V. DE

Universidade Federal de Ouro Preto - UFOP

CARIDE, O.; MAGALHÃES, A. C. N.; TSALLIS, C.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF

O modelo de Blume-Emery-Griffiths (BEG) foi proposto para o estudo da transição λ e separação de fase numa mistura He^3-He^4 . Este modelo tem sido amplamente utilizado para o estudo de fenômenos críticos em sistemas físicos tais como fluidos multicomponentes, magnetos e ligas ternárias. Neste trabalho estudamos o modelo de BEG completo com interações competitivas na rede quadrada (utilizando uma célula auto-dual) via grupo de renormalização no espaço real. O hamiltoniano completo possui um termo de interação de troca bilinear (k), um biquadrático (w), um tipo campo cristalino (m) e dois termos de interação ímpar tipo campo magnético (h, Δ). Como caso particular, todas as propriedades críticas do modelo a três parâmetros (k, w, m) são obtidas.

• M. Blume, V.J. Emery and R.B. Griffiths, *Physical Review A* 3, 1071 (1971).

Transições orientacionais em um modelo de gás de rede.

TSAI, S. H.; SALINAS, S. R. A.

Instituto de Física - USP

Visando oferecer uma explicação qualitativa para as transições de fases que ocorrem em cristais moleculares, estudamos o diagrama de fases associado ao hamiltoniano

ano

$$\mathcal{H} = -\epsilon \sum_{(i,j)} t_i t_j - J \sum_{(i,j)} t_i t_j \sigma_i \sigma_j - \mu \sum_{i=1}^V t_i,$$

onde $t_i = 0, 1$ e $\sigma_i = \pm 1$, para todas as V células de uma rede cristalina. As variáveis t_i representam um gás de rede, submetido a um potencial químico μ . As variáveis σ_i denotam graus orientacionais de liberdade. Os parâmetros ϵ e J são estritamente positivos, mas μ é negativo. Obtivemos os diagramas de fases de uma versão de Curie-Weiss, de longo alcance, desse hamiltoniano modelo. Os mesmos resultados também foram obtidos através de um mapeamento discreto, não-linear, numa árvore de Cayley, no limite de coordenação infinita. No momento estamos substituindo as variáveis de Ising por variáveis de Potts a fim de permitir um número maior de graus orientacionais de liberdade.

MAGNETIZAÇÃO DO MODELO DE HEISENBERG ANISOTRÓPICO EM DUAS DIMENSÕES.

REINEHR, E.; FIGUEIREDO, W.
DEPARTAMENTO DE FÍSICA, UFSC

Aplicamos o método das funções de Green, na aproximação de fases aleatórias para estudar o comportamento da magnetização em função da temperatura para um sistema de spins em duas dimensões descrito por uma Hamiltoniana de Heisenberg anisotrópica. Variando-se convenientemente o parâmetro de anisotropia do sistema podemos considerar uma variedade de modelos desde o modelo de Ising até o modelo de Heisenberg isotrópico. Obtivemos as expressões assintóticas para a magnetização nas regiões de baixas temperaturas e nas vizinhanças da temperatura crítica do sistema. Nossos resultados são comparados com aqueles obtidos através de outros métodos, em particular com o grupo de renormalização no espaço real. Além disso pudemos comparar nossos resultados com dados experimentais recentes. Mostramos que a interpretação dada para o decrescimento da magnetização com a temperatura não contradiz os resultados usuais de ondas de spin.

Singularidade da magnetização de superfície em um ferromagneto de Heisenberg anisotrópico

MORAES, J. N. B. DE; FIGUEIREDO, W.
Departamento de Física, UFSC

É estudada a singularidade da magnetização de superfície na temperatura crítica de volume usando-se o formalismo das funções de Green. Em nossos cálculos utilizamos a aproximação de fases aleatórias e a aproximação de que a partir do terceiro plano a magnetização torna-se igual àquela do volume. Adotamos um

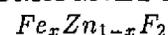
modelo de Heisenberg puro para o volume de uma rede semi-infinita e descrevemos a superfície por meio de um modelo de Heisenberg anisotrópico; o parâmetro de anisotropia ϵ_s permite considerar uma sequência de modelos desde Heisenberg puro até Ising. Mostramos que a inclinação da magnetização de superfície é descontínua na temperatura crítica de volume e que a descontinuidade aumenta significativamente quando o parâmetro de anisotropia da superfície varia de Ising para Heisenberg. Este resultado poderia indicar que o acoplamento de troca na superfície do Gd é altamente anisotrópico.

Singularidades na região de um ponto crítico terminal :aplicação na transição de fase isomórfica

HELENA, E. L. DE S.; BARBOSA, M. C. B.
UFRGS

Certos sistemas físicos apresentam uma transição de primeira ordem entre duas fases ferroelétricas seguida de uma transição a contínua entre uma das fases ferroelétrica e uma fase paraelétrica. As características da transição de segunda ordem estão bem estabelecidas na literatura e, neste caso, sabe-se que uma linha crítica separa as fases ordenada e desordenada. Pouca atenção, no entanto, tem sido dada à transição de primeira ordem. Com o objetivo de achar singularidades na fronteira entre estas duas fases "ordenadas", nós estudamos a transição isomórfica. Para tanto, usamos uma energia livre de Landau com um único parâmetro de ordem, com termos até oitava ordem. Primeiro, obtemos o diagrama de fases completo, onde a transição de primeira ordem (isomórfica) "corta" a linha contínua em um ponto: o ponto terminal. Após, mostramos que dentro de uma aproximação de campo médio, a fronteira de fases, na vizinhança do ponto terminal, exhibe as singularidades relacionadas às da linha crítica e já preditas anteriormente por teorias de "scaling". Calculamos os expoentes críticos e razões universais associadas a estas singularidades.

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE ANTIFERROMAGNETOS DILUÍDOS:



RAPOSO, E. P.; COUTINHO-FILHO, M. D.;
MONTENEGRO, F. C.

Departamento de Física - UFPE

O FeF_2 é um cristal BCC com forte anisotropia Ising de íon único. As interações de exchange entre os sítios magnéticos são de curto alcance e têm caráter antiferro, com pequena frustração. Experimentos têm demonstrado que a diluição randômica de sítios magnéticos ($Fe_x Zn_{1-x} F_2$) acarreta, em baixas temperaturas e na presença de campo magnético externo, comportamentos do tipo Campo Aleatório ($x = 48\%$), bem como uma

fase Vidro de Spin ($x = 25\%$) numa concentração ligeiramente acima da percolação ($x_p = 24\%$). Utilizando um modelo de campo médio sítio-a-sítio, simulamos numericamente o $Fe_xZn_{1-x}F_2$ e observamos presença de percolação, irreversibilidades ZFC-FC, efeitos de frustração magnética, dentre outros aspectos.

CÁLCULOS DE GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO NO ESPAÇO DOS MOMENTOS PARA UM MODELO DE ISING COM SPINS MISTOS.

QUADROS, S. G. DE A.; SALINAS, S. R. DE A.
IFUSP

Aplicamos a transformação integral de Hubbard a um modelo de Ising de spins mistos (spin-1/2-spin-1), em uma rede hipercúbica, com anisotropia de campo cristalino. Os resultados de um cálculo de grupo de renormalização no espaço dos momentos, em primeira ordem em $\epsilon = 4 - d$, mostram a presença de um ponto tricrítico, confirmando estudo anterior através da técnica de Migdal-Kadanoff no espaço real. A existência do ponto tricrítico já havia sido sugerida por estudos de campo médio e por uma solução na rede de Bethe. A dimensão crítica obtida para existência de transição de primeira ordem é $d_c = 2.204\dots$, com a técnica de Migdal-Kadanoff, e $d_c = 2.5$, segundo o cálculo na rede de Bethe.

DIAGRAMA DE FASE GLOBAL DE UM MODELO DE SPIN 1 COM DESORDEM ALEATÓRIA

OSÓRIO, R.

Universidade de Brasília

FROYEN, S.

Natl. Renewable Energy Lab., Golden, Colorado

Recentemente,^a uma extensão do modelo de Ising diluído foi proposto para ligas semicondutoras GaAs/Ge. Supõe-se que uma das espécies (Ge) se distribui aleatoriamente na rede diamante, enquanto as outras duas (Ga e As) se distribuem de acordo com a termodinâmica determinada por interações que correspondem a um modelo Blume-Emery-Griffiths generalizado, com um hamiltoniano de primeiros vizinhos $\mathcal{H} = J \sum S_i S_j + K \sum S_i^2 S_j^2 + L \sum (S_i^2 S_j + S_i S_j^2)$ (com $S_i = 0$ para Ge, ± 1 para Ga, As).

A desordem "congelada" introduzida nesta teoria conduz a um diagrama de fases^b que inclui uma discontinuidade no estado fundamental. Isto gera uma reentrância genuína (em contraste com algumas outras que aparecem em outros modelos devido a aproximações do tipo campo médio) da superfície crítica que separa as fases zinc-blende e diamante. O diagrama de fases global deste modelo será apresentado e sua aplicabilidade a ligas GaAs/Ge será discutida.

^aB.-L. Gu, J. Ni, and J.-L. Zhu, Phys. Rev. B 45, 4071 (1992).

^bR. Osório and S. Froyen, Phys. Rev. B 47, 1889 (1993).

TRANSIÇÃO DE 1ª ORDEM NO MODELO HEISENBERG COM INTERAÇÃO DE OZVALOSHINSKII-MORIYA

SOUSA, J. R. DE; FITTIPALDI, I. P.; ALBUQUERQUE, D. F. DE

Departamento de Física - UFPE

Recentemente o modelo Heisenberg com interação de Dzyaloshinskii-Moriya (HDM) tem sido estudado por muitos autores. Esta anisotropia é útil no surgimento da fase vidro de spin de vários materiais. Neste trabalho estudaremos o modelo HDM com o exchange constante, logo a fase vidro de spin não aparecerá. Utilizaremos o método do grupo de renormalização na aproximação do campo médio (MFRG), e a identificação do ponto tricrítico (PTC) no diagrama de fase é feito com análise do expoente crítico ν . O PTC corresponde a $\nu = \infty$. Trabalhos anteriores^{a, b} foi feito no referente modelo (HDM) e a existência de PTC foi confirmado.

^aF. Lacerda, J. Ricardo de Sousa e I.P. Fittipaldi, 1992 resumo apresentado no X EFNNE, Recife

^bJ. Ricardo de Sousa, D.F. de Albuquerque e I.P. Fittipaldi, 1992 resumo apresentado no X EFNNE, Recife

MÍNIMOS E MÁXIMOS LOCAIS DE ENERGIA

RODRIGUES, E. S.

USP-IFQSC

OLIVEIRA, P. M. C. DE

UFF

Considere uma rede quadrada de $L \times L$ sítios. Cada sítio da rede pode ter dois estados magnéticos distintos, spin *up* ou *down*, e cada sítio interage somente com os primeiros vizinhos. A energia desse sistema vem dada pela Hamiltoniana de Ising:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j$$

onde S_i representa o estado magnético do átomo i ($+1$ ou -1) e $\langle ij \rangle$ é um par de sítios vizinhos.

Sorteamos uma distribuição de ligações ferromagnéticas ($+J$) e antiferromagnéticas ($-J$) com concentrações p e $1 - p$, respectivamente. Define-se o espaço de estados $\{\vec{S}\}$, de dimensão $N = L^2$. Cada estado \vec{S} corresponde a uma dada configuração dos N spins. Dois estados vizinhos diferem pela orientação de um único spin. Consideremos o gráfico da energia *versus* \vec{S} , chamado "landscape".

Caminhando no "landscape" $\{\vec{S}\}$, sempre de um estado para um de seus N vizinhos, definimos duas regras dinâmicas distintas:

I) Aumentamos a energia até atingir um valor máximo, e guardamos esse valor.

II) Diminuímos a energia até atingir um valor mínimo, e guardamos esse valor.

Repete-se os passos I e II iterativamente.

Montamos dois histogramas, um para energias máximas e outro para energias mínimas que nos dá o seguinte comportamento. Ao aumentarmos o tamanho da rede, as curvas de máximos e mínimos de energia diminuem sua largura e o valor médio tende a um limite. Apresentamos resultados extrapolados ao limite termodinâmico $L \rightarrow \infty$.

KINKS EM UMA CADEIA ANTIFERROMAGNETICA

COSTA, B. V. DA; GOUVEA, M. E. DE; PIRES, A. S.
UFMG

É bem conhecido que o modelo de Heisenberg unidimensional anisotrópico com um campo externo aplicado pode apresentar excitações não lineares do tipo kink. Contudo grande parte dos trabalhos apresentados é restrito à região de campo fraco. Nesta região a equação de sine-Gordon (sG) é considerada como uma primeira aproximação. Uma análise quantitativa requer considerar desvios do comportamento sG principalmente devido a componentes fora do plano. Para campos magnéticos fortes a situação não é muito clara. Além de um kink sG existem dois outros tipos de kinks. Um deles foi primeiro identificado por simulação numérica (R.W.Gerling, M.Standinger and D.P.Landau, J.Mag. and Mag.Mat. 54-57(1986)819). A segunda excitação tem energia muito alta de modo que não pode ser observada em experimentos numéricos e não é relevante para as propriedades do modelo. Nos apresentamos um estudo numérico destas excitações no limite XY em toda a região de campo mostrando que existe um campo crítico além do qual a configuração mais estável é um estado spin flop à qual demos o nome de bolha.

SIMULAÇÕES MICROCANÔNICAS DO MODELO DE ISING DILUÍDO: PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS E DIAGRAMA DE FASE

ALCÂNTARA, A.; MOREIRA, F. G. B.
Departamento de Física
SOUSA, A. J. F.

Departamento de Física - UFPE e Departamento de Física e Matemática - UFPE

Neste trabalho apresentamos os resultados de simulações microcanônicas do modelo de Ising com diluição temperada de sítios, em redes cúbicas $32 \times 32 \times 32$ e concentrações de átomos magnéticos $p \geq 0.4$. Utilizamos a técnica de simulação microcanônica em múltiplas amostras (SMMA). O método SMMA permite a simulação simultânea de 32 amostras do sistema, todas na mesma energia. Obtemos a dependência da magne-

tização e da energia com a concentração e a temperatura do sistema. O calor específico é obtido a partir da derivada das curvas energia *versus* temperatura. Determinamos a temperatura crítica, $T_c(p)$, através da localização do máximo do calor específico para uma dada concentração p . Nossos resultados para a curva crítica no plano temperatura crítica *versus* concentração concordam bem com os obtidos recentemente através de simulação Monte Carlo.

Apoio: CNPq e FINEP

CRITICALIDADE DO MODELO DE HEISENBERG ANISOTRÓPICO EM UMA REDE HIERÁRQUICA AUTO-DUAL.

SOUZA, A. M. C. DE

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

O diagrama de fases do modelo de Heisenberg quântico anisotrópico de spin $\frac{1}{2}$ em uma rede hierárquica auto-dual (que aproxima bem a rede quadrada) é calculado através de um grupo de renormalização no espaço real. No caso ferromagnético encontramos duas fases: paramagnética e ferromagnética. Nossos resultados concordam com os já obtidos na literatura para a rede da ponte de Wheatstone. Estendemos os resultados para o caso antiferromagnético e verificamos a existência das fases paramagnética e antiferromagnética. Mostramos que T_c se anula para valores do parâmetro de anisotropia $\Delta < \Delta^* \simeq 0.399$. Na região $0.375 < \Delta \leq \Delta^*$, observamos o efeito de re-entrância, onde existe fase ordenada a temperaturas relativamente altas mas não a baixas temperaturas. Todos os pontos fixos são repostos exatas para a rede quadrada. A criticalidade do caso ferromagnético é do tipo Ising para $0 < \Delta < 1$. O mesmo não é verdade para o caso antiferromagnético que para baixos valores de anisotropia a ordem é destruída por flutuações quânticas.

Antiferromagneto de Ising decorado com cadeias de spin $S=1$ e $S=3/2$.

BARRETO, F. C. S.

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais.

SANTOS, R. J. V. DOS

Departamento de Física, Universidade Federal de Alagoas.
COUTINHO, S.

Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco.

Investigamos o diagrama de fases do modelo de Ising antiferromagnético na rede quadrada decorado com cadeias de spins 1 e $3/2$. Os spins em cada cadeia estão acoplados por interações bilineares e biquadráticas entre vizinhos mais próximos e sujeitos à ação de um campo de anisotropia local. Os elementos decorados estão acoplados com os sítios da rede através de interações de intercâmbio ferromagnéticas. Esta de-

coração introduz frustração na rede antiferromagnética original. Os diagramas de fase do modelo foram obtidos analiticamente através do mapeamento do modelo decorado com o modelo de Ising ordinário na rede quadrada. Consideramos tres situações: decoração homogênea, axial e diluída de forma recozida. Para cada caso, os diagramas do estado fundamental e da temperatura contra o parâmetro de competição, e contra a concentração (no caso diluído) foram estudados em função dos diversos parâmetros de energia do modelo e da natureza dos spin decoradores. A morfologia e diversas propriedades do diagrama de fases foram analisadas em decorrência da presença dos elementos decoradores no sistema.

Decorated Ising model*

COSTA**, M. A.; GONÇALVES, L. L.

Universidade Federal do Ceará, Departamento de Física

The 2d Ising model decorated with Ising spins of magnitude s is considered. The bonds are decorated with n spins such that the energy associated to the bond ij is given by:

$$H_{ij} = -J\sigma_i\sigma_j - t_{ij} \left[\sum_{\ell=1}^n \bar{J}\tau_{\ell}(\sigma_i + \sigma_j) - \sum_{\ell=1}^n J'\tau_{\ell}\tau_{\ell+1} \right],$$

where $\sigma = \pm 1$, $\tau = 2s+1, 2s, \dots, -2s, -2s-1$, $t_{ij} = 0, 1$ is a random variable with an annealed distribution and $\sigma_{\ell+n} = \sigma_{\ell}$. The model is exactly solved by mapping it onto an effective 2d Ising model. The phase diagram is determined and results are presented for $s = 1, 3/2$, and correspond to an extension of the work of dos Santos et al^a. A discussion is also presented for the case $n \rightarrow \infty$.

*Work partially financed by Brazilian Agencies CNPq and Finep.

**On leave from Depto. de Física, UFPI, Teresina, Pi, Brazil.

^aR.J.V. dos Santos, F.C. Sá Barreto and S. Coutinho, J. Phys. A23, 2563(1990).

Propriedades Termodinâmicas, Transições de Fase e Fenômenos Críticos B (EST) - 19/05/93

ATUALIZAÇÕES SEQUENCIAL E PARALELA EM DIVERSAS REDES DE BRAVAIS BIDIMENSIONAIS

MARIZ, A. M.; COSTA, F. A. DA; NOBRE, F. D.
UFRN

As atualizações sequencial e paralela em simulações de Monte Carlo para sistemas tipo Ising, conduzem a distribuições de equilíbrio bastante distintas ^a. Todavia, para redes hipercúbicas, algumas propriedades termodinâmicas devem apresentar o mesmo comportamento em ambos os tipos de atualizações ^b. No entanto, para o caso da rede triangular, a temperatura crítica, a qual pode ser estimada através da técnica de propagação de danos, mostrou discrepância na atualização paralela ^c. No presente trabalho investigamos a implementação das atualizações sequencial e paralela em simulações de Monte Carlo para o modelo de Ising em diversas redes de Bravais bidimensionais. Analizamos, em particular, quais propriedades termodinâmicas são sensíveis ao tipo de atualização utilizada.

^aP. Peretto, Biol. Cybern. 50, 51(1984).

^bA.U. Neumann and B. Derrida, J. Phys. France 49, 1647(1988).

^cF.D. Nobre, A.M. Mariz and E.S. Souza, Phys. Rev. Lett. 69, 13(1992).

Uma nova família de algoritmos de Monte Carlo para simular sistemas de spin na criticalidade.

BOUABCI, M. B.; CARNEIRO, C. E. I.
USP

Simulações numéricas de sistemas próximos de uma transição de fase de segunda ordem são intrinsecamente difíceis. Na criticalidade o comprimento de correlação ξ diverge e em princípio deveríamos simular sistemas muito grandes, com tamanhos característicos $L \gg \xi$, para podermos descrever corretamente suas propriedades. Esta dificuldade pode ser contornada através de uma análise cuidadosa de tamanho finito (finite size). Em simulações de Monte Carlo geram-se configurações do sistema a partir de uma configuração inicial arbitrária. Cada configuração é gerada a partir da anterior e o seu conjunto forma uma cadeia de Markov. Na criticalidade as configurações da cadeia estão fortemente correlacionadas e é necessário gerar um grande número de configurações até obtermos uma configuração estatisticamente independente da inicial. Este problema é conhecido como desaceleração crítica

(critical slowing down). Recentemente surgiram dois novos algoritmos, propostos por Swendsen, Wang e por Wolff que praticamente eliminam a desaceleração crítica. Estes algoritmos, ao contrário do algoritmo tradicional de Metropolis, mudam simultaneamente o valor de um grande número de variáveis do sistema, descorrelacionando mais rapidamente as configurações da cadeia de Markov. Os dois algoritmos citados foram desenvolvidos para o modelo de Potts, do qual o modelo de Ising com spin $\frac{1}{2}$ é um caso particular. Mostramos neste trabalho que o algoritmo de Wolff na sua forma usual é um membro de uma família mais geral de algoritmos, e que nesta forma generalizada ele pode ser aplicado a sistemas com spin arbitrário. Usamos estes novos algoritmos para estudar os modelos de Ising e Blume Capel próximos da criticalidade.

A TWO-PARAMETER VARIATIONAL APPROACH FOR THE FREE ENERGY

FERREIRA, J. R. F.

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais

Recently several alternative variational approaches have been proposed to allow approximate calculations of thermodynamic functions (free and internal energies, specific heat, susceptibility, equations of state, etc.) for a great variety of systems (Ising ferromagnets, pure and random magnets, etc.). They systematically improved the results obtained through Bogolyubov Variational Principle. In previous papers a one-parameter dependent Hamiltonian was used. In the present work a two-parameter auxiliary hamiltonian is used to generate an upper bound for the exact free energy. This attempt should preserve the thermodynamic consistency between thermodynamic and statistical mechanics calculations. There are also short-range order effects above the approximate critical temperature. The present approach should improve numerical results and better qualitative behaviour is expected.

ACERCA DAS EXPANSÕES EM CUMULANTES NO MÉTODO CORRELATIVO NÃO-SIMETRIZADO DO CAMPO AUTOCONSISTENTE PARA CRISTAIS COM FORTE ANARMONICIDADE

FARIA, A. C. DE; RABELO, J. N. T.; PASCUAL, M. F.; ZUBOV, V. I.
UFG

O método exposto ^a, ^b permite incluir a contribuição fundamental dos termos anarmônicos principais na aproximação zero. A teoria de perturbações é usada para corrigir esta contribuição e incluir anarmonicidades de ordens superiores. As séries da teoria de perturbações podem ser obtidas em forma de expansões

de cumulantes. Toma-se a aproximação zero com forte anarmonicidade até quarta ordem. Como parâmetro pequeno λ , toma-se a razão entre a média quadrática dos deslocamentos térmicos dos átomos e o quadrado do parâmetro da rede. Analisa-se a série da teoria de perturbações para a energia livre de um modelo unidimensional com termos até λ^4 . A equação de estado é obtida e resolvida e as propriedades termodinâmicas são calculadas. A análise dos resultados mostra que a precisão suficiente é alcançada com as primeiras ordens da teoria de perturbações e com a inclusão de termos anarmônicos não superiores à sexta ordem.

Viatcheslav I. Zubov (Apoio financeiro: CNPq.)

^aV.I.Zubov. Phys.stat.sol.(b) 87,385,88,43 (1978)

^bV.I. Zubov and Montserrat F. Pascual, Izv. Vuzov, Fizika, Nöstrike 6, 67(1984), em russo.

GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO POR CAMPO MÉDIO E ESCALA DE TAMANHO FINITO

SILVA, J. K. L. DA; NOGUEIRA, R.; ANTONIO PLASCAK, J. A.

UFMG

DROZ, M.

University of Geneva

Propomos um grupo de renormalização no espaço real baseado somente em idéias de campo médio e hipótese de escala de tamanho finito. Ele é parecido com o esquema do Grupo de Renormalização de Campo Médio no que se refere a utilização do parâmetro de ordem do sistema. Porém a grandeza física que fornece a relação de recorrência entre os parâmetros do sistema coincide com o coeficiente do Método da Anomalia Coerente. Desta forma, contrário ao Grupo de Renormalização de Campo Médio, não existe o problema devido aos expoentes de superfície. Este método está sendo aplicado aos problemas de percolação dirigida de sítios em duas dimensões e ao modelo de Ising de spin 1/2. Em ambos os casos bons valores para a temperatura, concentração e expoentes críticos estão sendo obtidos.

ORIENTATIONALLY DISORDERED SOLID MOLECULAR HYDROGEN. MODELS AND RESULTS.

KOKSHENEV, V. B.

UFOP

A pseudo-spin approach to an ortho-para mixture of solid molecular Hydrogen is proposed to describe its dynamical and thermodynamical properties in a region of absence of long-range orientational order. The unitary transformation of the real initial Hamiltonian to the coordinate system of local ordering axes permits us to reduce effectively the pseudo-spin space dimension

from five to two. The Hamiltonian obtained describes the orientational degrees of freedom of ortho-para Hydrogen by means of pseudo-spins interacting through an isotropic (in average) exchanged-type interaction along with a local anisotropic-type field which is conjugated to the local order parameter. While the value of orientational polarization is calculated and compared with experimental data of NMR absorption signal, various models of orientationally disordered Hydrogen earlier introduced for describing quadrupolar glass states are considered and discussed here. As a result, models with short range interaction revealed certain advantages over those with infinite-range interaction. The role of thermodynamic fluctuations of a crystalline field in the process of freezing of short range order is also revealed. A number of experimental results such as obtained from NMR line shape, Monte Carlo simulations, spin-lattice relaxation, thermodynamical measurements, etc., are overviewed. V.B.Kokshenev, Orientationally Disordered Hydrogen. Freezing of Short-Range Order, Phys. Stat. Sol.(b), v.164, p.83 (1991).

CONTRIBUIÇÃO AO ESTUDO DE MODELOS DE SÓLIDOS ANARMÔNICOS DE DIFERENTES TIPOS

ZUBOV, V. I.; RABELO, J. N. T.

UFG

Nos últimos anos tem havido um grande interesse pelos quasicristais (um novo tipo de sólido, diferente do cristalino e do amorfo), inclusive pelos seus modelos unidimensionais ^a. Entretanto, no estudo das propriedades atômicas dos quasicristais, se tem limitado à aproximação harmônica. Com base no Método Não-Simetrizado do Campo Autoconsistente ^b, obtemos equações para um sistema unidimensional de diferentes átomos, cada um dos quais interage com seus primeiros vizinhos por meio de potenciais arbitrários de pares atômicos. Estas equações são aplicáveis a modelos unidimensionais anarmônicos de cristais monoatômicos e poliatômicos (tanto cristais perfeitos, como também cristais com impurezas e com adsorção), clusters, sólidos amorfos e quasicristais. Com estas equações, é possível calcular as distâncias entre os átomos, as amplitudes efetivas de suas vibrações anarmônicas e as funções termodinâmicas para os modelos indicados. Obtivemos soluções para alguns casos.

Viatcheslav I. Zubov (Apoio financeiro: CNPq.)

^aJ.A. Ashraff And R.B. Stikcombe, Phys. Rev. B39, 2670(1989).

^bV.I. Zubov, and J.N. Teixeira Rabelo, Int. J. Mod. Phys. B6, (1992).

MODELO SIMPLES DE CRISTAL ANARMÔNICO COM FORTE ANISOTROPIA

RABELO, J. N. T.; LOBO, M. P.; ZUBOV, V. I.

UFG

Estudamos as propriedades termodinâmicas de um modelo de cristal anarmônico com rede hexagonal simples, com interação entre primeiros vizinhos. Com o Método Correlativo Não-Simetrizado do Campo Autoconsistente ^a foram obtidas a energia livre e as equações de estado na aproximação de fraca anarmonicidade. Calculamos a dependência dos parâmetros da rede com respeito à temperatura, os coeficientes de dilatação linear e volumétrica, as capacidades térmicas isocórica e isobárica. Estas foram obtidas em forma de expansões em potências de temperatura. Na aproximação usada, são levadas em consideração a primeira e a segunda ordens. Isto em particular conduz a um desvio da lei de Dulong e Petit. Os resultados são comparados com dados conhecidos [1] para os cristais cúbicos. Analisa-se a influência da anisotropia sobre as propriedades termodinâmicas dos cristais anarmônicos, inclusive sobre o coeficiente volumétrico de dilatação térmica e sobre as capacidades térmicas.

Viatcheslav I. Zubov (Apoio financeiro: CNPq.)

^aV.I. Zubov, I.V. Namontov and N.P. Tretyakov, Int. J. Mod. Phys. B6, 197(1992).

THE POLYNOMIAL RING STRUCTURE OF BALABAN-FEDERBUSH AVERAGING PROCESSES

TORRIANI, H. H.

IMECC, UNICAMP

We prove that Balaban-Federbush averaging processes (or BF means) from a small length scale to a large one can be factored through any intermediate length scale. As a consequence of the stability of those processes under arbitrary compositions, magnitudes in statistical mechanics can be averaged in a coherent fashion. Our proof of this fundamental coherence property of BF means rests on the "condensation" of tensor products of certain centrosymmetric matrices. That property can be described by the existence of a ring isomorphism from the set of all equivalence classes of BF means onto the polynomial ring in one indeterminate with integral coefficients. A general framework for renormalization group methods, based on inverse families of actions and of functions, is also mentioned.

Grupo de Renormalização por Escalonamento de Tamanhos Finitos

F. NETO, J. M. DE; OLIVEIRA, S. M. DE;
OLIVEIRA, P. M. C. DE
Universidade Federal Fluminense

Testamos um novo Grupo de Renormalização no Espaço Real⁽¹⁾ que depende apenas da hipótese de Fisher. A diferença básica entre este Grupo e os demais está no fato de que as grandezas que são preservadas na transformação de escala realmente não dependem do tamanho da rede, isto é, se escalam com L^0 onde L é o tamanho da rede. Os demais Grupos de Renormalização normalmente preservam funções que são somas parciais de pesos de Boltzmann, sem contudo demonstrar que estas independem dos tamanhos das redes utilizadas. O Grupo com o qual trabalhamos foi anteriormente testado⁽¹⁾ em ferromagnetos de Ising puros e com campo magnético uniforme aplicado, com excelentes resultados. O que fizemos foi adaptar este Grupo a sistemas de Ising diluídos e a antiferromagnetos. Verificamos que em duas dimensões nossos resultados coincidem com os que se obtêm utilizando outros métodos, como por exemplo, o da Transmissividade, e se mostram cada vez melhores à medida que se aumenta o tamanho da rede. No caso do ferromagneto de Ising diluído em três dimensões, encontramos o ponto fixo semi-instável na fronteira Concentração versus Temperatura, concordando com a não universalidade observada experimentalmente⁽²⁾ e corroborada por uns poucos trabalhos de simulação⁽³⁾. Verificamos também que este nosso resultado não viola o critério de Harris.

(1) P. M. C. de Oliveira, *Europhys. Lett.* **20**, 621 (1992)

(2) N. Rosov et al, *Phys. Rev. B* **37**, 3265 (1988)

(3) H. O. Heuer, *Europhys. Lett.* **12**, 551 (1990)

Modelos Generalizados de Gauge e Cálculo de Expoentes Críticos

DOMINGOS, J. V.
Universidade Católica de Petrópolis
DORIA, R. M.
Universidade Católica de Petrópolis

A introdução de mais campos transformando-se sob um mesmo grupo de simetria gera os chamados Modelos Generalizados de Gauge. Significa propor dentro de um grupo qualquer transformações polinomiais dependentes de um mesmo parâmetro de gauge. Um resultado destes modelos é o aparecimento de parâmetros elementares, a partir dos quais, variáveis físicas são determinadas. Então, massas físicas e constantes de acoplamento aparecem dependendo de variáveis mais primitivas. Outra característica é que diferentes parametrizações de campos podem ser utilizadas para se efetuar os cálculos. Propõe-se então um estudo com o caso escalar, o modelo $\lambda\phi^4$ generalizado, através da um estudo do Grupo de Renormalização. Uma expressão para os expoentes críticos é obtida em função destes

parâmetros elementares.

ACERCA DAS CORRELAÇÕES INTERATOMICAS EM UM MODELO BIDIMENSIONAL DE CRISTAL ANARMONICO COM REDE QUADRADA

PASCUAL, M. F.; ZUBOV, V. I.
UFG

O Método Correlativo Não-Simetrizado do Campo Autoconsistente^{a, b} é empregado para o cálculo das correlações quadráticas dos deslocamentos dos átomos em um modelo bidimensional de cristal anarmônico com rede quadrada. Na segunda ordem da teoria de perturbações, para uma rede com forças de curto alcance, são diferentes de zero as correlações entre os primeiros, segundos e terceiros vizinhos. Os diagramas correspondentes são construídos. Calcula-se os momentos correlativos tanto para os deslocamentos dos átomos ao longo da linha que os une, quanto também para os deslocamentos perpendiculares a essa linha. Estes últimos são totalmente determinados pela anarmonicidade das vibrações dos átomos. A dependência destes momentos com respeito à temperatura é estudada. Os resultados são comparados com dados anteriormente obtidos para o modelo unidimensional. Ao contrário deste, no modelo bidimensional a segunda ordem de teoria de perturbações permite levar em consideração as correlações em uma rede quadrada não só entre primeiro e segundos vizinhos, mas também entre terceiros vizinhos.

Viatcheslav I. Zubov (Apoio financeiro: CNPq.)

^aV.I. Zubov, *Int J. Mod. Phys. B6*, 367(1992)

^bV.I. Zubov, M.F. Pascual and J.N. Teixeira Rabelo, *Phys. stat. sol.(b)* **175**, nöstrike 2(1993).

EQUAÇÕES DE ESTADO DE CRISTAIS COM ANARMONICIDADE FORTE ATÉ SEXTA ORDEM

CAPARICA, A. A.; ZUBOV, V. I.
UFG

Na aproximação de 6ª ordem, a equação integral não linear do campo auto-consistente não simétrico^{a, b} se reduz a um sistema de duas equações transcendentais. A resolução desse sistema leva a duas funções de dois argumentos adimensionais, dependentes da temperatura e dos coeficientes de força de segunda, quarta e sexta ordem. Essas funções estão presentes na equação de estado, na energia interna e em outros parâmetros característicos dos cristais. Foram estudadas as propriedades dessas funções. A equação de estado foi calculada num amplo intervalo de variação da temperatura. Demonstrou-se que, com a diminuição da temperatura, desaparecem inicialmente as anarmonicidades de ordens

superiores e, depois, as de ordens mais baixas, sucessivamente. Considerou-se também um método de obtenção de correções para a aproximação de ordem zero, que possibilitam uma descrição mais precisa dos efeitos anarmônicos.

Viatcheslav I. Zubov (Apoio financeiro: CNPq.)

^aV.I.Zubov. *Phys.stat.sol.(b)* **87,385,88,43** (1978)

^bV.I.Zubov e A.A. Caparica. *Izvestia Vuzov, Física*, n° 8,77 (1979)

APROXIMAÇÃO DE PARES PARA O MODELO DE BLUME-CAPEL

LARA, D. P.; PLASCAK, J. A.
UFMG

O diagrama de fases do modelo de Blume-Capel, no plano temperatura-campo cristalino, quando estudado via campo medio usual, apresenta pontos tricriticos no caso de spin inteiro e ausencia de pontos tricriticos no caso de spin semi-inteiro. Em ambos os casos, entretanto, observa-se linhas de transição de primeira ordem entre fases ordenadas a baixas temperaturas, as quais terminam em pontos criticos isolados. Estamos estudando este modelo na aproximação de pares que é melhor que campo medio usual e pelo menos equivalente à aproximação de Bethe para o modelo de Ising de spin meio. Neste caso, as transições entre fases ordenadas a baixas temperaturas permanecem qualitativamente as mesmas. Porém, para spin semi-inteiro, a transição para a fase desordenada, que antes era só de segunda ordem, parece apresentar agora uma riqueza maior: resultados preliminares mostram que além de transições de primeira ordem com a presença de um ponto tricritico, tem-se também um ponto critico terminal e um novo ponto critico isolado.

UM ESTUDO DO MÉTODO DE MONTE CARLO DE CAMPO MÉDIO

HENRIQUES, E. F.; SALINAS, S. R. A.; HENRIQUES, V. B.; LOPEZ, L. F.
IFUSP

Utilizamos o método de Monte Carlo de campo médio, recentemente proposto por Netz e Berker, para estudar o comportamento termo- dinâmico dos modelos de Ising Ferromagnético e de Blume-Capel sobre redes quadradas. Este Método mistura conceitos de amos- tragen aleatória (Monte Carlo) com equações de campo médio usu- ais. Seus autores afirmam que o método pode permitir representa- ções de diagramas de fase com amos- tragens muito menores do que as usadas nas simulações de Monte Carlo convencionais, elimi- nando certas características indesejáveis da aplicação das equa- ções de campo médio. Porém, na aplicação aos modelos aqui estuda- dos, não observamos uma tendência clara de redução de amostragens em relação a simulações con- vencionais. Além disso, os resulta- dos que obtivemos são muito semelhantes aos de aproximações do tipo Bethe-Peierls. Essas objeções devem ser somadas ao fato de não possuímos uma explicação clara do mecanismo do método de Netz e Berker, dada a dificuldade de estudar a dinâmica estocástica em que ele se baseia.

Workshop: Sistemas Eletrônicos Fortemente Correlacionados (EST, MMM) - 20/05/93

Quantum Interference in Luttinger Liquids

BALSEIRO, C. A.

Centro Atómico Bariloche and Instituto Balseiro, 8400 S. C. de Bariloche, Argentina

The Aharonov-Bohm (AB) effect in one-dimensional Luttinger liquids is discussed. A circuit with a ring threaded by a magnetic field and two leads is considered. Electrons in the ring are described by a Luttinger model. The transmittance of the system is evaluated using exact results for the one-particle propagators in the ring. The effect of interactions and impurities is discussed. It is shown that the electron-electron interaction produces anomalies in the AB effect which consist on a high frequency oscillation of the transmittance as a function of flux. It is also shown that impurities do not destroy this effect. The results are interpreted in terms of charge and spin separation in the Luttinger liquid.

Emparelhamento local e CDW no modelo de Hubbard atrativo

SANTOS, R. R. DOS

Departamento de Física, PUC/Rio

O emparelhamento local (ou no espaço real) de elétrons tem sido usado para explicar diversos fenômenos como comportamentos não-convencionais em alguns materiais supercondutores, a existência de ondas de densidade de carga (CDW) em sistemas de banda estreita, as propriedades dos chamados centros de U -negativo em semicondutores, condutividade em polímeros, e supercondutividade de férmions pesados. A formação destes pares se deve a uma interação efetiva, que é atrativa e de curto alcance. Esta, por sua vez, pode ser explicada por mecanismos microscópicos como o acoplamento de elétrons a fônons locais ou a graus de liberdade internos (excitons, plasmons, etc). Após uma breve revisão destes mecanismos, discutiremos o modelo de Hubbard atrativo que, supõe-se, contém os ingredientes básicos para descrever estes sistemas. Assim, investigamos o emparelhamento supercondutor local, a formação de estados CDW, e a presença de um *spin gap* no modelo a duas e tres dimensões, em termos da ocupação (ρ) e do acoplamento (U). Em particular, examinamos o papel da frustração na rede triangular e mostramos, no limite de acoplamento forte, que não é possível a presença de um estado CDW, para qualquer valor da ocupação fermiônica; esta previsão é também verificada para acoplamentos intermediários através de simulações de Monte-Carlo. A fase supercondutora é robusta e T_c é máxima na situação de banda semi-cheia, ao contrário do que ocorre na rede quadrada; a presença do *spin gap* também não é afetada pela frustração. Na rede cúbica simples obtemos o diagrama de fases $T_c \times \rho$, para diversos valores de U , e discutimos o *crossover* entre os regimes BCS e de emparelhamento local.

FERRIMAGNETISMO E TRANSIÇÃO METAL-ISOLANTE EM CADEIAS POLIMÉRICAS[†]

COUTINHO-FILHO, M. D.

Departamento de Física - UFPE

SANTOS, M. C. DOS

Inst. Física Gleb Wataghin, UNICAMP

Resultados Hartree-Fock, Monte-Carlo Quântico e Diagonalização Exata do Modelo de Hubbard em uma cadeia losangular são apresentadas com intuito de descrever um possível estado fundamental ferromagnético não-saturado em cadeias poliméricas. Na aproximação *tight-binding* a característica peculiar do modelo é a presença de duas bandas dispersivas e uma banda localizada central contendo 1/3 dos estados de uma partícula. Resultados do potencial químico, magnetização e energia total do sistema em função do número médio de elétrons por sítio e dos parâmetros do modelo são apresentados. Verifica-se que o sistema é ferrimagnético para densidades eletrônicas próximas do valor de banda semi-cheia, $n = 1$, situação em que o sistema exibe uma transição metal isolante para qualquer valor de repulsão Coulombiana intra-sítio. Mostra-se também que, quando o nível localizado não está semi-cheio e completamente polarizado, o sistema exibe separação de fases ou uma estrutura magnética mais complexa. Para densidades suficientemente distantes de $n = 1$ o sistema é paramagnético como usualmente encontrado em cadeias unidimensionais. Possíveis realizações destas previsões, em polímeros reais, são discutidos.

[†]Trabalho em colaboração com A. Murilo S. Macêdo e Claudio A. Macêdo - UFSE.

Universalidade e Leis de Escala (EST)

- 20/05/93

**EXPOENTES CRÍTICOS PARA
RANDOM-WALKS E SELF-AVOIDING
WALKS DIRECIONADOS EM FRACTAIS.**

REIS, F. D. A. A.; RIERA, R.

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

Obtemos expansões em série para a função geratriz e para a distância início-fim de random-walks (RW) e self-avoiding walks direcionados (DSAW) em Sierpinski

Carpets até ordens 16 e 22, respectivamente. A partir delas, a fugacidade crítica e os expoentes críticos γ e ν são obtidos com boa precisão. Todos os resultados prévios para estes sistemas vêm de simulações em redes finitas. Os resultados para ν_{RW} permitem a análise de teorias do tipo Flory para o comportamento de ν_{SAW} em fractais. Nossos resultados preliminares indicam $\nu_{RW} \approx 1/2$ para todas as redes. O valor de ν_{\perp} para o DSAW em fractais tem sido objeto de debate na literatura. Nossos resultados preliminares indicam ν_{\perp} próximo do valor 1/2 da rede quadrada.

**POLÍMEROS: CONFIGURAÇÃO
AUTO-SIMILAR NO PROBLEMA DE
ADSORÇÃO.**

IZZO, D.

Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Consideramos uma solução polimérica diluída na presença de uma superfície fortemente atrativa e concentramo-nos na região central limitada pelo comprimento de Kuhn a e pelo comprimento de correlação ξ . Nessa região, a concentração de monômeros ϕ como função de z obedece uma lei de escala, o que equivale à uma configuração auto-similar das cadeias em solução. A lei de escala porém não é suficiente para caracterizar completamente o sistema, uma vez que a lei de decaimento deve ser função do peso molecular das cadeias N . Nesse trabalho, obtivemos numericamente uma expressão da forma $\phi_N(z) = \frac{\phi_N(0)}{1 + c_N z^{4/3}}$. O resultado principal desse trabalho é a determinação do expoente α que descreve a dependência de $\phi_N(0)$ com N . Nossos resultados são relevantes pois permitem uma determinação mais precisa da lei de decaimento que pode ser testada experimentalmente.

**Defect Theory of Solid-Liquid Transition and
Interface**

FERRAZ, A.

*Centro Internacional de Física da Matéria Condensada
(CIFMC) Universidade de Brasília*

The dislocation theory of crystal melting was discussed semi-empirically very early on by Kuhlman-Wilsdorf (Kuhlman-Wilsdorf 1965) among others. She applied the model for several metals and obtained melting temperatures in good agreement with experiment. Subsequent works focussed on more mathematical formulations of these ideas (Edwards and Warner 1979; Kleinert 1982). The goal is to develop a framework model for the solid-liquid transition, with the main physical ingredients, which develops a discontinuous phase transition. Our own work follows this last category. We discuss the solid-liquid transition and interface produced by the presence of a large number of dislocations in Bravais lattice systems. To do this we start up introducing an effective field theory model for dislocation loops in an elastic medium. Considering a simplifying geometric set-up we show that the phase transition which emerges of our model is of correctly first-order nature. From there we move on to discuss the solid-liquid planar interface. We calculate the interface field solution, analyse its stability and we conclude reviewing further extensions of the model and related work which is now in progress.

**ASPECTOS TOPOLÓGICOS E
GEOMÉTRICOS NA DEFORMAÇÃO
AXIAL DE SISTEMAS COM SIMETRIA
ESFÉRICA**

GOMES, M. A. DE F.; MELO, G. DA S. V. DE
Departamento de Física - UFPE

O estudo das propriedades plásticas/geométricas de sistemas com simetria global esférica submetidos a forças axiais é de grande interesse tanto do ponto de vista teórico quanto de aplicações. Neste trabalho examinamos a dependência da expansão radial, r , de sistemas esféricos de diferentes topologias, quando submetidos a compressões axiais, com deformações relativas δ variando no intervalo $0 \leq \delta \leq 0,9$. Para sistemas com dimensões topológicas 1, 2 e 3, r escala com δ como $r \sim (1-\delta)^{-\xi}$, para $\delta < \delta_0$ e $r \sim (1-\delta)^{-\xi'}$, para $\delta > \delta_0$. O expoente ξ depende da dimensão topológica como $\xi = 0,35d^{-1/2}$, mas o expoente ξ' tem um comportamento diferente e aparentemente depende da dimensão fractal do sistema. A transição que ocorre em $\delta = \delta_0$ é pouco sensível à topologia ($\delta_0 \approx 0,6$ para todos os casos estudados) e tem certas semelhanças formais com a transição de perda de rigidez em espuma bidimensional desordenada, recentemente estudada, ou com a transição de 2ª ordem no comprimento diferencial de mono-cristais observada por Bridgman em 1949.

*Fluidos Superiônicos, Superfícies,
Interfaces, Polímeros e Percolação
(EST) - 20/05/93*

**SIMULAÇÃO DE LÍQUIDOS
MOLECULARES POR MONTE CARLO
REVERSO**

SILVA, F. L. B. DA; SOUZA, A. R. DE
Universidade Estadual Paulista
QUINTALE JUNIOR, C.; DEGRÈVE, L.
Universidade de São Paulo

A grande importância da água e das soluções aquosas torna necessário estudos de suas propriedades, as quais continuam sendo um dos principais problemas para físicos-químicos teóricos ou experimentalistas. O sucesso das investigações dos sistemas aquosos depende de bons modelos, isto é de potenciais intermoleculares bem elaborados e da comparação do comportamento destes sistemas com experimentos. Usando os resultados de [1], onde foi utilizado o modelo TIP4P para a água, geramos configurações de pontos no espaço, e comparamos as funções de distribuição radial correspondentes com as obtidas por [1]. A técnica de Monte Carlo reverso foi usada para tal e conseqüentemente

testada para uso em líquidos moleculares. Esta técnica permitiu obtermos reprodução satisfatória das funções de distribuição experimentais. Os resultados obtidos confirmam assim que a técnica de Monte Carlo reverso tem boas perspectivas de uso nas análises estruturais de líquidos moleculares.

[1] C. Quintale Jr., L. Degève, " The angular-radial distribution function in liquid water ", J.Molec.Struct., Theochem, no prelo
CNPq - CAPES

O FLUÍDO CLÁSSICO NO ESQUEMA STLS.

SILVEIRA, H. V. DA; STUART FILHO, N.

DF-UFSCar

O objetivo deste trabalho consiste em estudar o fluido clássico cuja interação entre partículas consiste de um potencial repulsivo caroço-duro e uma cauda atrativa. Neste problema determinamos as propriedades termodinâmicas, o fator de estrutura, a função de correlação dos pares e a relação de dispersão, considerando primeiro o potencial de caroço-duro e em seguida verificar qual o efeito sobre estas propriedades quando adicionamos uma cauda atrativa. A adição da cauda atrativa ao potencial de caroço-duro permite simular o potencial Lennard-Jones. O único dado de entrada é o potencial despido. As propriedades físicas mencionadas são determinadas em termos da fração de empacotamento, a qual esta' relacionada com a densidade. Os nossos resultados são comparados aos experimentos de dinâmica molecular e aos resultados da teoria de Percus-Yevick. Alguns resultados preliminares tem mostrado que o modelo proposto é útil para estudar fluidos clássicos principalmente para baixas densidades.

CRESCIMENTO POR DEPOSIÇÃO GAUSSIANA E DIFUSÃO.

MACHADO, R. F.; MOREIRA, J. G.

UFMG

Simulamos o crescimento de superfícies por deposição de partículas em um substrato, com difusão, em $d = 2$ e $d = 3$. O processo de deposição é aleatório e segue uma distribuição gaussiana com dispersão σ . Analisamos a rugosidade que é definida como

$$\omega(L, t) = \frac{1}{L^{d-1}} \sum_{\vec{r}} (h(\vec{r}, t) - \bar{h}(t))^2,$$

onde $\bar{h}(t)$ é a altura média no tempo t , e o somatório é sobre t distribuição uniforme, a rugosidade obedece a relação de escala: $f(x)$ é tal que $f(x) \sim x^\beta$ para $x \ll 1$ e $f(x) = \text{constante}$ para $x \gg 1$. Os expoentes α e β indicam os tipos de correlações presentes no processo de crescimento. Investigamos o comportamento de $\omega(L, t)$ para vários valores de σ/L .

Observamos que em $d = 2$ para uma faixa de

valores de σ/L ($\sigma/L > 2.0$) os expoentes obtidos concordam com os da deposição uniforme. Para outra faixa de valores ($\sigma/L < 2.0$), a rugosidade apresenta três comportamentos diferentes: i) $\omega \sim t^\beta$ ($t < t_{min}$), ii) $\omega \sim t^\gamma$ ($t_{min} < t < t_{max}$), iii) $\omega \sim L^\lambda$ ($t \ll t_{max}$). Os expoentes γ e λ bem como t_{min} e t_{max} dependem de σ/L .

Em $d = 3$, o comportamento anterior é observado para $\sigma/L < 0.1$. Para $\sigma/L > 0.1$, a rugosidade cresce como $\log \bar{h}$ (como na deposição uniforme) até um certo tempo e então passa a oscilar em torno de um certo valor dependente do tempo e de σ/L (bem como a amplitude das oscilações).

Correlações orientacionais solvente-soluto em soluções aquosas de Li^+

DEGRÈVE, L.

Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto da Universidade de São Paulo

QUINTALE JUNIOR, C.

Instituto de Física e Química de São Carlos, Universidade de São Paulo

A mudança de estrutura que um solvente apresenta na ausência ou na presença de um soluto iônico sempre tem despertado interesse. O objetivo desta comunicação é identificar a maneira como estão orientados os dipolos das moléculas de água ao redor de um íon que gera um campo elétrico intenso, como o íon Li^+ . As informações foram geradas por simulação de Monte Carlo no ensemble NpT a 298K em um sistema de 124 moléculas de água e um íon Li^+ . As interações água-água foram descritas pelo modelo TIP4P, e aquelas entre o íon e as moléculas de água por um modelo com termos Coulômbicos e Lennard-Jones. As funções de distribuição radial indicam uma estrutura bastante organizada até uma distância de cerca de 0,25nm do centro do íon, enquanto as funções de distribuição ângulo-radial mostram uma organização dos dipolos de água nesta mesma distância. Os dipolos das moléculas de água tendem a se manter colineares ao vetor ligando seu oxigênio ao íon, com um desvio da colinearidade menor de 18° . Consequentemente, o vetor ligando os dois hidrogênios da molécula é perpendicular ao vetor íon-átomo de oxigênio com rotação quase-livre dos átomos de hidrogênio ao redor deste vetor.

CNPq

Compressibilidade de Filmes de Neônio Adsorvido em Grafito

DIEHL, L. M. A.; LERNER, E.; CHAVES, F. A. B.
Instituto de Física - Universidade Federal do Rio de Janeiro

Os resultados positivos obtidos no estudo da compressibilidade do Hidrogênio adsorvido em grafite¹ incentivaram os cálculos do sistema Neônio adsorvido em

grafite². Basicamente esperamos ver reproduzida na compressibilidade o comportamento suposto ao se descrever o filme adsorvido. Esperamos que a compressibilidade diminua a medida que se completa a camada e que ao se finalizar a próxima se atinja novo máximo. Esperamos também que as alturas destes máximos diminua com o número de camadas. A variação da compressibilidade com a densidade segue uma configuração semelhante à da entropia molar¹, indicando as diversas fases existentes na camada adsorvida. A compressibilidade

$$\kappa^{-1} = n^2 kT \left(\frac{\partial(\ln P)}{\partial n} \right)_T = BV^2 kT \left(\frac{\partial(\ln P)}{\partial V} \right)_T$$

onde n é a densidade do adsorbato, V o volume adsorvido e B uma constante que depende da área do adsorvente. Como as medidas feitas são da pressão em função do volume adsorvido para temperaturas fixas, se torna necessário construir a superfície PVT afim de numericamente calcular a derivada. Esta reconstrução deve ser cuidadosa devido à forte sensibilidade da derivada às flutuações inerentes às medidas.

- 1) A. L. Pereira, F. A. B. Chaves, E. Lerner, *Low Temp. Phys.* 88, 421 (1992)
- 2) F. Hanono, C. E. Gatts e E. Lerner, *J. Low Temp. Phys.* 60,73 (1985)

CONDUTORES SUPERIÔNICOS: UM ESTUDO POR DINÂMICA MOLECULAR

OLIVEIRA, M. C. DE; RINO, J. P.
Universidade Federal de São Carlos

Nos últimos anos tem ocorrido um crescente interesse por uma certa classe de materiais que apresentam condutividade da ordem de 10^{-1} a $1 (\Omega \text{ cm})^{-1}$, os condutores superiônicos. Este interesse é devido tanto à curiosidade dos fenômenos envolvidos, quanto à grande aplicabilidade tecnológica (baterias, conversores termoeletrônicos, sensores, etc...). O método de Dinâmica Molecular tem sido extensivamente utilizado no estudo da física e química da matéria condensada. Particularmente, um grande avanço na física de condutores superiônicos se deve às simulações deste tipo. O método (determinístico) consiste na resolução das equações de movimento para as N -partículas do sistema através de processos iterativos, partindo de um modelo de potencial de interação efetivo de pares. O objetivo é estudar as propriedades estruturais como função de correlação de pares, número de coordenação, bem como propriedades dinâmicas como condutividade, espectro de fônons e coeficiente de autodifusão do material superiônico CuI. Antes porém, como teste, reproduziremos os resultados da literatura para o AgI^a.

^a P. Vashishta and A. Rahman, *Phys. Rev. Lett.* 40, 1337 (1978). M. Parrinello, P. Vashishta and A. Rahman, *Phys. Rev. Lett.* 50, 1073 (1983).

INFLUÊNCIA DE INTERAÇÕES LATERAIS NO COMPORTAMENTO CRÍTICO DE UM MODELO DE REAÇÃO MONÔMERO-DÍMERO NUMA SUPERFÍCIE

SATULOVSKY, J. E.
Universidade de São Paulo
ALBANO, E. V.
INIFTA - Argentina

O modelo ZGB para um processo de reação de superfície monômero-dímero do tipo $A + \frac{1}{2} B_2 \rightarrow AB$, exibe duas transições de fases irreversíveis (TFI) de um regime estacionário com produção de AB com P_A entre P_{1A} e P_{2A} , para estados inativos com espécies B(A) com $P_A \leq P_{1A}$ ($P_A \geq P_{2A}$), respectivamente; onde P_A é a fração molar da espécie A na fase gasosa e P_{iA} ($i = 1, 2$) são pontos críticos. A fim de considerar interações repulsivas e atrativas entre os reagentes uma generalização do modelo ZGB é apresentada. Encontra-se que na maioria dos casos a TFI de primeira ordem em P_{2A} torna-se de segunda ordem e os pontos críticos são deslocados. Para algumas escolhas particulares das energias de interação, é determinado que a TFI de segunda ordem em P_{1A} torna-se de primeira ordem. Também, é visto uma TFI de primeira ordem de um estado reativo para um regime efetivamente inativo onde espécies A são adsorvidas formando uma estrutura metaestável $c(2 \times 2)$.

Transição de fase em fases adsorvidas.

BORIN, I. A.; DEGRÈVE, L.
Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto da Universidade de São Paulo

Fases bidimensionais podem apresentar transições, como, por exemplo, a de gases adsorvidos em superfícies sólidas; a deposição de monocamadas metálicas sobre eletrodos em um subpotencial de deposição. Apresentamos isotermas de adsorção, obtidas por simulação usando o modelo de percolação em redes. As isotermas exibem uma região típica de uma transição de fase em função das características do procedimento de formação dos clusters. Utilizou-se um modelo de adsorção no qual partículas provenientes de uma solução se adsorvem sobre uma superfície em contato com essa solução. A transição de fase está associada à perda de correlações a grande distância, o que permite defini-la como uma transição entre duas regiões: uma onde fenômenos cooperativos são atuantes enquanto que na outra não há cooperatividade. Os resultados são condizentes com um modelo teórico proposto por L. Blum e D. A. Huckaby que é capaz de descrever a transição de fase em uma monocamada adsorvida na superfície de eletrodos.
CNPq - CAPES

A orientação relativa entre moléculas de água na camada de solvatação do Li^+ .

QUINTALE JUNIOR, C.

Instituto de Física e Química de São Carlos, Universidade de São Paulo

DEGRÈVE, L.

Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto da Universidade de São Paulo

A camada de solvatação como um fator determinante em muitas das propriedades físicas e químicas das soluções eletrolíticas aquosas sempre recebeu considerável interesse, tanto teórica como experimentalmente, permanecendo porém dúvidas quanto a sua real estrutura. Em vista de tal interesse e utilizando simulação de Monte Carlo (a 298K no ensemble NpT) de um sistema constituído de moléculas de água no modelo TIP4P e um íon Li^+ , pretende-se, nesta comunicação, mostrar detalhes da estrutura da camada de hidratação deste íon. Este objetivo é alcançado por meio de funções de distribuição radial, funções de distribuição ângulo-radial e as frequências ângulo-ângulo e ângulo-ângulo-ângulo para duas e três moléculas de água na primeira esfera de hidratação. Da análise dessas funções resultam algumas características importantes da estrutura da camada de hidratação de um íon pequeno como o Li^+ , entre estas, a colinearidade entre o íon e o vetor momento dipolar da água e a perpendicularidade deste com o vetor HH; os ângulos formados entre os dipolos das moléculas de água (90 e 180°); os ângulos entre os vetores HH (0 - 23 e 0 - 90°) e os ângulos entre duas moléculas de água (90 e 180°). Estas informações permitem identificar uma estrutura bem definida com simetria C_{4v} para a camada de solvatação com 4 moléculas de água nos vértices de um quadrado e o íon no centro. Nesta estrutura o íon e os oxigênios estão no mesmo plano enquanto os hidrogênios parecem poder rotacionar livremente. Cumpre lembrar que 4 como número de hidratação do Li^+ concorda com resultados experimentais.

CNPq

POLÍMEROS EM REDES ANISOTRÓPICAS

MACHADO, K. D.; STILCK, J. F.

UFSC

Recentemente^a o estudo do comportamento termodinâmico de polímeros em redes de Bethe anisotrópicas revelou um diagrama de fases diferente em redes com número de coordenação igual a 4, quando comparado com os demais casos. Notamos o aparecimento de duas fases polimerizadas distintas, sendo uma delas caracterizada pelo fato de que as cadeias poliméricas ocupam todos os sítios da rede (caminhadas de Hamilton) e todas as ligações são localizadas em arestas de fugacidade mais alta. Analisamos, agora, o mesmo modelo numa rede de Husimi^b de coordenação igual a 4 e formada

por quadrados, chegando a resultados semelhantes aos da rede de Bethe. Uma diferença importante é que na rede de Husimi a fase de caminhadas de Hamilton apresenta ligações nos dois tipos de arestas noutra orientação espacial fica determinada pela razão das duas fugacidades. Finalmente, apresentaremos resultados, ainda preliminares, de um estudo do modelo na rede quadrada, usando técnicas de matrizes de transferência e renormalização fenomenológica. Para preservar a simetria do problema quando a rede é girada de $\pi/2$, formulamos as matrizes de transferência de maneira que a direção de transferência seja ao longo de uma das diagonais da rede original.

^aE. Botelho e J. F. Stilck, Phys. Rev. E a ser publicado.

^bJ. F. Stilck e M. J. de Oliveira, Phys. Rev. A 42, 5955 (1990)

UMA ANÁLISE ATRAVÉS DE SÉRIES DA TRANSIÇÃO DE COLAPSO EM POLÍMEROS RAMIFICADOS

NEVES, U. P. DA C.; ONODY, R. N.

USP - São Carlos

Existem polímeros que na fase gel sofrem uma transição de fase na qual há grande variação de volume: é a chamada transição de colapso. Essa transição pode ser obtida pelo abaixamento da temperatura do sistema, pela mistura de solvente de baixa qualidade ou pela presença de campo elétrico. Teoricamente ela tem sido estudada por meio de um modelo de animais na rede com interação atrativa entre os monômeros. Há modelos em que o tipo de interação dominante se manifesta através de ciclos, de contactos ou de pares primeiros vizinhos. Na abordagem desses modelos têm sido comumente utilizados o método de Monte Carlo e de matriz de transferência. Recentemente e graças à utilização dos supercomputadores foi possível um gigantesco trabalho de enumeração de animais na rede. Nós utilizamos esses resultados para determinar uma função geratriz para o problema de monômeros com interação atrativa de primeiros vizinhos na rede quadrada. Obtemos a densidade do sistema da temperatura. Ela exhibe, claramente, a existência de um ponto tricrítico separando uma linha de transição de fase de 1ª ordem e de 2ª ordem. Determinamos a série correspondente à compressibilidade isotérmica do sistema e a analisamos através dos aproximantes diferenciais parciais. Estimamos o ponto tricrítico, o expoente crítico γ da compressibilidade isotérmica, o "crossover" ϕ e os eixos de escala.

**PROPRIEDADES CRÍTICAS DE MODELOS
DE PERCOLAÇÃO DE FASES QUE
COMPETEM PARA SÓLIDOS
IRRADIADOS.**

COSTA, J. A. T. B. DA
UFMS

São determinados os expoentes críticos e os limites de percolação de fases formadas sequencialmente segundo regras inspiradas em modelos adotados para o estudo da cinética de modificação de materiais por irradiação com partículas atômicas. Os resultados são comparados com aqueles obtidos para modelos de percolação em condutores iônicos dispersos. São também estudadas as distribuições de tamanhos de clusters das fases formadas. Dependendo das regras adotadas para a formação e desaparecimento das fases, algumas delas jamais percolarão. Nesses casos, as distribuições de tamanhos de clusters são limitadas a valores menores do que os tamanhos dos clusters iniciais. Para as fases que percolam, essas distribuições apresentam comportamentos diversos. A condutividade elétrica dos compósitos formados por adição das novas fases à matriz inicial é estudada em função da concentração dessas fases empregando-se o modelo de Landauer.

**PERCOLAÇÃO POR INVASÃO EM UM
MEIO POROSO**

ONODY, R. N.
USP - São Carlos

Com o objetivo de descrever o fluxo de fluidos em um meio poroso e sob a ação da gravidade apresentamos um modelo de percolação por invasão modificado por novas regras locais de crescimento. Além de não permitir o escoamento do fluido no sentido contrário ao da gravidade, introduzimos um parâmetro $F, F \in [0, 1]$, que mede a probabilidade relativa do fluxo nas direções horizontal e vertical. Os efeitos dessas modificações são analisados através de simulações numéricas realizadas numa rede quadrada 1024×512 . São utilizadas diferentes condições de inicialização: injeção na linha e injeção pontual. Estudamos várias grandezas que caracterizam o sistema: o perfil de aceitação, a densidade linear de massa, o comprimento de correlação e a largura total, assim como a dependência dessas grandezas com o parâmetro F e a altura vertical h . Os comportamentos assintóticos e as relações de escala são discutidos e os expoentes críticos associados são numericamente estimados.

PERCOLAÇÃO E ESTADOS EPIDÊMICOS

SANTOS, C. B. DOS
FFCLRP-USP
SILVA, M. A. A. DA; CALIRI, A.
FCFRP-USP

Uma rede 500×500 representa uma população de susceptíveis, onde cada sítio i , representando um elemento da população, pode assumir um dentre dois estados: vazio (sadio) com probabilidade p_i e ocupado (contaminado) com probabilidade $1 - p_i$. A probabilidade p_i é extraída de uma distribuição genérica que representa o perfil de susceptibilidade da população, e de maneira genérica depende do perfil e do estado de seus vizinhos mais próximos. Por exemplo, $p_i = 1 - (1 - p_e)^n$, onde p_e é o primeiro momento do perfil de susceptibilidade da população, correspondendo à probabilidade inicial de se encontrar um indivíduo contagiado (estado endêmico) e n é o número de vizinhos do sítio i já contagiados. A simulação de 30 diferentes amostras (500×500) resultou no seguinte: para $p_e \leq 0,25$ nenhuma amostra percolou (permanecendo no estado endêmico) ao passo que para $p_e \geq 0,29$ todas as amostras percolaram (transição para o estado epidêmico). O limiar de percolação foi estimado em $p_e = 0.275 \pm 0,005$. São discutidos modelos para o perfil de susceptibilidade (risco) para diferentes populações.

**ESTADOS EXCITADOS COM DOIS
DESVÍOS DE SPIN EM UMA CADEIA
FERROMAGNÉTICA SEMI-INFINITA COM
UM ÁTOMO ADSORVIDO NO EXTREMO.**

GUTTERRES, R. F.; SELZER, S.; MAJLIS, N.
UFF

Nós temos já apresentado (XV Encontro, 1992) resultados exatos para o estado fundamental e as excitações deste sistema com só um desvio de spin, com o intuito de analisar um modelo simplificado de uma superfície. Nesta comunicação apresentamos resultados para as excitações que correspondem a dois desvios de spin, para complementar os resultados anteriores, obtendo-se assim estados excitados vizinhos ao fundamental que são ortogonais aos de um desvio de spin. Nós calculamos estes autoestados para uma cadeia semi-infinita, com um átomo adsorvido na "superfície", mediante o método de Lanczos. O truncamento dos elementos diagonais da resolvente se faz com o método da transformada de Fourier complementado com uma extrapolação linear dos primeiros N termos, e a convergência com N é discutida.

SIMULAÇÃO MONTE CARLO DO BENZENO LÍQUIDO E CÁLCULO DE PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS E ELETRÔNICA.

COUTINHO, K.; CANUTO, S.
USP e UFPE

Para estudar a matéria dividimos, convenientemente, esta em três fases: gasosa, líquida e sólida. Na fase gasosa, a aproximação usual decorre da baixa densidade e na fase sólida (cristalina) decorre do alto ordenamento. Desta forma, os modelos são simplificados, e os resultados obtidos nos estudos destas fases apresentam um relativo sucesso. Porém, na fase líquida e nos sólidos amorfos a alta densidade e a desordem são marcante e por isto muitas simplificações não podem ser aplicadas. Daí vêm as dificuldades de estudar estas fases e as limitações teóricas que alguns modelos propostos apresentam.

Neste trabalho, estudamos sistemas moleculares em fase líquida, simulando com método Metropolis Monte Carlo o modelo de potencial efetivo de pares (Lennard-Jones). Inicialmente, estudamos algumas propriedades termodinâmicas como o calor específico, o coeficiente de expansão térmico e a compressibilidade isotérmica, e também propriedades configuracionais como a função de correlação radial de pares. Posteriormente, estudamos propriedades eletrônicas como o espectro de absorção, a partir das coordenadas moleculares, obtidas ao longo da simulação, e da utilização de cálculos quânticos.

Escolhemos benzeno como aplicação desta metodologia de estudo e obtivemos boa concordância com os resultados experimentais tanto para o espectro quanto para a função de correlação.

DINÂMICA MOLECULAR-APLICAÇÃO A UM GÁS IDEAL E ESTENÇÕES.

PENA, M. J. F.; COSTA, B. V. DA
UFMG

O desenvolvimento de computadores cada vez mais rápidos e de técnicas de física computacional cada vez mais eficientes, fizeram com que a simulação de sistemas físicos em computadores se tornassem cada vez mais importantes. Nós apresentamos neste trabalho uma técnica de simulação aplicável a uma grande variedade de sistemas. Como um exemplo a técnica é aplicada a um gás ideal em uma caixa. O gás é posto em uma caixa de volume fixo V e temperatura fixa T , a pressão nas paredes é calculada e mostramos que a equação de estado de gás ideal é satisfeita. E também um histograma das velocidades é feito mostrando que ela obedeceu a distribuiç— ao de Maxwell - Boltzman. Nós discutimos também a aplicação do método (quase imediata) a crescimento de cristais e sistemas "hidrodinâmicos", como uma asa de avião em um tunel de

vento.

ELÉTRONS SUPERFICIAIS EM FILMES DE HÉLIO : UMA SIMULAÇÃO POR DINÂMICA MOLECULAR

SILVA, L. C. DA; RINO, J. P.
Universidade Federal de São Carlos

Elétrons na superfície de hélio adsorvidos em um substrato têm despertado um enorme interesse tanto teórico quanto experimental. Além do interesse em se saber a natureza dos estados superficiais, mecanismos de espalhamento na condutividade superficial dos elétrons, elétrons em filmes de hélio é também um sistema ideal para se estudar várias propriedades de um sistema de muitos corpos em duas dimensões. O potencial de interação elétron-elétron é um potencial clássico, central que pode ser obtido resolvendo-se a equação de Poisson com condições de contorno adequadas. Têm uma forte dependência com a espessura do filme de hélio e do tipo de substrato utilizado. Neste trabalho estamos utilizando a técnica de Dinâmica Molecular pra descrever a transição de fase sólido-líquido e as propriedades estruturais, tais como função de correlação de pares, fator de estrutura e número de coordenação; e propriedades dinâmicas, tais como função de auto correlação de velocidade e densidade de estados vibracionais. O sistema consiste de 400 partículas, as equações de movimento são integradas através do algoritmo de Gear de quinta ordem, e as interações de longo alcance são tratadas pelo método de Ewald.

Determinação da energia de adsorção por simulação

DEGRÈVE, L.

Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto
da Universidade de São Paulo

A energia de adsorção, E_{ads} de um líquido sobre uma superfície sólida pode ser determinada a partir da função de correlação, $h(r)$ onde r é função da distância até a superfície :

$$\frac{E_{ads}}{RT} = - \frac{\int_{\infty}^{0.5d} h(r) \cdot \log[h(r)+1] \cdot \Upsilon(r) dr}{\int_{\infty}^{0.5d} h(r) \Upsilon(r) dr}$$

onde $0.5d$ é a menor distância de aproximação das moléculas sobre a superfície, $\Upsilon(r) = 1$ se a superfície for plana e $(\lambda + r)^2$ se ela for curvada com raio λ .

Como aplicação, E_{ads} , foi calculado para sistemas de moléculas esféricas e rígidas e superfícies de adsorção rígidas, planares ou de simetria esférica. As funções $h(r)$ foram obtidas por simulação usando o método de Monte Carlo. Os resultados mostram que a E_{ads} é atrativa, decresce junto com a densidade do fluido e junto com o aumento do raio de curvatura da superfície adsorvente, de acordo com a equação de Young-Laplace, atingindo um valor de $12.4 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ a 300K e densidade reduzida de 0.76, o que esta também de acordo

com dados experimentais.
CNPq

*Sistemas Fora do Equilíbrio:
Dinâmica, Autômatos Celulares, Crescimento (EST) - 20/05/93*

Um modelo de crescimento para melanoma
BOSCHETTI, S. R.; MARTINS, M. L.; VILELA, M. J.
Universidade Federal de Viçosa - UFV

O processo de crescimento de um tumor envolve múltiplos estágios que funcionam como barreiras impedindo sua progressão. Em cada um desses estágios as células anormais iniciais podem sofrer transformações adicionais em direção à malignidade ou, ao contrário, se diferenciarem rumo à normalidade. Propomos um modelo para o crescimento de tumores (neoplasia melanocítica) que considera diversas lesões sequenciais que ocorrem no processo de progressão do tumor, desde a sua indução até o câncer. Esse modelo contém como casos particulares os modelos de Eden e de Williams e Bjerknes (*Nature*, vol 236, no. 3, p. 19, 1972). Através de simulação estudamos como variam o raio, R_s , o perímetro, t_s , e o perfil de densidades de probabilidade, $D_s(r)$, de um sítio à distância r da semente ser ocupado, em função do número, s , de sítios pertencentes ao aglomerado.

**MODELO DE DESAGREGAÇÃO
MULTI-PARTÍCULA DO TIPO DLA**

LEMKE, N.
UFRGS

Introduzimos um modelo de desagregação multi-partícula que consiste basicamente em colocar partículas aleatoriamente distribuídas em torno de uma matriz circular. Estas partículas percorrem trajetórias brownianas até tocarem em uma partícula da matriz destruindo-a. Estudamos dois regimes básicos um no qual todas as partículas livres podem causar a desagregação e outro onde apenas uma dada porcentagem pode causar desagregação. Estamos interessados em caracterizar a morfologia do substrato a medida que este vai sendo destruído. Para tanto medimos a dimensão de contagem de caixa da superfície em função do tempo (medido em monte carlo "steps") e também avaliamos a espessura média do substrato, $\sigma^2 = \langle (r - \langle r \rangle)^2 \rangle$ (onde r é a distância da partícula a origem e as médias são tomadas em relação à todas as partículas), em função do tempo.

**SIMULAÇÃO DA DINÂMICA DE LIGAS
BINÁRIAS BIDIMENSIONAIS COM
AUTOMATOS CELULARES**

PALANDI, J.

Universidade Federal de Santa Maria
ALMEIDA, R. M. C. DE; IGLESIAS, J. R.
Universidade Federal do Rio Grande do Sul
KIWI, M.
Facultad de Física - PUC - Santiago - Chile

Estamos estudando autômatos celulares (AC) probabilísticos para descrever sistemas tipo Ising em duas dimensões com interação tipo ferro e anti-ferromagnética com conservação da magnetização total do sistema. Estes modelos podem descrever ligas binárias conservando as concentrações de cada espécie atômica. A simulação é realizada tomando-se, para cada par de sítios, os seus primeiros vizinhos, com uma regra de atualização (dependente da temperatura) definida de modo que a função energia local decresça. Já estudamos o comportamento do calor específico em função da temperatura, obtendo o conhecido ponto λ . Estamos, agora, procurando estudar a dinâmica do sistema através da evolução temporal da "distância" entre duas configurações submetidas ao mesmo ruído térmico ("damage spreading") e a transição de fase, do estado desordenado a alta temperatura para o estado ordenado a baixa temperatura, simulando os processos de "annealing" e "quenching" e calculando a função correlação radial (definida como um parâmetro de ordem). Resulta dos preliminares indicam, por exemplo, que podemos simular a formação de grãos (com interação anti-ferromagnética) e a decomposição espinodal (com interação ferromagnética) com a separação do sistema em duas fases distintas (para um tempo muito grande).

**PROTÓTIPO PARA EFEITOS DE
MEMÓRIA NA EVOLUÇÃO TEMPORAL
DE DANOS**

TSALLIS, C.; TAMARIT, F. A.; SOUZA, A. M. C. DE
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Neste trabalho introduzimos um autômato celular determinístico uni-dimensional como um protótipo para estudar os efeitos de memória na evolução temporal de danos. A distância de Hamming entre duas configurações do autômato reflete corretamente, em função do tempo, os resultados obtidos em diversos sistemas dinâmicos complexos, como por exemplo o modelo discreto para empilhamento de grãos de areia. Para diferentes valores dos parâmetros externos, a distância de Hamming do sistema varia gradualmente entre um comportamento do tipo ruído e um comportamento do tipo plateau. Estudamos a probabilidade de termos plateaux de tamanhos finitos que, em certo sentido, faz o

papel de um parâmetro de ordem. Quatro regimes diferentes podem ser identificados através de simulações numéricas. No limite termodinâmico apenas dois subsistemas. O caso completamente aleatório é analiticamente discutido confirmando os resultados numéricos.

Um modelo de aut omatos celulares para o controle transcricional de genes

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

Universidade Federal de Viçosa — UFV

Estudamos o controle transcricional de genes, modelados por variáveis binárias em uma rede quadrada. As interações J_{ij} entre os genes são aleatórias e assimétricas, podendo ser locais (primeiros vizinhos) ou não (vizinhos escolhidos ao acaso), e distribuídas no intervalo $-1, +1$. $J_{ij} > 0$ representa ativação, $J_{ij} < 0$ inibição, enquanto $J_{ij} = 0$ significa ausência de influência do gene j sobre o gene i no processo de transcrição. A evolução dinâmica dos genes ($\sigma_i = 1$: gene ativo para transcrição; $\sigma_i = 0$: gene inativo) se faz avaliando-se

$$H_i = \sum_{j=1}^4 J_{ij} \sigma_j(t-1) + h_i \sigma_i(t-1)$$

e usando-se a regra

$$\sigma_i(t) = \begin{cases} 0 & \text{se } H_i \leq 0 \\ 1 & \text{se } H_i > 0 \end{cases}$$

onde h_i representa a autoregulação de cada gene cuja distribuição é análoga à de J_{ij} . Investigamos, numericamente, a estrutura de atratores bem como sua estabilidade a mutações nos genes e/ou nas interações do modelo.

MODELO DINÂMICO PARA O PARLAMENTO

OLIVEIRA, P. M. C. DE; OLIVEIRA, S. M. DE;
PENNA, T. J. P.

Universidade Federal Fluminense

Considera-se um sistema de 32 leis e N deputados ($N \rightarrow \infty$). Cada deputado i tem sua ideologia representada por uma palavra I_i de 32 bits 0 ou 1, significando respectivamente sua aceitação ou rejeição da respectiva lei. Outra palavra R também de 32 bits representa a legislação atual, θ correspondendo às leis em vigor, e l às rejeitadas. Ao contrário das ideologias I_i dos deputados que são fixas, a legislação atual R varia no tempo através de votações sucessivas dos deputados. O voto de cada deputado é igual ao atual R com uma única modificação em uma das leis que é invertida no sentido de aproximar R da sua ideologia. A competição entre os deputados é decidida pela regra da maioria depois de cada votação, e uma nova legislação R' substitui a anterior. Um vetor A contém 32 valores reais que representam a aceitação média de cada lei entre os deputados,

de acordo com a última votação. Cada deputado vota, espertamente, escolhendo para inversão em relação ao atual R a lei de menor aceitação. Verificamos que este processo de votações sucessivas converge para um ponto fixo R^* .

Após cada convergência, promove-se a renovação do parlamento. Cada deputado tem uma chance de continuar proporcional ao seu sucesso no mandato anterior (medido pela percentagem de leis em R^* coincidentes com sua ideologia). Os que não continuam são substituídos por outros deputados aleatórios. Medem-se o grau de variabilidade dos sucessivos R^* , e a quantidade de deputados renovados. Esta última quantidade pode apresentar criticalidade auto organizada.

SIMULAÇÃO DE UMA TORNEIRA PINGANDO

PENNA, T. J. P.; OLIVEIRA, P. M. C. DE

Universidade Federal Fluminense

O tempo T_n entre dois pingos consecutivos de uma torneira é facilmente medido (1). A sequência de tempos T_n consecutivos ($n = 1, 2, 3, \dots$) obtida apresenta comportamento periódico ou caótico, dependendo do fluxo controlável de água. Estes comportamentos podem ser observados nos gráficos $T_n \times T_{n-1}$.

A forma geométrica de uma gota foi reproduzida com sucesso, através de uma simulação do modelo de Ising numa rede quadrada (2). Cada ponto da rede possui um spin *up* ou *down*, correspondendo respectivamente a ar ou água, com interações atrativas entre primeiros e segundos vizinhos (esta última simulando a tensão superficial). Um gradiente vertical de campo magnético simula o efeito da gravidade.

Neste trabalho, realizamos simulações do tipo descrito no parágrafo anterior, para reproduzir o fenômeno descrito no primeiro parágrafo. Os gráficos $T_n \times T_{n-1}$ obtidos são comparados com os experimentais.

(1) P. Martien, S.C. Pope, P.L. Scott, R.S. Shaw, *Phys. Lett.* **110A**, 399 (1985)

(2) S. Manna, H.J. Herrmann, D.P. Landau, *J. Stat. Phys.* **66**, 1155 (1992)

ESPECTRO DE EXPOENTES DE LYAPUNOV DE SÉRIES TEMPORAIS.

OIWA, N. N.; FIEDLER-FERRARA, N.

IF/USP

A obtenção do espectro de Lyapunov associado a uma série experimental é um problema relevante na caracterização do caos determinístico. Vários algoritmos têm sido propostos nos últimos anos com essa finalidade. Construíram-se programas computacionais para dois deles: Eckmann-Ruelle (*Phys. Rev.* **A34**, 4971, 1986) e Sano-Sawada (*Phys. Rev. Lett.* **55**, 1082, 1985). O primeiro algoritmo trata o sinal como que gerado por

um mapa enquanto que o segundo o trata como que gerado por um fluxo. Esses algoritmos são testados utilizando-se mapas e fluxos com dinâmica conhecida. Em particular estuda-se a influência de ruído sobre os resultados. Resulta que o algoritmo de Sano-Sawada é de mais fácil implementação que o de Eckmann-Ruelle, sendo que nesse último a escolha dos parâmetros adequados para a obtenção de resultados corretos é crítica. Por outro lado, contaminação com ruído de 1% já compromete os resultados obtidos. Apresentam-se também resultados preliminares para o espectro de expoentes de Lyapunov associado a sinais experimentais.

Sincronismo em Redes de Osciladores

MASSUNAGA, M. S.; BAHIANA, M.
Universidade Federal do Rio de Janeiro

Estudamos o estabelecimento de uma *fase ordenada* em redes de osciladores com ciclo limite a uma duas e três dimensões. Por *fase ordenada* entende-se uma fase em que existe um sincronismo macroscópico. Os osciladores inicialmente tem uma distribuição de frequências bem determinada, e evoluem, ou não, para um ordenamento global. A existência de um sincronismo macroscópico é determinada pela medida do maior *cluster* sincronizado. Com esta medida podemos verificar a existência de uma dimensão crítica para a transição não sincronizado-sincronizado que depende da distribuição original das frequências.

EQUIVALÊNCIA ENTRE AS DINÂMICAS DE GLAUBER E DE BANHO TÉRMICO EM SIMULAÇÕES DE PROPAGAÇÃO DE DANO EM VIDROS DE SPIN

ALMEIDA, R. M. C. DE
Instituto de Física - UFRGS

Simulações de propagação de dano em vidros de spin consistem na monitorar a evolução da distância de Hamming entre duas configurações de uma mesma amostra, ambas sujeitas ao mesmo ruído térmico. Tais simulações foram extensivamente utilizadas para estudar a transição de vidro de spin e relaxação em muitos modelos. A literatura disponível apresenta resultados obtidos através de diferentes dinâmica, em especial a dinâmica de Glauber e de banho térmico, que mostram diferentes comportamentos, apesar dessas dinâmicas serem fisicamente equivalentes. O ruído térmico sobre spins pode ser tratado com um campo magnético estocástico, tendo portanto um caráter vetorial. A discordância entre resultados obtidos com diferentes dinâmicas para propagação de dano origina-se no fato que nessas simulações considera-se a evolução simultânea de duas configurações, e a direção do campo magnético estocástico associado à temperatura deve também ser levada em conta. Neste trabalho, a equivalência entre as dinâmicas de Glauber e de banho

térmico é demonstrada quando a direção do ruído térmico é explicitamente considerada.

DINÂMICA DO MODELO DE ANISOTROPIA UNIAXIAL ALEATÓRIA

DOMINGUEZ, D. R. C.; THEUMANN, W. K.
I.F.UFRGS

A teoria de campo médio (TCM) do Modelo de Anisotropia Uniaxial Aleatória Infinita (IRAM), no limite de $\alpha \equiv p/N$ finito, onde p é a dimensionalidade de spins e N o número de sítios pode ser obtida com a hipótese de independência das componentes dos eixos, resultando em fases ordenadas ferromagnética, mixta e de vidro-de-spin. Para confirmar, propomos a dinâmica paralela, que pode ser resolvida em termos dos parâmetros magnético (m^t) e do ruído residual (l^t) em cada etapa t .

Enquanto a magnetização satisfaz a ergodicidade, para o ruído devemos aplicar um *ansatz* Markoviano e introduzir um parâmetro de correlação Gaussiana (c), a fim de obter um mapa na forma

$$\begin{aligned} m^{t+1} &= f_m(x^t), \\ l^{t+1} &= f_l(x^t), \\ c^{t+1} &= f_c(x^t), \end{aligned} \quad (1)$$

onde x^t é o vetor com componentes m, l e c . Os pontos fixos desse mapa são associados aos estados estacionários do sistema.

COMPETIÇÃO ENTRE AS DINÂMICAS DE GLAUBER E KAWASAKI NO MODELO DE ISING ANTIFERROMAGNÉTICO.

GRANDI, B. C. S.; FIGUEIREDO, W.
DEPARTAMENTO DE FÍSICA, UFSC
PLASCAK, J. A. A. O.
DEPARTAMENTO DE FÍSICA, UFMG

Neste trabalho estudamos o comportamento do modelo de Ising antiferromagnético numa rede quadrada, em contacto com um banho térmico, e sujeito a um fluxo de energia devido à uma agência externa de energia. A interação com o banho térmico é simulada através da dinâmica de Glauber, enquanto que o fluxo de energia pode ser simulado pela dinâmica de Kawasaki. Em nossa análise empregamos a aproximação de pares para poder resolver as equações que descrevem as evoluções temporais da magnetização e da função de correlação entre primeiros vizinhos. O diagrama de fases do análogo modelo ferromagnético foi determinado anteriormente por T. Tomé e M.J. de Oliveira (Phys.Rev.A40, 6643(1989)), onde o fenômeno de auto-organização foi observado à medida que o fluxo de energia sobre o sistema aumentava. O diagrama de fases que obtemos no caso antiferromagnético é comparado

com o obtido pelos autores acima a fim de verificar se os diagramas correspondentes são simétricos pela troca das fases ferro e antiferromagnética.

MODELO DE ISING CINÉTICO NUM CAMPO ALEATÓRIO.

PAULA, G. L. S.; FIGUEIREDO, W.
DEPARTAMENTO DE FÍSICA, UFSC

Investigamos neste trabalho o comportamento do modelo de Ising num campo aleatório em contacto com um reservatório de calor. A evolução temporal do sistema é descrita pela equação master e a transição entre os estados é dada pela prescrição de Glauber. Podemos determinar a magnetização em função da evolução da magnetização em direção aos estados estacionários do sistema podemos determinar as transições de primeira e segunda ordem para esse sistema. Em particular determinamos como o ponto tricrítico evolue com o tempo até aos estados de equilíbrio desse sistema. Mostramos que para tempos de relaxação pequenos as linhas de transição de primeira e segunda ordem ocorrem para valores grandes da magnitude do campo aleatório correspondente. Mostramos ainda como o tempo de relaxação do sistema varia com a intensidade do campo aleatório para cada valor dado da temperatura.

TEORIA CINÉTICA: UMA ALTERNATIVA AOS MÉTODOS DE CHAPMAN-ENSKOG E GRAD.

KREMER, G. M.
UFPR

Com base nos métodos de Chapman-Enskog e Grad, um método alternativo é proposto para a determinação das aproximações sucessivas aos coeficientes de transporte de viscosidade de cisalhamento e condutividade térmica de um gás monoatômico rarefeito. Neste método não se faz necessário a determinação da solução da equação integral (método de Chapman-Enskog), nem do uso das equações de campo para os momentos da função de distribuição (método de Grad). A partir do conhecimento da função de distribuição em termos dos momentos (método de Grad), pode-se derivar as equações constitutivas para o tensor pressão e para o fluxo de calor diretamente da equação de Boltzmann através do método de Chapman-Enskog. Os coeficientes de transporte de misturas de gases monoatômicos e de gases ionizados são também determinados através da utilização deste método alternativo.

TEORIA CINÉTICA E FENOMENOLÓGICA PARA AS EQÇÕES DE BURNETT DE GASES MOLECULARES

FERNANDES, A. S.; KREMER, G. M.
UFPR

As equações linearizadas de Burnett para um gás molecular são obtidas a partir de uma teoria cinética baseada na equação de Boltzmann e a partir de uma teoria fenomenológica baseada na termodinâmica estendida. A equação constitutiva para o tensor pressão de um gás molecular contém tres termos que não aparecem na equação constitutiva correspondente para um gás monoatômico ideal. Um dos termos já é conhecido, sendo proporcional ao divergente da velocidade e cujo coeficiente é a viscosidade volumétrica. Os outros dois são proporcionais a Laplacianos da temperatura e densidade e estão associados, respectivamente, a uma pressão térmica e a uma pressão de densidade.

ONSAGER-CASIMIR RECIPROCALITY RELATIONS FOR OPEN GASEOUS SYSTEMS AT ARBITRARY RAREFACTION.

SHARIPOV, F.
UFPR

A new statistical approach to the non-equilibrium thermodynamics is worked out. The approach is based on general properties of the Boltzmann equation and boundary condition for the distribution function. It allows to obtain the Onsager-Casimir reciprocity relations for open gaseous systems at any rarefaction including situations when there is no local equilibrium. Thus, it is shown that an application of the main result of the non-equilibrium thermodynamics can be extended to systems not being in the local equilibrium in contrast to the conventional opinion about it. To illustrate the application of the present theory some examples of rarefied gas flows are considered. Explicit expressions of kinetic coefficients satisfying the Onsager-Casimir reciprocity relations have been obtained and various cross effects have been coupled.

DINÂMICA NÃO-LINEAR DO AUTÔMATO CECULAR "JOGO DA VIDA"

GARCIA, J. B. C.; GOMES, M. A. DE F.; SALES, T. R. DE M.; JYK, T. I.; REN, T. I.
Departamento de Física - UFPE

Neste trabalho é apresentado pela primeira vez um estudo sistemático da evolução da dinâmica não-linear do autômato "Game of Life", proposto por Conway em 1970. As simulações numéricas são realizadas em redes quadradas de tamanho variando entre $L = 30$ e $L = 1100$, e o estado inicial é uma distribuição não-correlacionada de sítios vivos com probabilidade p

variável entre 0,05 e 0,90. O número total de grupos de sítios vivos, $N(t)$, a diversidade desses sítios, $D(t)$, o tamanho médio, $\bar{s}(t)$, dos grupos de sítios vivos, bem como a coordenação média, $\bar{q}(t)$, e a função distribuição de grupos de s sítios vivos no tempo t , $n(s, t)$, entre outras funções, são encontrados e estudados em função de p e de L . Expoentes críticos são obtidos e comparados com os de outras dinâmicas. Mostramos que leis de escala aparecem nesta dinâmica apenas para o intervalo $0,15b \leq p \leq 0,75$. Mostramos ainda que neste domínio de probabilidades a dinâmica possui 3 fases qualitativamente diferentes, e a região de escala varia com $L^{3/2}$.

O MÉTODO DO GRADIENTE NO AUTÔMATO CELULAR DE DOMANY-KINZEL

ZEBENDE, G. F.; PENNA, T. J. P.

Instituto de Física - Universidade Federal Fluminense

Empregamos o método do gradiente, proposto por Sapoal et al. e posteriormente aplicado a propagação de danos por Hermmann e da Silva, para a obtenção do diagrama de fases do autômato de Domany e Kinzel. Este autômato está relacionado com o problema da percolação direcionada. Este diagrama apresenta três fases: congelada e ativa (parâmetro de ordem é a magnetização) e fase caótica (caracterizada pela distância de Hamming entre duas réplicas). Recentemente, Schrenberg e Kohring apontam o comportamento anômalo dos parâmetros que caracterizam cada uma das fases, quando simulados em redes de diversos tamanhos apresentando, inclusive, um máximo para tamanho intermediário.

As vantagens da aplicação do método do gradiente no autômato de Domany e Kinzel com respeito às tradicionais simulações de Monte Carlo são: a) maior eficiência computacional e precisão na determinação das fronteiras críticas e b) independência quanto ao tamanho da rede. A importância da maior precisão na determinação da fronteira crítica reside no fato desta ser a principal fonte de erros na determinação de expoentes críticos como, por exemplo, o expoente do tempo de relaxação. Além destas vantagens, outras grandezas, tais como a dimensão fractal da nuvem do burning para as duas fronteiras e respectivos expoentes, podem ser obtidos.

Análise de transformações de simetria e integrabilidade de sistemas hamiltonianos. Aplicações a sistemas bi e tri-dimensionais.

FIGUEIREDO NETO, A. D. DE; CADILHE, M. W.;

ROCHA FILHO, T. M. DA

Departamento de Física - Universidade de Brasília

Usando-se a teoria do grupo de simetrias dinâmicas (dependentes das velocidades), obtemos novos invariantes para sistemas hamiltonianos de interesse, que não podem ser obtidos através das simetrias de Lie

geométricas (que dependem apenas das coordenadas e do tempo) do sistema. A teoria de grupos de simetria de Lie foi amplamente utilizado no estudo de equações de interesse na Física, particularmente para a obtenção de integrais primeiras do sistema. No entanto, o uso de simetrias dinâmicas não tem sido bem menos freqüente e permite, como mostramos neste trabalho, a obtenção de invariantes que não podem ser obtidos se nos limitarmos apenas a simetrias de Lie. Em alguns casos os invariantes são obtidos empregando-se um método desenvolvido por dois dos autores (A.D.F.N. e T.M.R.F.). Os calculos de simetria foram feitos utilizando um sistema de computação algébrica desenvolvido por um dos autores (T.M.R.F.), que automatiza grande parte dos cálculos. Nossa análise permite a redução de sistemas de equações diferenciais a sistemas algébricos, cuja integração, mesmo que numérica em alguns casos, é de menor complexidade que o sistema original. Os sistemas estudados neste trabalho são: Hénon-Heiles generalizado, osciladores não-harmônicos e rede periódica (rede de Toda com três graus de liberdade).

PROPAGAÇÃO DE DANOS PARA O MODELO DE ISING NA REDE TRIANGULAR: UM ESTUDO COM DIFERENTES DINÂMICAS ESTOCÁSTICAS

SOUZA, E. S.; MARIZ, A. M.; NOBRE, F. D.

UFRN

As correlações entre as transições dinâmicas encontradas através da técnica da propagação de danos e as transições de fase estáticas convencionais em sistemas de spins, têm sido objeto de grande controvérsia recentemente. A localização das fases caótica e congelada depende da dinâmica utilizada, assim como a temperatura que as separa pode variar de acordo com o tipo de atualização dos spins empregada^a. No presente trabalho analisamos a propagação de danos no modelo de Ising na rede triangular, com interações ferro e anti-ferromagnéticas, através de três dinâmicas estocásticas distintas (Heat-Bath, Metropolis e Glauber). A atualização dos spins é efetuada tanto na forma sequencial (um de cada vez) ou paralela (todos de uma vez). Verificamos que a atualização sequencial conduz a uma transição dinâmica que coincide com a transição de fase estática usual, enquanto que a atualização paralela (que é não ergódica), pode induzir transições dinâmicas que não possuem correspondentes estáticos. Tais resultados são comprovados nas três dinâmicas estocásticas estudadas.

^aF.D. Nobre, A.M. Mariz and E.S. Souza, Phys. Rev. Lett. 69, 13(1992).

*Sistemas Fora do Equilíbrio:
Dinâmica, Caos e Instabilidades I
(EST) - 21/05/93*

**MISTURA CAÓTICA EM SISTEMAS
HIDRODINÂMICOS**

MESQUITA, O. N. DE

*Departamento de Física, Universidade Federal de Minas
Gerais*

O aumento das propriedades de transporte de massa e calor em líquidos turbulentos é um fenômeno bastante conhecido e é devido basicamente às características estocásticas do campo de velocidades de fluidos turbulentos.

Recentemente, uma conexão teórica foi descoberta entre o problema de mistura em sistemas hidrodinâmicos e o problema de caos em sistemas Hamiltonianos.^a À partir desta conexão foi possível mostrar que mesmo em fluxos laminares (não estocásticos) o transporte de massa e calor pode ser bastante aumentado, modulando-se convenientemente o campo de velocidades do fluido.

Recentemente, publicamos os resultados de alguns experimentos nesta área.^{b,c} Apresentaremos novos resultados obtidos em outras situações experimentais.

^aHassam Aref, J. Fluid Mech. 143, 1(1984)

^bJ. P. Gollub, J. Clarke, M. Gharib, B. Lane, O. N. Mesquita, Phys. Rev. Lett. 67, 3507(1991)

^cO. N. Mesquita, S. Kane, J. P. Gollub, Phys. Rev. A 45, 3700(1992)

**Campo externo conjugado ao parâmetro de
ordem da transição de fase dinâmica no
autômato celular de Domany-Kinzel**

MARTINS, M. L.

Universidade Federal de Viçosa — UFV

TSALLIS, C.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas — CBPF

Após nosso trabalho (PRL vol.66, no.15,pg. ,1991) sabemos que o autômato celular de Domany-Kinzel apresenta três fases: congelada, ativa e caótica. Associado à transição de fase congelada-ativa está o parâmetro de ordem M , definido como a fração de sítios com valor 1, e cujo campo termodinamicamente conjugado é a probabilidade condicional $p(00/1)$. Entretanto $p(00/1)$ finito não destrói a transição ativa-caótica, caracterizada pelo parâmetro de ordem Ψ , a distância de Hamming normalizada entre duas configurações evoluindo sob a mesma seqüência de números aleatórios. Mostramos, através do estudo numérico da distância de Hamming normalizada Ψ , que o uso de números aleatórios diferentes com frequência h , para a atualização do autômato celular de Domany-Kinzel e sua réplica, corresponde ao campo

conjugado ao parâmetro de ordem da transição de fase dinâmica desse autômato.

**ANÁLISE TOPOLÓGICA DO CAOS
HOMOCLÍNICO NA DESCARGA
ELÉTRICA LUMINOSA**

ALTMANN, N.; CORREIA, R. R.; BRAUN, T.
UFRGS

Neste trabalho estudamos a topologia do espaço de fase reconstituído a partir da evolução temporal da corrente na descarga elétrica. Este estudo visa identificar o "template" associado à descarga. O template é um molde bidimensional que contém a organização topológica das órbitas no atrator caótico, ajudando no estudo da sua dinâmica. Esta pode ser bastante complicada devido à existência da órbita homoclínica. A maneira usual de obter-se o template é identificar as órbitas periódicas instáveis e a forma como estão interligadas. Neste trabalho obtivemos o template correspondente à descarga elétrica analisando diretamente seu espaço de fase através de seções (cortes) de Poincaré. Seguindo sucessivos cortes até se completar uma revolução do fluxo, observamos o mecanismo de estiramento e dobramento próprio do caos e concluímos que o template característico da descarga elétrica é o "horseshoe template".

**ESTRUTURAS DISSIPATIVAS EM
SEMICONdutoRES FOTO-EXCITADOS**

ESPERIDIÃO, A. S. C.; ANDRADE, R. F. S.
UFBA

Investigamos a formação de estruturas dissipativas (ED) em um semicondutor excitado pela luz intensa de um laser. Nestas condições forma-se um plasma de elétrons e buracos, mantido em uma situação fora do equilíbrio pela injeção contínua de energia. O sistema é tratado pelo método do operador fora do equilíbrio de Zubarev, que descreve o número de quasi-partículas excitadas em função do vetor de onda. A dinâmica é descrita por um sistema de infinitas equações não lineares acopladas, o que traz para o estudo da estabilidade linear uma grande complexidade. Um estudo anterior mostrou que, em situações estáticas, é possível a formação de ED's em semicondutores dopados. Neste trabalho fazemos uma análise de estabilidade linear para perturbações moduladas no tempo e mostramos que também há a formação de ED's

Simulação da dinâmica de um tecido celular biológico

MOMBACH, J. C. M.; ALMEIDA, R. M. C. DE;
IGLESIAS, J. R.
UFRGS

Estruturas celulares bidimensionais como espumas, secções de policristais e tecidos biológicos apresentam características similares. A tensão superficial entre as células é responsável por muitas destas características em comum. É verificado experimentalmente que estas estruturas evoluem de maneira que as distribuições que caracterizam tamanho e forma das células tornam-se estacionárias no tempo, no entanto as características deste estado estacionário para células biológicas apresenta algumas diferenças. Neste trabalho apresentamos uma simulação do crescimento de um tecido biológico, nos mesmos moldes das simulações do modelo de Potts em redes quadradas que procuram descrever a dinâmica de espumas e policristais, mas com a diferença que a mitose celular é incluída. A mitose ocorre quando a razão área/perímetro (superfície/volume em 3D), que mede a eficiência celular para trocas de nutrientes com o meio, atinge um valor crítico. Os resultados da simulação mostram que a mitose é responsável pelas características das distribuições obtidas em tecidos biológicos.

Padrões Espaço-Temporais em Rede de Reações Químicas Estudada via Autômato Celular Probabilístico

VIEIRA, F. DE M. C.; BISCH, P. M.
CBPF

Estudamos uma rede de reação composta por cinco espécies que se transformam ciclicamente, sendo uma das etapas uma reação autocatalítica. Usamos um autômato celular probabilístico bidimensional para simular o processo de reação-difusão. Surgem oscilações temporais das espécies, aglomerações das mesmas e ondas químicas.

O modelo investigado provém do estudo de transporte ativo em biomembranas. Neste contexto os padrões apresentados pelo autômato sugerem analogias com processos de sinalização celular em sistemas biológicos. É discutida a relação entre este autômato e a solução de campo médio associada, isto é, o sistema de equações diferenciais relativo à rede de reação química do sistema.

O papel da reação autocatalítica é fundamental neste problema. De fato, nos últimos tem sido demonstrado que mesmo reações químicas simples podem dar origem a estruturas espaciais a partir de flutuações nas concentrações das espécies envolvidas. Analisamos o caso da reação $A + B \rightarrow 2A$.

Sistemas Fora do Equilíbrio: Dinâmica, Caos e Instabilidades II (EST) - 21/05/93

CAOS TRANSIENTE EM ONDAS DE SPIN
AGUIAR, F. M. DE; REZENDE, S. M.; SIQUEIRA, F.
C. S.

Departamento de Física, UFPE

Sistemas caóticos podem sofrer variações bruscas ou crises quando variamos um determinado parâmetro de controle p . Em particular, um atrator estranho pode ser destruído quando ele colide com a variedade estável de uma órbita periódica instável em $p \equiv p_c$. O comportamento característico neste caso é a existência de transientes caóticos duradouros seguidos de órbitas periódicas. Neste trabalho apresentamos resultados de caos transiente em experimentos de ressonância ferromagnética de alta potência em YIG em temperatura ambiente. Como previsto teoricamente, a duração média dos transientes obedece uma lei de potência $\langle \tau \rangle \sim (p - p_c)^{-\gamma}$. Contrariando resultados anteriores^b, nós mostramos através de simulações numéricas que o modelo de dois modos de ondas de spin acoplados não-linearmente é suficiente para um entendimento qualitativo dos resultados experimentais.

^aC. Grebogi, E. Ott, F. Romeiras, and J.A. Yorke, Phys. Rev. A **36**, 5365 (1987)

^bT.L. Carroll, L.M. Pecora, and F.J. Ratchford, Phys. Rev. Lett. **59**, 2891 (1987)

MONTE CARLO DINÂMICO E SUAS APLICAÇÕES.

AIÉLO, O. E.
FFCLRP-USP

SILVA, M. A. A. DA; CALIRI, A.
FCFRP-USP

A técnica Monte Carlo tem sido aplicada à cinética de alguns sistemas, sem que uma correspondência entre o tempo real e o tempo Monte Carlo fosse firmemente estabelecida. Recentemente, Fichtlhorn e Weinberg^a estabeleceram formalmente uma correspondência entre o tempo real e o de Monte Carlo para processos de Poisson. Tal dinâmica foi aplicada à adsorção-desorção de Langmuir num sistema gás-rede que possui resultado exato, mostrando que os resultados da dinâmica Monte Carlo dão somente uma aproximação razoável. Entretanto, utilizando este mesmo sistema, mostramos que a simulação Monte Carlo dinâmica converge para o resultado exato através de um aprimoramento do mecanismo de simulação, efetuando médias para tempos "congelados". Tal técnica tem potencialidade para diversas aplicações, tais como crescimento de cristais^b, propagação epidêmica, difusão, etc..

^aJ. Chem. Phys. 95, 1090 (1991)

^bPhys. Rev. Lett. 68, 604 (1992)

UM MODELO ESTATÍSTICO PARA INSTABILIDADES COLETIVAS

LUCENA, L. DOS S.; SILVA, L. R. DA

Departamento de Física da UFRN, Natal RN 59072-970

ROUX, S.

LPMMH, ESPCI, Paris, França

Propomos um modelo estocástico para a evolução coletiva de uma população de elementos que podem assumir apenas um número finito, n , de estados (representando, por exemplo, um defeito ou dano) $d = k/n$ para $0 \leq k < n$. A evolução é dada por uma regra probabilística a qual depende apenas de uma função do dano, e diverge para $d = 1$. Consideramos principalmente os casos onde uma evolução homogênea (mesmo dano para todos os elementos) é instável. Nosso objetivo é caracterizar o estado final do sistema (i.e. a distribuição estatística do dano) no limite termodinâmico. Uma lei de escala não trivial envolvendo os estados de dano é observada. A variável de escala $(1-d)n^\beta$ incorpora a dependência em n para a maior parte das propriedades do modelo. O expoente β é apenas uma função da singularidade da probabilidade, e sua expressão é obtida a partir de um mapeamento num problema de convecção-difusão. A dependência no número de elementos leva a correções logarítmicas que são discutidas.

UM MODELO ESTATÍSTICO PARA BOLSA DE VALORES: EVOLUÇÃO TEMPORAL E ESTABILIDADE.

TSALLIS, C.; SOUZA, A. M. C. DE; CURADO, E. M. F.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Com base na microfundamentação da teoria macroeconômica, introduzimos um modelo de rede de mapas acoplados para descrever a evolução temporal de quantidades relevantes associadas à bolsa de valores. Em particular, simulações computacionais exibem o efeito de estabilidade, na bolsa de valores, da dispersão dos parâmetros externos que controlam o mapa. O modelo considera ações de uma única grande companhia e N corretores em regime competitivo com livre acesso às informações de mercado (ausência de informação privilegiada). As condições iniciais têm pouca influência, contrariamente ao que ocorre com a distribuição ("quenched" ou "annealed") dos parâmetros externos. Foi também incluído, nas equações da dinâmica, um possível termo pequeno de ruído branco aditivo. O efeito benéfico da existência de uma diversidade de "opiniões" foi intuído há meio século por Keynes. O presente trabalho dá substância quantitativa à sua especulação.

Vidros de Spin e Redes Neurais (EST)

- 21/05/93

Multifractalidade do Modelo de Vidro-de-Spin de Ising em redes Hierárquicas generalizadas

ALMEIDA, J. R. L. DE; COUTINHO, S.

Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco.

CURADO, E. M. F.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro.

Investigamos as propriedades multifractais do modelo de vidro-de-spin de Ising em redes hierárquicas generalizadas. O parâmetro de ordem de Edwards-Anderson (EA) local é calculado exatamente usando-se um método recursivo para cada realização do conjunto de acoplamentos aleatórios escolhido. Mostramos que, muito próximo e abaixo da temperatura crítica, o parâmetro de ordem EA tem uma estrutura multifractal para uma distribuição Gaussiana. A Função $F(\alpha)$ que descreve como as singularidades de medida fractal estão distribuídas foi calculada usando-se o método apropriado proposto por Chhabra e Jensen¹. Mostramos que a estrutura fractal desse sistema apresenta uma Função $F(\alpha)$ mais larga sobre o intervalo de valores de α que aquela apresentada pela estrutura fractal da magnetização local do modelo puro (ferromagnético)². Esta diferença é uma evidência que a frustração e a desordem acarretam uma estrutura multifractal intrínseca ao parâmetro de ordem de EA dos vidros de spin, isto é, a multifractalidade obtida neste modelo não é um efeito induzido pela geometria da rede como ocorre no caso do ferromagneto puro. 1. A. Chhabra e R. Jensen, Phys. Rev. Lett. 62, 1327, (1989). 2. S. Coutinho, O. Donato Neto, J. R. L. de Almeida, E. M. F. Curado e W. A. M. Morgado, Physica A 185, 271, (1992).

Propriedades Estruturais, Fractais e Fraturas (EST) - 21/05/93

ESTATÍSTICA DE FRATURAS E FRAGMENTOS EM FRAGMENTAÇÃO DIFUSIVA

GOMES, M. A. DE F.; SALES, T. R. DE M.
Departamento de Física - UFPE

Muitos processos de fragmentação em materiais frágeis dependem de processos de difusão e coalescência de falhas. Neste trabalho estudamos um modelo simples para tais processos em $d = 2$ e 3 . Neste modelo as falhas são caminhadas aleatórias com uma distribuição de probabilidade tipo lei de potência. Leis de escala estáticas e dinâmicas são encontradas e mostramos que tanto a distribuição das fraturas, quanto a dos fragmentos que vão se formando com o passar do tempo, apresentam multifractalidade de massa. Fenômenos desse tipo foram recentemente observados por Vicsek, Family e Meakin em grandes agregados limitados por difusão. Este modelo difusivo de fragmentação possui certas analogias com modelos tipo pilhas de areia e com a idéia de criticalidade auto-organizada. Ele também sugere um novo enfoque para o problema de crescimento limitado por difusão.

UM MODELO PARA FRATURAS EM MATERIAIS FIBROSOS.

BERNARDES, A. T.
UFOP
MOREIRA, J. G.
UFMG

Apresentamos um modelo de "feixe de fibras" que busca descrever a morfologia de fraturas em materiais fibrosos. O material a ser estudado é simulada por um número N de tiras paralelas. Este "feixe de fibras" é tracionado em uma direção descrever fraturas frágeis. Obtivemos vários diagramas de tensão \times alongamento, buscando a existência de relações de escala nestes gráficos. Também definimos os perfis de ruptura, a partir dos quais temos condições de calcular a possível existência de fractalidade e auto-afinidade. Finalmente, calculamos os histogramas do tamanho das fraturas que se propagam no interior do material, a fim de ter condições de definir se neste processo há criticalidade auto-organizada.

RUGOSIDADE E DIMENSÃO FRACTAL DO PAPEL RASGADO

MOREIRA, J. G.; SILVA, J. K. L. DA; KAMPHORST, S. O.; MENEZES SOBRINHO, I. L.
UFMG
BERNARDES, A. T.
UFOP

Determinamos o expoente da rugosidade α de perfis de papéis rasgados. Os resultados encontrados em mais de 140 amostras indicam o valor $\alpha = 0.67$, com uma razoável dispersão. Este expoente está relacionado com a dimensão fractal D através da expressão $D = 2 - \alpha$, a qual indica $D \approx 4/3$ neste caso. Um modelo que descreve a ruptura do papel é análogo ao problema de polímeros dirigidos a temperatura zero [Kertész, Horváth e Weber, pré-publicação (1992)]. Esse problema está relacionado com a equação KPZ em (1+1)-dimensões, para a qual foi obtido $\alpha = 2/3$ [Kardar, Parisi e Zhang, Phys. Rev. Lett. 56 889 (1986)], numa boa concordância com os resultados experimentais por nós obtidos.

MÉTODO DA RUGOSIDADE PARA A DETERMINAÇÃO DA DIMENSÃO FRACTAL DE ESTRUTURAS AUTO-AFINS.

MOREIRA, J. G.; SILVA, J. K. L. DA; KAMPHORST, S. O.
UFMG

Em estruturas auto-afins é válida a relação de escala $w \sim L^\alpha$, sendo w a rugosidade (dispersão), L o tamanho linear e α o expoente da rugosidade, também conhecido como expoente de Hurst. Em (1+1)-dimensões, mostramos que a dimensão fractal D dessa estrutura é dada pela relação $D = 2 - \alpha$. Tal resultado foi obtido a partir da construção de coberturas da estrutura auto-afim, baseadas no conceito de rugosidade local. Usamos essa relação para determinar a dimensão fractal de perfis auto-afins com dimensão pré-determinada, gerados pela função de Weiestrass. Comparamos os resultados encontrados com os obtidos por outros métodos, sendo que o método da rugosidade apresenta resultados excelentes, inclusive para estruturas muito rugosas quando D se aproxima de 2, onde os outros métodos não dão bons resultados.

INFLUÊNCIA DA GRADE NO ALGORITMO DE CONTAGEM DE CAIXA

YAMAGUTI, M.; PRADO, C. P. C. DO
IF/USP

O cálculo das curvas D_q (Dimensões Generalizadas) e $f(\alpha)$ (Espectro de Singularidades) é a forma conhecida de caracterização completa da estrutura topológica de um multifractal. Estudamos métodos numéricos de

cálculo direto de $f(\alpha)$ (*Phys. Rev. A* **40** (9) 5284 (89)), que possuem como etapa inicial o algoritmo de "contagem de caixa" (box counting). Observamos que estes métodos não são eficientes na região de $q < 0$. Concluímos que a razão da distorção dos resultados nesta região é a existência de caixas de borda, caixas que contém uma grande região de vazio da estrutura multifractal em seu interior, e cuja existência é intrínseca ao algoritmo de contagem de caixa. Propomos uma correção neste algoritmo que corrige em parte o efeito destas caixas de borda, que pode ser interpretada como a utilização simultânea de caixas de diversos tamanhos na contagem de caixa.

SEQUÊNCIA DE FIBONACCI DE QUARTA ORDEM ASSOCIADA A UMA SIMETRIA ENEAGONAL NÃO PERIÓDICA

FRANCO, B. J. DE O.; COSTA, B. V. DA; INACIO, E. C.; LICINIO, P.; PIMENTA, M. A.

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais

Uma sequência de Fibonacci de segunda ordem é definida por $F_n = F_{n-1} + F_{n-2}$. Uma sequência de Fibonacci de terceira ordem pode ser definida por $S_n = 2S_{n-1} + S_{n-1} - S_{n-3}$ ou $S_n = S_{n-1} + 2S_{n-2} - S_{n-3}$. As transformações anteriores podem ser representadas por matrizes não singulares de dimensão igual à ordem da sequência considerada. No caso da primeira das equações anteriores o auto-valor positivo da equação secular correspondente é a diagonal do pentágono de lado igual a um. Para as duas últimas equações os auto-valores positivos das respectivas equações seculares são as diagonais do heptágono de lado unitário. No presente trabalho consideramos sequências de Fibonacci de quarta ordem definidas por $S_n = 2S_{n-1} + 3S_{n-2} - S_{n-3} - S_{n-4}$, $S_n = 2S_{n-1} + 3S_{n-2} - 3S_{n-3} - S_{n-4}$ e $S_n = S_{n-1} + 3S_{n-2} + 4S_{n-3} + S_{n-4}$. As raízes positivas das equações seculares associadas às transformações anteriores são as diagonais de um eneágono de lado unitário. Para o caso da primeira das três equações anteriores obtivemos um padrão infinito com simetria eneagonal, translacionalmente não periódico. A figura obtida consiste de um eneágono central de raio D circundado por nove eneágonos de raio D; tangentes a estes últimos temos nove eneágonos de raio C. O padrão assim obtido apresenta auto-similaridade. Apresentaremos também a análise de estrutura no espaço de Fourier por difração de luz.

DIMENSIONALIDADE E PROLIFERAÇÃO EXPONENCIAL NA REDE DE BETHE

PÁDUA, A. DE; MIRANDA NETO, J. A. DE; MORAES, F.

Departamento de Física - UFPE

A rede de Bethe de coordenação q é uma estrutura ideal onde algumas técnicas resultam em soluções exatas. É definida como um conjunto infinito de pontos, cada um deles conectados a q vizinhos de tal forma que circuitos fechados não sejam formados. Para preservar a homogeneidade da estrutura e a equivalência de seus pontos, cada um de seus ramos é tradicionalmente visto como um passo para uma nova dimensão em uma rede regular de um número infinito de dimensões espaciais. Tais argumentos justificam a denominação da rede de Bethe como uma pseudorede de dimensão infinita. Neste trabalho, baseados numa construção geométrica^{a,b} da rede de Bethe, onde sua estrutura é vista como uma divisão regular de uma superfície de curvatura negativa constante - o Plano Hiperbólico (H²), analisamos as características de crescimento da estrutura, obtendo através de argumentos geométricos, informações sobre o comportamento da sua dimensionalidade a cada passo do crescimento. Verificamos a proliferação exponencial do número de pontos (N) com a distância geodésica (r) - $N \sim e^{\gamma r}$ - e estimamos a região de embebimento tridimensional da estrutura.

^aJ.A. de Miranda-Neto e Fernando Moraes, *J. Phys. I (France)* **2** (1992) 1657

^bJ.A. de Miranda-Neto e Fernando Moraes, *J. Phys. I (France)*

PROPRIEDADES DE ESCALA DO CRESCIMENTO DE UMA CULTURA DE BACTÉRIAS.

CUNHA, M. S.; SIQUEIRA, A. F.

UFCE

Descrevemos o crescimento de uma população de bactérias através de argumentos de escala. Admitimos que existe uma probabilidade (p) para que uma bactéria sobreviva e se reproduza enquanto que ela morre com probabilidade (q). Mostra-se que existe uma probabilidade crítica de sobrevivência abaixo da qual a população decresce até sua extinção completa. Em uma extensão da parte anterior foram realizados cálculos considerando uma probabilidades (p) de que uma bactéria sobrevivesse sem reprodução. Os resultados obtidos para uma hipótese de escala foram comparados com aqueles fornecidos por uma distribuição de probabilidades considerando-se o número de gerações de bactérias, mostrando excelente concordância. Além disso, tratamos o problema do ponto de vista numérico, através da simulação de Monte Carlo, o que conduz a resultados semelhantes aos de percolação. Finalmente mostra-se que este problema é equivalente ao crescimento de uma árvore de Cayley com número de coor-

denação 3 e com alguns ramos extintos.

MODELO DE POTTS NA GAXETA DE SIERPINSKI: UM TRATAMENTO VIA MATRIZES DE TRANSFERÊNCIA

ANDRADE, R. F. S.
UFBA

Calculamos as propriedades termodinâmicas do modelo de Potts (q qualquer) na gaxeta de Sierpinski. Aplicamos o método de matrizes de transferência adaptado para o estudo de fractais ramificados, no qual obtemos mapas discretos para a energia livre f e comprimento de correlação ξ de uma dada geração na construção do fractal em função da anterior. Consideramos o modelo homogêneo, com todas as ligações idênticas, e o não homogêneo, onde as ligações horizontais podem ter um acoplamento diferente. Investigamos duas situações de interesse especial: a divergência de ξ no caso ferromagnético e a entropia residual no caso antiferro. O primeiro estudo mostra que a divergência extremamente rápida ($\xi \exp(\exp(1/T))$) observada para o modelo de Ising prevalece no caso Potts. Já a entropia residual apresenta um comportamento mais rico do que caso Ising, havendo uma distinção entre o caso homogêneo e o não homogêneo.

TERMODINÂMICA DO MODELO DE ISING SUBMETIDO A CAMPO EXTERNO EM FRACTAIS DO TIPO SIERPINSKI GASKET

REDINZ, J. A.; MAGALHÃES, A. C. N. DE
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Calculamos diversas propriedades termodinâmicas do modelo de Ising (nos casos ferro e antiferromagnético) com interação a dois e três spins sujeito a um campo magnético externo em fractais que são generalizações da família Sierpinski gasket. Tais generalizações são constituídas de m folhas do fractal Sierpinski gasket com lado $b = 4$ conectadas por três vértices em cada estágio de construção do fractal. Utilizamos equações de recorrência exatas para a função de partição do sistema em diferentes hierarquias da rede. O diagrama de fases deste modelo foi determinado recentemente, tendo sido obtida uma fase não usual à baixas temperaturas onde, para certos valores dos parâmetros do sistema, as correlações entre spins decaem algebricamente com a distância. A existência desse tipo de fase não usual foi originalmente sugerida por Berker e Kadanoff, podendo ocorrer em sistemas com estado fundamental altamente degenerado, ou seja, sistemas com entropia por partícula à temperatura nula diferente de zero.

SEQUENCIA DE FIBONACCI DE TERCEIRA ORDEM ASSOCIADA A UMA SIMETRIA HEPTAGONAL NÃO PERIÓDICA (II)

FRANCO, B. J. DE O.; COSTA, B. V. DA; INACIO, E. C.; LICINIO, P.; PIMENTA, M. A.
UFMG

Uma simetria pentagonal translacionalmente não periódica é associada a uma sequência de Fibonacci de segunda ordem definida por $F_n = F_{n-1} + F_{n-2}$ e $A \rightarrow AB, B \rightarrow A$.

Uma tesselação do plano com simetria heptagonal não periódica pode ser associada a uma sequência de Fibonacci de terceira ordem dada por $S_n = 2S_{n-1} + S_{n-2} - S_{n-3}$ e $A \rightarrow C, B \rightarrow CB, C \rightarrow CBA$ ou $S_n = S_{n-1} + 2S_{n-2} - S_{n-3}$ e $A \rightarrow B, B \rightarrow AC, C \rightarrow CBA$.

A transformação matricial correspondente à sequência definida pela última equação é dada por uma matriz não singular 3×3 cujos elementos são inteiros não negativos. A equação secular correspondente é dada por $x^3 - x^2 - 2x + 1 = 0$ cujas soluções positivas são α e $\frac{1}{\beta}$, sendo $\alpha \simeq 1.802$ e $\beta \simeq 2.247$.

No presente trabalho, usando seis formas básicas, cujos lados são associados a α e β , construímos uma tesselação do plano com simetria heptagonal correspondente à última das sequências acima definidas. O padrão infinito obtido é translacionalmente não periódico, apresentando auto-similaridade. Apresentaremos também a análise de estrutura no espaço de Fourier por difração de luz.

GENERALIZED LOCALISATION LENGTHS AND WAVELENGTHS OF VIBRATIONAL MODES ON FRACTAL LATTICES.

PETRI, A.

Istituto di Acustica del Consiglio Nazionale delle Ricerche
"O.M. Corbino", Via Cassia 1216, I 00189 Roma, Italia
RUOCCO, G.

Dipartimento di Fisica dell' Università, via Vetoio, I
67010 Coppito (L'Aquila), Italia

Scaling arguments show that localised modes of self-similar structures, which have been named fractons, possess a characteristic length l_ω which behaves as a power of the mode frequency ω [1]. It has been proposed [2] that such length could represent at the same time the localisation length, the scattering length and the relevant wavelength of these modes. This implies that l_ω should not depend on the way it is defined, being a universal length in some sense. In order to test this conjecture we have solved numerically the discretised form of the scalar wave equation on two-dimensional percolating clusters at the threshold of percolation. We considered the generalized inverse participation ratios of single modes as estimates of their localisation length, and the relevant wavelengths were supposed to be pro-

portional to the wavevector k_M having the maximum weight in the Fourier transform of the correlation function of each mode. Both site and bond percolating lattices were considered. We found that, in average, all these quantities actually follow the same assumed scaling law, therefore supporting the idea of a universal length. In this respect the situation is different from that of the electronic Anderson transition at the mobility edge, where generalized localisation lengths possess different characteristic exponents [3]. At the same time all the computed lengths exhibit very strong fluctuations from the expected values, also when looking at modes very close in frequency. Our results do not point out any apparent correlation among fluctuations in the localisation length and in the relevant wavelength. These findings, together with other previous results, raise doubts about the effective utility of l_w for describing dynamical properties of fractons.

[1] S. Alexander and R. Orbach, *J. Phys. (Paris) Lett.* 43, L625 (1982).

[2] S. Alexander, *Phys. Rev. B* 40, 7953 (1989).

[3] T.-M. Chang, J. D. Bauer and J. L. Skinner, *J. Chem. Phys.* 93, 8973 (1991)

Sistemas Quânticos (EST) – 21/05/93

VIDRO DE SPIN DE ISING EM CAMPO TRANSVERSO

SANTOS, R. R. DOS; BOECHAT, B.
PUC-Rio

O diagrama de fases do vidro de spin de Ising tridimensional em campo transversal obtido experimentalmente ^a mostra o deslocamento da temperatura crítica (T_c) do sistema com o campo magnético transversal aplicado (Γ). Do ponto de vista teórico este sistema tem sido estudado somente dentro da aproximação de longo alcance contida na teoria de campo médio. Neste trabalho realizamos uma extensão, para sistemas quânticos, do tratamento de grupo de renormalização no espaço real que temos empregado para o estudo de sistemas clássicos ^b. Neste tratamento acompanhamos a evolução das distribuições de probabilidades dos parâmetros físicos relevantes do Hamiltoniano do sistema. Nosso método fornece diretamente o diagrama de fases, expoentes críticos e informações sobre o comportamento crítico dominante do sistema. Finalmente, realizamos uma comparação com os resultados experimentais obtidos por Rosenbaum et. al.

^aRosenbaum F. et. al.; *J. Appl. Phys.* (1991)

^bBoechat B. e Continentino M.A.; *Phys. Rev. B* (1991)

DINÂMICA NO MODELO DE ISING CLÁSSICO EM UM CAMPO TRANSVERSO

BONFIM, O. F. DE A.

University of Houston

FLORENCIO JR, J.

Pennsylvania State University

Nós estudamos a função de correlação de spin dependente do tempo do modelo de Ising clássico em uma dimensão usando uma técnica de Monte Carlo-Dinâmica Molecular. A função de correlação é obtida para vários valores do campo transversal. Nós observamos um "crossover" de um comportamento oscilatório para um não-oscilatório quando o campo transversal tem o seu valor reduzido. Nós também usamos o método das relações de recorrência para obter os seis primeiros elementos da representação de fração continuada da transformada de Laplace da função de correlação. Os resultados analíticos são então comparados com os da simulação. Nós também fazemos uma análise crítica da confiabilidade de esquemas de extrapolação para a fração continuada para se inferir o comportamento a tempos longos.

TRANSIÇÕES DE FASE NO MODELO DE HUBBARD 1-D

LUZ, D. M.

UFF

SANTOS, R. R. DOS

PUC

Estudamos o diagrama de fases do modelo de Hubbard, com interação U entre elétrons no mesmo sítio e V , entre os primeiros vizinhos. Este diagrama é conhecido no limite de banda semi-cheia, através de simulação de Monte Carlo e teoria de perturbação, mas existem dúvidas sobre a natureza das transições, se contínua ou de primeira ordem. Calculamos numericamente as auto-energias e auto-vetores de uma cadeia linear com N sítios, para diferentes valores de U e V . Consideramos condições de contorno periódicas (anti-periódicas), para um número par (ímpar) de elétrons. Como o número de estados de base cresce rapidamente com N , usamos simetrias do sistema (número de spin, inversão temporal e simetria de translação), para separar em blocos a matriz a ser diagonalizada. O algoritmo de Lanczos e a técnica de 'Hashing Table', permitem uma redução de tempo de CPU e de memória.

O EFEITO DE DESORDEM COM CORRELAÇÕES ESPACIAIS DE LONGO ALCANÇE NA CONDUTIVIDADE DE UM METAL

VARRIALE, M. C.; THEUMANN, A.
UFRGS

Em uma publicação anterior(1) nós estudamos os efeitos de correlações de longo alcance entre impurezas na transição de localização, com técnicas de grupo de renormalização, enquanto no presente trabalho nos estudamos o problema pelo cálculo da condutividade. Investigamos os efeitos do espalhamento de elétrons não interagentes por um potencial estático de impurezas distribuídas aleatoriamente, que consiste na superposição de um potencial de contato e de um potencial de longo alcance com decaimento algébrico. Este potencial aleatório tem correlações espaciais algébricas de longo alcance na variância com intensidade W_1 enquanto a intensidade das correlações de curto alcance é indicada por W_0 . Estudamos as correções quânticas à condutividade em um cálculo perturbativo diagramático a primeira ordem em W_1 conservando a soma de infinitos diagramas de Feynman a toda ordem em W_0 que são responsáveis pelo efeito de localização fraca. Demonstrase que para a contribuição dominante no regime de localização fraca, em duas e três dimensões, as singularidades são do mesmo tipo daquelas decorrentes de impurezas não correlacionadas, parecendo sugerir que o efeito de longo alcance possa ser completamente absorvido no coeficiente de difusão. Mais precisamente, no cálculo só dos diagramas maximamente cruzados, as contribuições de primeira ordem em W_1 cancelam-se exatamente. Estes resultados são comparados com teorias existentes no efeito de interações entre impurezas na localização fraca (2).

(1) MC Varriale and Alba Theumann, J. of Physics A, vol. 23, L719S, (1990)

(2) MT Béal Monod and G. Forgacs, Phys. Rev. B vol. 37, 6646 (1988)

MECÂNICA ESTATÍSTICA QUÂNTICA DE NÃO EQUILÍBRIO DE UM MODELO SOL/UVEL NÃO TRIVIAL

SCHERER, C.

Instituto de Física, UFRGS.

Um modelo atômico de pares de spins interagentes, com interações estocásticas entre átomos, é tratado no contexto da Mecânica Estatística Quântica de Não Equilíbrio. No caso mais usual os spins envolvidos são o nuclear e o da coroa eletrônica e a interação entre eles (interação hiperfina) é da forma $H_i = AIJ$. A interação interatômica pode corresponder às colisões moleculares, no caso de gás ou a espalhamento de fônons, no caso de estado sólido[1]. Alguns conceitos fundamentais, usualmente introduzidos apenas de modo for-

mal[2], são estudados através de exemplos explícitos. Tais conceitos incluem o de variáveis relevantes e irrelevantes e a extensão da idéia de "coarse graining" para a Mecânica Estatística Quântica. As quantidades termodinâmicas dependentes do tempo, magnetização e entropia, são calculadas. O paradoxo da irreversibilidade termodinâmica, assim como o conceito de "entropia observacional" [2,3] também são considerados.

Referências:

[1] C. Scherer, Nucl. Phys. A157, 81 (1970)

[2] J.P. Dougherty, *Foundations of Non-Equilibrium Statistical Mechanics*, Preprint (University of Cambridge, 1992)

[3] K.G. Denbigh and J.S. Denbigh, *Entropy in Relation to Incomplete Knowledge*, Cambridge University Press (1985).

Correlações Quânticas em uma nova Formulação Semi-Clássica.

MONACO, R. E. L.; RECAMI, E.

Departamento de Matemática Aplicada-IMECC;
UNICAMP

Um novo quadro teórico de natureza semi-clássica que preserva a noção de trajetória é desenvolvido no presente trabalho. Esta nova formulação tem como objetivo descrever as correlações da teoria quântica sem precisar do colapso da função de ondas, nem de estados estendidos de probabilidade. Esta nova teoria realista é ilustrada para o caso de duas partículas idênticas de spin $\frac{1}{2}$ que se encontram no estado singlete. São demonstradas as desigualdades de Bell, num contexto puramente geométrico. Assim também as interferências quânticas observadas na experiência das duas fendas e as interferências observadas no efeito de Aharonov e Bohm são explicadas por esta nova formulação da teoria quântica, a qual não encontra contradições com o princípio de localidade da teoria de relatividade de Einstein (por exemplo, como foi exposto no famoso paradoxo EPR, sugerido pelo próprio Einstein).

PHENOMENOLOGICAL MODEL OF BROKEN SYMMETRY FOR SUPERCONDUCTIVITY.

FERRAZ, A.; VIET, N. A.

International Centre of Condensed Matter Physics -
ICCMP Universidade de Brasília - Caixa Postal 04667
70919-900 Brasília - DF - Brazil.

Excitations from the ground state of a typical solid have either fermionic or bosonic character. Thus, one might expect supersymmetry in condensed matter physics to arise as a relation between these excitations. The first achievements in this prospect were made by Y. Nambu, who has discovered that there is a kind of quasisupersymmetry in the BCS mechanism of superconductivity. In this work, a simple phenomenological model for su-

perconductivity based on the Nambu's idea of spontaneous symmetry breaking has been developed, without referring to the specific pairing mechanism, with two parameters: the Yukawa type coupling constant and the energy gap. It is shown that, in a reasonable approximating scheme, the static part of the effective Hamiltonian of uncoupled and coupled (bosonic) pairs of two fermionic excitations have a supersymmetric behaviour. This can be investigated by (1+1) supersymmetric quantum mechanics. This Nambu's supersymmetry in superconductors may be a signal of more fundamental aspect of matter and their excitations in condensed matter physics.

A EQUAÇÃO DE PSEUDO-DIFUSÃO E A ENTROPIA DE INFORMAÇÃO DOS ESTADOS COERENTES COMPRIMIDOS.

MIZRAHI, S. S.; MARCHIOLLI, M. A.
Universidade Federal de São Carlos

Os estados coerentes comprimidos são caracterizados por três variáveis a saber: o momentum, a coordenada e o parâmetro de compressão; o que nos possibilita escrever uma função distribuição de probabilidades associada a uma função de onda genérica. Verificamos que esta função distribuição de probabilidades é solução de uma equação diferencial parcial - a equação de pseudo-difusão, permitindo estender o conceito de entropia de informação (introduzido por A. Wehrl¹ para os estados coerentes) para os estados coerentes comprimidos. Em seguida, obtemos os funcionais de entropia que podem ser utilizados como uma medida das correlações quânticas entre as variáveis do espaço de fase, para uma dada função de onda. Também apresentamos algumas propriedades e discutimos o uso da desigualdade entrópica como um conceito que complementa a relação de incerteza de Heisenberg. 1 - A. Wehrl, *Rev. Mod. Phys.* 50 (1978) 221.

A COMPETIÇÃO ENTRE DISSIPAÇÃO E AMPLIFICAÇÃO DA ENERGIA PARA A LAGRANGEANA DE HAVAS.

MIZRAHI, S. S.; MARCHIOLLI, M. A.
Universidade Federal de São Carlos

Consideramos a Lagrangeana proposta por Havas¹ para realizarmos um estudo sobre a competição entre dissipação e amplificação da energia. Para tanto, obtemos o operador evolução temporal para o sistema e consequentemente, a matriz densidade para um estado puro. As funções distribuição de probabilidades são obtidas para duas situações distintas: o estado coerente e o estado de número. Como consequência, realizamos um estudo das correlações quânticas entre as variáveis do espaço de fase, através dos funcionais de entropia. Finalmente, as variâncias das quadraturas são calculadas, permitindo verificar o fenômeno de compressão.

Também calculamos o possível efeito de tunelamento, através da Hamiltoniana invertida, ao considerarmos os coeficientes de transmissão e de reflexão, para o sistema em questão. 1 - P. Havas, *Nuovo Cimento Suppl.* 5, 363 (1957).

A ENTROPIA DE INFORMAÇÃO DOS ESTADOS COERENTES COMPRIMIDOS PARA A HAMILTONIANA DE BATEMAN-CALDIROLA-KANAI (B.C.K.).

MIZRAHI, S. S.; MARCHIOLLI, M. A.
Universidade Federal de São Carlos

Obtemos o operador de evolução temporal para a hamiltoniana B.C.K., mediante uma transformação unitária na equação de Schroedinger, onde é utilizado o operador de compressão no espaço de fase. Através da matriz densidade para um estado puro do sistema, calculamos as funções distribuição de probabilidades para duas situações distintas: (i) para um estado coerente e (ii) para o estado de número. Em ambos os casos, obtemos os funcionais de entropia e assim fazemos um estudo das correlações quânticas entre as variáveis do espaço de fase. Por último, consideramos o efeito de tunelamento para a hamiltoniana B.C.K. invertida, onde calculamos os coeficientes de transmissão e de reflexão para o sistema em questão.

O MODELO DE HEISENBERG ANTI-FERROMAGNÉTICO SPIN 1/2 NUMA REDE TRI-DIMENSIONAL APLICADO AOS ÓXIDOS DE COBRE

MALVEZZI, A. L.; ALCARAZ, F. C.
Universidade Federal de São Carlos

O modelo de Heisenberg anti-ferromagnético spin 1/2 numa rede bi-dimensional é a base para o estudo teórico da fase isolante do $La_{2-x}S_xCuO_4$ e outros materiais supercondutores de alta temperatura crítica baseados em óxidos de cobre. Métodos tais como Monte Carlo Quântico, expansão em série e diagonalização exata sugerem para esse modelo um estado fundamental anti-ferromagnético, o que está em boa concordância com os dados experimentais para o La_2CuO_4 . Uma característica desses materiais é a rápida destruição da ordem anti-ferromagnética pela dopagem. O estado condutor que surge a partir de uma certa dopagem seria não usual, diferente do líquido de Fermi comum. Uma maneira de desestabilizar o antiferromagnetismo no modelo de Heisenberg é introduzir frustração, i.e., acrescentando interações de segundos vizinhos. Isso porém parece não representar o efeito de dopagem em toda sua extensão. Outra forma de controle da temperatura de Neel seria através de um fraco (em comparação com o intraplano) acoplamento interplanos representando uma interação entre os planos CuO_2 , os quais estão

sempre presentes nesses materiais, sendo provavelmente os responsáveis pela supercondutividade. Em nosso trabalho vamos explorar essa idéia através do estudo de redes finitas. Mais precisamente, estudaremos o efeito de um fraco acoplamento entre duas redes Heisenberg de 16 sítios cada (4×4). Esperamos observar um rápido enfraquecimento da ordem anti-ferromagnética no estado fundamental com o aumento do acoplamento interplanar. Espectro e auto-estados serão obtidos pelo algoritmo de Lanczos, secundado pela implementação da simetrias $U(1)$, translacional (sob condições periódicas de contorno) e geométricas.

RENORMALIZATION GROUP STUDY OF THE t_J MODEL

MELLO, E. V. L. DE

Instituto de Física da Universidade Federal Fluminense

The t - J Model has been proposed to describe the physics of copper oxide planes in high temperature superconductors. A quantum real space renormalization group method is developed in order to study the t - J Hamiltonian in a square lattice. A scheme to deal with the electron holes in terms of an "annealed" dilution is introduced. Such scheme allows one to take into account the electron and hole motion. The zero temperature phase diagram is analyzed for electron concentrations near the half-filled band as a function of J/t . A critical line is found which separates two distinct regions; one of a gas of holes with high mobility in an antiferromagnetic background and another consisting of a phase in which the electron-holes segregate into a hole-rich and a pure antiferromagnetic region. The results are compared with several different techniques.

RECURRENCE AND DECOHERENCE TIMES OF QUANTUM STATES IN A MEASUREMENT PROCESS.

MIZRAHI, S. S.

UFSCar

MOUSSA, M. H. Y.

IFQSC-DFCM-USP

OTERO, D.

Laboratório de Física Matemática, CNEA, Buenos Aires

We revisit a time-reversible quantum measurement model proposed by W.H. Zurek [Phys. Rev. D **24**,1516(1981); **26**,1862(1982)] which, besides the System and measurement Apparatus, also involves the Environment. Here, we implement this model on two points: 1) We assume that the environment is thermalized, with all its 2-level atoms having the same energy spacing. 2) We consider that all eigenvalues of the Apparatus-Environment interaction are not all the same for the atoms of the environment, instead, the eigenvalues follow an inverse distance power law according to the "proximity" of these to the apparatus. We

verify that the recurrence time is only sensible to the number of environment atoms (N), while the decoherence time is much more sensible to the temperature than to N . The ratio of these two characteristic times exhibit a behavior (decreasing with inverse power of N) compatible with what is supposed to happen in a measurement process, when the collapse or reduction of the System-Apparatus quantum state takes place.

Cálculo de Monte Carlo para o estado fundamental do antiferromagneto de Heisenberg quântico bidimensional.

SAUERWEIN, R. A.; OLIVEIRA, M. J. DE

Instituto de Física da Univ. de São Paulo

Apresentamos um método de Monte Carlo através do qual estudamos as propriedades do estado fundamental do antiferromagneto de Heisenberg quântico de $\text{spin}=\frac{1}{2}$ em uma rede quadrada. O método baseia-se na estimativa do maior autovalor de uma matriz cuja única restrição é a de que seus elementos sejam todos não negativos. Em sistemas de spins clássicos o método pode ser aplicado diretamente sobre sua matriz de transferência, contudo em sistemas quânticos a restrição imposta pelo método não está, em geral, garantida. Entretanto usando o critério de Marshall mostramos que o sistema presentemente considerado pode ser transformado de modo a satisfazer a restrição exigida. Finalmente calculamos a energia do estado fundamental e a magnetização "staggered" para diversas redes de $L \times L$ spins, com $L=4,6,8,12$, e 16. Os valores obtidos são em seguida extrapolados para o limite termodinâmico.

Propiedades variacionales de la entropía relativa, en mecánica estadística cuántica.

NEIROTTI, J. P.

IFUSP

RAGGIO, G. A.

Universidad Nacional de Córdoba - Córdoba

El problema de encontrar el estado que maximice a la entropía, a un dado valor fijo de energía del sistema, fue estudiado por Gibbs a finales del siglo pasado, en el contexto de la mecánica estadística clásica. En teoría cuántica, el problema análogo es el que se corresponde con encontrar el estado que maximice a la funcional entropía relativa, a un dado valor fijo de energía.

Esta generalización del problema de Gibbs fue estudiada por M. B. Ruskai, quien encontró una fórmula para la entropía relativa máxima y una expresión para el estado correspondiente, en casos particulares.

Se ha realizado un estudio de las propiedades variacionales de la entropía relativa, generalizando los resultados de M.B. Ruskai. Haciendo uso de la fórmula variacional de D. Petz, se encontró una expresión para la entropía relativa máxima y otra para el estado maximizador correspondiente, para un valor real cualquiera

de energia.

Los resultados fueron comprobados en el espacio de dimensión 2.

Vidros de Spin e Redes Neurais (EST)

- 21/05/93

Instabilidades de Almeida-Thouless para o Vidro-de-Spin de Potts com quatro estados

NOGUEIRA JUNIOR, E.

Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco
NOBRE, F.

Departamento de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Norte

ALMEIDA, J. R. L. DE; COUTINHO, S.

Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco

O estudo do modelo de Sherrington-Kirkpatrick (SK) como um modelo para sistemas magnéticos desordenados tem despertado grande interesse nos últimos vinte anos. Diversas generalizações do modelo SK, tais como, Potts escalar/vetorial, Ashkin-Teller, XY, Heisenberg, etc, foram propostas e parcialmente estudadas na literatura. No presente trabalho investigamos o diagrama de fases do modelo Vidro-de-Spin de Potts vetorial (ou "relógio") com quatro estados no limite de interações de alcance infinito em presença de um campo magnético externo. Na representação das variáveis de spin com duas componentes, $\vec{S}=(S_x, S_y)$, para campos magnéticos direcionados segundo um dos eixos cartesianos, $\vec{h}=(h_x, 0)$ ou $\vec{h}=(0, h-y)$, mostramos que existe apenas uma única linha de Almeida-Thouless tal como ocorre no modelo de Sherrington-Kirkpatrick. Todavia, para o caso de um campo magnético em uma direção arbitrária $\vec{h}=(h_x, h_y)$, existe uma superfície de instabilidade para a qual, cortes diversos revelam a presença de duas possíveis linhas de Almeida-Thouless.

O Modelo de Ghatak e Sherrington com spin semi-inteiro

SILVA, R. T. DA

Departamento de Física-UFPA-JP

YOKOI, C. S. O.; SALINAS, S. R. A.

Instituto de Física-USP

O modelo de Ghatak e Sherrington(GS) para vidros de spin é dado pela hamiltoniana

$$\mathcal{H} = - \sum_{(i,j)} J_{ij} S_i S_j - \sum_i D S_i$$

onde $S_i = +S, +S-1, \dots, -S$, a primeira soma é sobre pares de sítios de uma rede cristalina, e $\{J_{ij}\}$ é um

conjunto de variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas, caracterizadas pela mesma distribuição gaussiana do modelo mais conhecido de Sherrington e Kirkpatrick. Para spin S inteiro, sem quebra de simetria entre réplicas, o modelo de GS pode exibir transição de primeira ordem e um ponto tricrítico. Recentemente o problema com $S = 1$ foi analisado por F.A.da Costa, C.S.O.Yokoi e S.R.A.Salinas. No intuito de examinar a possibilidade de ocorrência de transição de primeira ordem no interior da fase ordenada estudamos o modelo com spin $S = 3/2$, que é um caso típico de spin semi-inteiro. Pretendemos apresentar resultados para comparar os dois casos discutidos (spin inteiro e spin semi-inteiro). Não há possibilidade de transição de primeira ordem para spins semi-inteiros.

O ESPAÇO DE FASE DAS INTERAÇÕES EN REDES NEURAIS TOTALMENTE CONEXAS COM SIMETRIA DEFINIDA

THEUMANN, A.

UFRGS

Calculamos a fração do espaço de fases das interações que resolvem o problema de armazenar um numero extensivo de padrões, em função da fração de armazenamento e da simetria das matrizes de interação. O cálculo é realizado para redes conexas não diluídas com valores arbitrários da conectividade, extendendo o método de Gardner-Gutfreund e Yekutieli na ref.(1), o que nos leva a avaliar uma função de partição efetiva Z_E . Nós provamos que a contribuição dominante á $\ln(Z_E)$ é dada pela soma de diagramas com a topologia de anéis duplos, um resultado que pode ser confirmado pela avaliação independente de $\ln(Z_E)$ com o método de Thouless, Anderson and Palmer que conduz ás equações de TAP na ref.(2). O problema é resolvido com a suposição que somas extensivas do tipo $\sum_j A_{i,j}$ independem do sítio inicial "i", como foi feito no trabalho original da ref.(1). Nós obtemos que o resultado de Gardner, Gutfreund e Yekutieli, derivado por eles no caso de extrema diluição, permanece válido para valores finitos arbitrários da conectividade da rede.

(1) E Gardner, H Gutfreund and I Yekutieli, J. Phys. A vol.22, 1995(1989)

(2) D J Thouless, P W Anderson and R Palmer, Philos. Magazine vol 35,59

GENERALIZAÇÃO COM RUIDO E ESTRUTURA DOS ESTADOS META-ESTÁVEIS NO MODELO DE HOPFIELD.

KREBS, P. R.; THEUMANN, W. K.
UFRGS

A criação de representações para conceitos $\{\xi_i^\mu\}$, $\mu = 1, \dots, p$, a partir da aprendizagem por exemplos $\{\xi_i^{\mu\nu}\}$, $\nu = 1, \dots, s$, na presença de ruído sináptico (temperatura) é estudada através da teoria de campo médio e simulações numéricas. Observamos que o aumento da temperatura melhora a capacidade de generalização, quando o número de conceitos é finito ($\alpha \equiv p/N = 0$), sendo necessário um menor número de exemplos para que a rede atinja a fase de generalização. Construímos os diagramas de fases nos quais caracterizamos as fases de recuperação, generalização e paramagnética. Para um número infinito de conceitos ($\alpha \neq 0$) observamos o surgimento de uma fase de vidro de spin que compete com a fase de generalização, e o número de exemplos necessários para que a fase de generalização seja atingida aumenta com a temperatura. O comportamento do número crítico de exemplos obedece a uma lei de potência com a correlação entre os exemplos e conceitos ($s_c \sim b^{-\gamma}$). Obtivemos as curvas de generalização em função do número de exemplos para diversos valores de temperatura e α . As simulações numéricas realizadas corroboram as previsões analíticas. Obtemos o número de estados meta-estáveis em função da correlação, de α e do overlap com os exemplos.

MODELO "NAÏVE" PARA VIDRO DE SPINS COM $S = 1$

COSTA, F. A. DA; NOBRE, F. D.
UFRN

Os efeitos de campo cristalino uniforme em um vidro de spins com interações de alcance infinito e spin $S = 1$ tem sido objeto de estudos recentes ^{a b}. Em baixas temperaturas este modelo apresenta um comportamento bastante complexo devido a presença do campo de anisotropia. Neste regime, a aproximação de simetria entre réplicas mostra a existência de uma linha de transições de primeira ordem entre as fases vidro de spins e paramagnética, enquanto a análise de estabilidade da fase vidro de spins revela um comportamento muito mais rico do que no modelo Sherrington-Kirkpatrick. Neste trabalho apresentamos uma generalização para spins $S = 1$ do modelo "naive" introduzido por Bray, Sompolinsky e Yu, onde incluímos o campo de anisotropia cristalino. Apesar do tratamento analítico e numérico deste modelo ser mais fácil, os resultados obtidos na aproximação de simetria entre réplicas mostram que o diagrama de fases é similar ao diagrama do modelo anterior. Alguns resultados da análise de estabilidade da solução vidro de spins serão apresentados. Investiga-

mos ainda a possibilidade dos dois modelos apresentarem comportamentos semelhantes na fase vidro de spins, especialmente na região de baixas temperaturas.

^aF.A. da Costa, C.S.O. Yokoi and S.R. Salinas, submitted to J. Phys. A:Math. and Gen.

^bT. Yokota, J. Phys.:Condens. Matter 4, 2615(1992).

Expansões de baixas temperaturas e recuperação de imagens

MATTOS, C.; CATICHA, N.
USP

Recentemente vários métodos da mecânica estatística tem sido usados com relativo sucesso para tratar o problema de recuperação de imagens naturais em diversas áreas. A idéia por trás destes métodos é que, via o teorema de Bayes, o campo de imagens pode ser interpretado com uma variável estocástica com um distribuição de Gibbs. Campo médio, grupo de renormalização e idéias derivadas de simulações Monte Carlo tem servido para calcular os valores esperados do campo que representa a imagem. Neste trabalho apresentamos um algoritmo novo, que se baseia em expansões de baixas temperaturas, o que permite obter imagens recuperadas e detecção de contornos. Mostramos algumas aplicações em figuras artificiais e alguns resultados preliminares do tratamento de imagens naturais, tipicamente, de origem médica. O problema de otimização de parâmetros será discutido.

GENERALIZAÇÃO EM REDES DE NEURÔNIOS

BRANCHTEIN, M. C.; ARENZON, J. J.; IGLESIAS, J. R.; ALMEIDA, R. M. C. DE
Instituto de Física - UFRGS

A capacidade do modelo de Hopfield ^a e do modelo RS ^b ao generalizar conceitos a partir de exemplos é estudada através de simulações numéricas. Exemplos com ruído são ensinados e testamos se a rede aprende o conceito subjacente. Vários parâmetros são modificados ao longo da simulação: o número de conceitos e exemplos e o ruído inicial nos exemplos. A transição de primeira ordem entre a fase de recuperação e a de generalização no modelo de Hopfield, prevista pela teoria de campo médio, é obtida também numericamente. Também são comparadas, quando ambas existem, as bacias de atração dos conceitos e dos exemplos, assim como o tempo médio necessário para a convergência (cuja dispersão nos fornece informações sobre a presença de estados espúrios ao redor das memórias).

^aM.C. Branchtein e J.J. Arenzon, J. Physique I 2 (1992) 2019

^bJ.J. Arenzon, R.M.C. de Almeida e J.R. Iglesias, J. Stat. Phys. 69 (1992) 55

PRÉ-PROCESSAMENTO EM REDES NEURAIS

CARVALHAES, C. G.; PENNA, T. J. P.; OLIVEIRA, P. M. C. DE

Instituto de Física - Universidade Federal Fluminense

Uma das limitações dos modelos atuais de Redes Neurais é a dependência em relação à localização, orientação e tamanho precisos dos padrões armazenados. Tais casos podem, no entanto, ser tratados com a construção de um pré-processador de padrões adequado. O objetivo do pré-processamento é transformar os padrões originais em novos padrões invariantes sob um dado conjunto de transformações. Os novos padrões são então armazenados na rede sem nenhuma alteração na dinâmica do modelo. Neste trabalho, nós simulamos o modelo RS equipado com um pré-processador que utiliza a transformada de Fourier para garantir a invariância dos padrões quanto a translações, rotações e transformações de escala. Os resultados até agora obtidos mostram que as bacias de atração reduzem-se bastante, devido a presença de correlação, introduzida pela transformada de Fourier, entre os padrões pré-processados.

Estudo da Bacia de Atração do Modelo de Hopfield diluído com padrões correlacionados

BARBOSA, M. C. B.; THEUMANN, W. K.

UFRGS

Consideramos a dinâmica paralela desenvolvida por E. regra de Hebb a fim de estudar as bacias de atração em uma rede de N neurônios com p padrões, sendo dois correlacionados entre si e $p-2$ descorrelacionados. Obtemos uma expressão para a evolução de uma dada configuração inicial que tenha "overlaps" finitos com os dois padrões correlacionados entre si e nenhum "overlap" com os demais. Achamos uma bacia de atração extensa caracterizada por apresentar uma recuperação de 100% é encontrada para valores de armazenamento $\alpha = p/N$ abaixo de um valor finito que depende da correlação generalizando um trabalho anterior de Derrida, Gardner e Zippelius (DGZ). Aparece também, diferindo de DGZ, uma bacia de atração "estreita" para valores superiores a este limite. Para $\alpha > 2$ não se observa mais recuperação. Os aspectos qualitativos e a porcentagem da recuperação não dependem da correlação.

"SONHOS NORMALIZADOS" EM REDES NEURAIS DE ATRADORES

KUVA, S. M.; CATICHA, N.

** Instituto de Física - USP*

O processo de remoção de mínimos espúrios da energia através de "sonhos" foi estudado numericamente em uma rede de Hopfield analógica.

Introduzimos uma versão normalizada para o algoritmo, impondo $|J| = cte$ ao longo dos sonhos. Esta

versão mostrou ser capaz de aumentar ainda mais a capacidade α da rede, além de apresentar uma seletividade no processo de desestabilização dos mínimos, de acordo com critérios relacionados à própria estabilidade anterior ao sonho.

Estudamos o comportamento das estabilidades em função do número de sonhos tanto para o caso do algoritmo tradicional quanto para a versão normalizada nas diferentes fases apresentadas pelo modelo e fazemos comparações com alguns resultados analíticos.

INTERPOLAÇÃO ENTRE OS VIDROS DE SPINS XY E POTTS VETORIAL

PIÓLHO, F. A. P.; NOBRE, F. D.

UFRN

O vidro de spins XY com interações de alcance infinito apresenta, sob o ponto de vista de quebra de simetria entre réplicas, uma função parâmetro de ordem similar à do modelo Sherrington-Kirkpatrick. No entanto, em sistemas onde as variáveis de spins não apresentam simetria por inversão ($-\vec{S}_i \notin \{vec{S}_i\}$), a função de Parisi pode mudar radicalmente, a exemplo do que acontece para o modelo Potts escalar e os vidros quadrupolares ^a. No presente trabalho consideramos o vidro de spins XY com interações de alcance infinito, na presença de uma anisotropia D que privilegia p orientações no plano. Tal modelo interpola entre os vidros de spins $XY (D \rightarrow 0)$ e Potts vetorial, ou relógio com p estados ($D \rightarrow \infty$) ^b. Uma atenção particular é dedicada ao caso $p = 3$, onde o procedimento de quebra da simetria entre réplicas de Parisi leva a funções bastante distintas nos dois limites extremos. Determinamos o valor crítico D_c no qual a função de Parisi muda da forma convencional (função contínua e monotonicamente crescente, $D < D_c$ para a função degrau ($D > D_c$)).

^aD.J. Gross, I. Kanter and H. Sompolinsky, Phys. Rev. Lett. 55, 304(1985).

^bF.D. Nobre and D. Sherrington, J. Phys. C 19, L181(1986).

EFEITOS DE CAMPO MAGNÉTICO ALEATÓRIO NO MODELO SHERRINGTON-KIRKPATRICK

SOARES, R. F.; NOBRE, F. D.

UFRN

ALMEIDA, J. R. L. DE

UFPE

O vidro de spins de Ising com interações de alcance infinito (modelo Sherrington-Kirkpatrick (SK)), apresenta, como um dos seus resultados mais surpreendentes, um comportamento não trivial na presença de um campo magnético uniforme ^a. Pouco se conhece no entanto, sobre os efeitos de um campo magnético aleatório no modelo SK . No presente trabalho, investigamos o modelo Sherrington-Kirkpatrick na presença de um

campo magnético aleatório distribuído segundo uma lei de probabilidades gaussianas. Na aproximação de simetria entre réplicas, determinamos o diagrama de fases, composto pelas fases Ferromagnética (F) e Independente (I). A aplicação da análise de estabilidade de Almeida-Thouless permite determinar as regiões de instabilidade da solução de simetria entre réplicas: I' (região instável da fase I) e F' (região instável da fase

F). Tais regiões podem ser identificadas com as fases de vidro de spins e ferromagnética mista do modelo Sherrington-Kirkpatrick, respectivamente. Analisamos também, as modificações na linha de Almeida-Thouless devido a presença do campo magnético aleatório.

^aJ.R.L. de Almeida and D.J. Thouless, J. Phys. A 11, 983(1978).

INSTRUMENTAÇÃO

Instrumentos e Técnicas (INS) -
19/05/93

CONSTRUÇÃO DE UM MICROSCÓPIO DE TUNELAMENTO DE VARREDURA TIPO BESOURO.

BLESER, R. A. S.; ACHETE, C. A.

Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais - COPPE

Foi construído no Laboratório de Estudo de Materiais e Interfaces (LEMI) na COPPE-UFRJ um microscópio de Tunelamento de Varredura - STM - tipo besouro concebido, e atualmente comercializado, por Besocke ^a. Esse microscópio apresenta como grande vantagem o fato de ser extremamente compacto, tornando-o virtualmente imune a variações térmicas e vibrações mecânicas, diminuindo consideravelmente a necessidade de "damping" em relação aos microscópios convencionais. O microscópio é composto de quatro cerâmicas piezoelétricas em forma de tubos de 10mm de altura e 2mm de diâmetro externo montadas numa base de aço inoxidável de 24mm de diâmetro. A agulha de tunelamento é montada em uma das cerâmicas no centro da base. As outras três cerâmicas são montadas simetricamente ao redor do centro e nelas são colocadas pequenas esferas que carregarão a amostra. Essas cerâmicas são responsáveis pela movimentação da amostra em relação a agulha. Serão apresentados detalhes sobre a construção e utilização do microscópio bem sua montagem em vácuo. Além disso serão mostradas as primeiras imagens obtidas na COPPE da superfície de grafite com resolução atômica e da superfície de um filme de ouro depositado sobre quartzo (todas obtidas com o microscópio operando no ar).

^aK.Besocke, Surf. Sci. 181,145 (1987).

UM MÉTODO SIMPLES E VERSÁTIL PARA MEDIDAS MAGNÉTICAS AC DE PRECISÃO

GELFUSO, V. C.; ORTIZ, W. A.

Grupo de Supercondutividade e Magnetismo - DF/UFSCar

A técnica de medidas de suscetibilidade magnética ac pelo método da mutua-indutância, através do balanceamento de uma ponte de Hartshorn, tem sido largamente utilizada. A montagem experimental faz uso do fato de que a tensão de saída de um transformador, cujo primário seja percorrido por uma corrente senoidal, pode ser decomposta em uma componente resistiva, em fase com a corrente, e outra indutiva, em fase com sua derivada temporal. Esta tensão pode ser determinada através da superposição dos sinais indutivo e resistivo da ponte de Hartshorn. Dentre as alternativas possíveis a esta abordagem tradicional, desenvolvemos uma que se mostrou extremamente simples, versátil, barata, e precisa. Nela, o sinal balanceador proveniente da ponte de Hartshorn é substituído por um sinal auxiliar, cujas fase e amplitude são controláveis. As componentes indutiva e resistiva da tensão de saída do transformador são determinadas através da fase e amplitude do sinal auxiliar necessário para balancear a medida. Na prática, trata-se apenas de substituir a decomposição cartesiana do sinal de saída pela projeção polar equivalente. A configuração desenvolvida inclui um defasador passivo, de amplitude controlada, no qual são utilizados exclusivamente resistores fixos, potenciômetros, e um ca-

pacitor. A montagem tem sido utilizada rotineiramente com pleno sucesso, possibilitando a obtenção de resultados de excelente qualidade, com sensibilidade e relação sinal/ruído idênticas as de uma ponte de Hartshorn convencional.

CONSTRUÇÃO DE UM SISTEMA DE BOBINAS DE GRADIENTES E DE RADIOFREQÜÊNCIA PARA IRRADIAÇÃO DE ANIMAIS DE PEQUENO PORTE

DURAN, J. E. R.

Faculdade de Filosofia Ciências e Letras de Ribeirão Preto - Universidade de São Paulo

AZEVEDO, F. C. C.

Hospital Universitário de Campina Grande - Paraíba

Este trabalho tem por objetivo a construção de bobinas que produzam gradientes de campo magnético que sejam uniformes em certas direções de interesse. Estas bobinas serão montadas em conjunto com uma bobina de radiofrequência, simulando-se, desta forma, uma das partes principais de um tomógrafo por ressonância magnética nuclear. Este sistema pode ser utilizado para irradiar-se animais de pequeno porte, com a finalidade de estudar-se possíveis efeitos biológicos destas radiações em seres vivos. Foram analisadas bobinas de diversas formas geométricas, e algumas delas testadas experimentalmente. Uma das alternativas que deu

melhor resultado foi a construção de bobinas em forma de arcos cilíndricos ou sistema de bobinas tipo sela. As bobinas de raio a e altura h , subtendiam um arco de Φ radianos. Para a obtenção de um gradiente homogêneo, utilizamos os valores $\Phi = \pi/4$ e $h = 1,967 a$. O gradiente de campo em uma das direções axiais tem a seguinte expressão: $G_x = 0,9858 NI/a^2$ (N , número de espiras e I , corrente através da bobina). Para a construção das bobinas foi escolhido $N=5$ e fio de cobre de 1,15 mm de diâmetro. O mapeamento do campo magnético no interior do sistema constituído por 2 pares de bobinas tipo sela nos mostrou que estes são muito aproximadamente lineares na região central das bobinas, obtendo-se, portanto, gradientes de campos uniformes nas direções axiais do sistema.

SISTEMA DE MONITORAÇÃO DE ÁGUAS EM TEMPO REAL

URRUCHI, W. I.; PACHECO, M. T. T.

Laboratório de Laser e Opto-Eletrônica, Departamento de Engenharia Elétrica, UNIVAP.

Descreve-se neste trabalho cálculos para um sistema de monitoração em tempo real, para controle de qualidade de águas, como também para detecção de poluentes transparentes e opacos. O sistema consiste de duas partes; uma delas para determinar substâncias que criam opacidade, e a outra para determinar substâncias que são transparentes. A primeira parte determina-se diretamente pela variação da intensidade de um feixe laser de He-Ne. E a segunda parte determina-se pela variação do índice de refração, que é medido pelo dispositivo ADIP (Angle Dependent Intensity Prism). O resultado dos cálculos mostram uma alta sensibilidade, com a qual pode-se detectar variações do índice de refração da ordem de 10^{-6} .

AQUISIÇÃO DE DADOS EM CAMPO E CADEIA DE TELEMETRIA PARA ALIMENTAÇÃO AUTOMÁTICA DE MODELO DE PREVISÃO DO DESTINO DE PESTICIDAS NO SOLO.

TORRE, A.; CRUVINEL, P. E.; SILVA, A. M. DA; PAVÃO, S.; CORONA, N.; CRESTANA, S.

Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária/Núcleo de Pesquisa e Desenvolvimento de Instrumentação Agropecuária, EMBRAPA/NPDIA

Desde 1991 a FAPESP está financiando o projeto temático "Transporte, Previsão do destino e Balanço de Pesticidas no Solo" envolvendo a EMBRAPA, o IAC (Instituto Agrônomo de Campinas) e a USP. Dentre seus objetivos está a validação, para dois solos paulistas, do modelo de previsão de destino de pesticidas LEACHMP desenvolvido pela Universidade de Cornell-EUA. O projeto também propõe criar e manter uma base de dados edafo-climático-ambientais da região es-

colhida para os experimentos de campo. Estes mesmos dados constituem parte da alimentação do modelo LEACHMP. Os experimentos estão sendo realizados na fazenda experimental do IAC localizada no município de Pindorama-SP. Por outro lado, a infraestrutura para execução do modelo está localizada na EMBRAPA-NPDIA, em São Carlos, a aproximadamente 130 Km de Pindorama-SP. Com o intuito de automatizar tanto a entrada de dados do modelo, como a manutenção da base de dados, decidiu-se pelo projeto de uma cadeia de telemetria entre um posto de coleta de dados instalado junto à área experimental em Pindorama e o sistema computacional da EMBRAPA-NPDIA, em São Carlos. Para o posto de coleta foi projetado um sistema de aquisição de dados com características desejáveis para campo. Ele utiliza uma topologia em barramento e transmissão digital de dados. O barramento percorre a área experimental e em cada ponto de medida conecta-se um transmissor digital inteligente a este barramento. As vantagens desse sistema são a redução na quantidade de cabos e a maior imunidade a ruídos inerente à transmissão digital dos dados. O barramento segue o padrão RS-485 e é controlado através de rádio-MODEM por um microcomputador compatível com IBM-PC localizado na sede da fazenda, a aproximadamente 3 Km da área experimental. O NPDIA estará ligado ao micro da sede da fazenda através de linha telefônica comercial, via MODEM, completando-se assim a cadeia de telemetria proposta. O programa de controle foi desenvolvido para o ambiente "Windows". Os parâmetros da aquisição de dados são descritos e ajustados através de símbolos gráficos ("Icons") que representam cada ponto de medida. O projeto encontra-se em fase testes e avaliação desde a primeira semana de fevereiro de 1993. (Este Trabalho conta com o apoio financeiro do projeto temático FAPESP 90/3773-7)

Instrumentação com Técnicas Óticas (INS) - 19/05/93

Desenvolvimento de um Sistema Automático para Medidas de Refração Ocular

VENTURA, L.; CHIARADIA, C.; CASTRO, J. C.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

Este projeto tem como objetivo o desenvolvimento de um sistema automático de medidas refrativas objetivas de miopia, hipermetropia e astigmatismo com técnicas de laser de diodo.

Nesta etapa do projeto apresentamos e discutimos o desenvolvimento, ainda que de modo rudimentar, da parte óptica e eletrônica do sistema para medidas destas ametropias.

A montagem do sistema óptico é baseada em dois princípios fundamentais: o de Scheiner (que limita a entrada de feixes de luz no olho por uma fenda dupla, sendo possível analisar a posição da formação da imagem) e o de Maxwellian (através de duas lentes e um alvo difuso devidamente posicionados, é possível medir o erro refrativo ocular em função do deslocamento do alvo).

O sistema, como um todo, é composto basicamente por duas fontes de luz (F_1 e F_2) igualmente espaçadas em relação ao eixo óptico. Os feixes de luz passam por um alvo (abertura circular grande o suficiente para que a difração não interfira) e são projetados no olho-teste.

As fontes alternam-se entre si. Quando F_1 está ligada, uma imagem I_1 do alvo é projetada na retina. A luz refletida pela retina é colimada pelo sistema ocular, refletida por um separador de feixes e observada num anteparo. Um processo análogo ocorre quando F_2 é ligada. Quando uma só imagem for obtida no anteparo (I_1 e I_2 sobrepostas), através do movimento axial do alvo, obtém-se a correção refrativa. Então, desta mesma forma, utilizamos numa segunda etapa, quatro fontes de luz, dispostas a cada 90° de modo a medir também o astigmatismo.

O atual estágio de automação do sistema consiste no controle dos dois feixes de luz que incidem no olho-teste, ou seja, o controle do movimento do alvo.

Foi desenvolvido um circuito que usa um motor de passos como atuador. Este circuito é responsável pelo chaveamento das fontes luminosas em uma frequência de 1000Hz.

A luz refletida pela retina é captada por dois fotodiodos. Os sinais recebidos têm baixa intensidade devido a limitações das fontes luminosas e são previamente amplificados e filtrados.

Alimentado com dados da fonte e dos receptores luminosos, um comparador de fase determina a direção em que o alvo deve mover-se e a posição em que deverá cessar o movimento.

Associado ao circuito descrito acima, um contador "up/down" registra em um "display" o número de passos dados pelo motor. É através deste dado que é possível a determinação da correção refrativa das ametropias.

CONSTRUÇÃO E TESTE DE UM ELIPSÔMETRO BASEADO NO FOTOPOLARÍMETRO A QUATRO DETETORES.

SILVA, M. P. DA

UFRRN

MASETTI, E.

ENEA - Roma, Itália

A mudança no estado de polarização da luz devido a sua reflexão em uma superfície pode ser medida e interpretada em termos das propriedades da superfície refletora. Elipsometria é uma técnica que permite o estudo de tais propriedades, medindo a mudança na amplitude relativa Ψ e da fase Δ das duas componentes ortogonais de polarização da luz após a reflexão^a. Neste trabalho descreve-se um novo tipo de elipsômetro baseado em um fotopolarímetro a 4 (quatro) detetores (FDP), que além de possuir dimensões reduzidas e baixo custo exibe características de realizar medidas em tempos da ordem de 10^{-2} seg. Com quatro foto-detetores de silício ar-

ranjados de forma que a luz seja refletida do primeiro ao quarto fotodetector em planos de incidência diferentes, este instrumento requer, em princípio, apenas um polarizador linear fixo para operar como elipsômetro^b. Resultados de testes em 632.8 nm juntamente com as primeiras medidas elipsométricas realizadas com tal instrumento são apresentados. O FDP em exame apresenta precisão da ordem de 0.13° e 0.20° em Ψ e Δ , respectivamente.

^aR.M.A. Azzam e N.M. Bashara - Ellipsometry and Polarized Light, North-Holland, Amst. 1977

^bR.M.A. Azzam, Opt. Lett. 10, 309, 1985

SÍNTESE DIGITAL DE PULSOS DE r.fc PARA APLICAÇÕES EM R.M.N.

NASCIMENTO, G. C. DO; ENGELSBERG, M.

Departamento de Física - UFPE

A utilização de técnicas de Eletrônica Digital pode ser empregada na síntese direta em tempo real de pulsos arbitrários de radiofrequências para aplicações na área de

geração de Imagens por Ressonância Magnética Nuclear ou em situações em que são necessários pulsos modulados em banda lateral única ("SSB-Modulation"). O método analógico tradicional para a geração "SSB" é composto de dois deslocadores de fase para a referência de *r.f.*, dois moduladores e um misturador de sinais. Propomos um método no qual é utilizado apenas um circuito processador digital de sinais (DSP 32C) um conversor D/A (Digital/Analógico) e um mínimo de circuitos digitais. Alguns problemas do método analógico e de outros métodos digitais são eliminados trazendo benefícios do aumento do "range" dinâmico e ainda do exato deslocamento de fase da referência sobre a gama de frequência admitida pelo conversor D/A.

*Automação e Aplicações (INS) -
19/05/93*

SOFTWARE PARA SISTEMA DE COLETA DE DADOS DE FENÔMENOS EVOLUTIVOS NO TEMPO

CANSIAN, A. M.

IBILCE São José do Rio Preto - UNESP

TONISSI JR, S. A.; RUFFINO, M. S. P.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

Neste trabalho desenvolvemos um sistema simples de coleta de dados para ser utilizado no registro e avaliação de fenômenos evolutivos no tempo, tais como medidas de tempo de vida e luminescência. O sistema é formado basicamente por uma interface conectada a um slot de um microcomputador IBM-PC compatível e controlada por um software escrito especificamente para tal fim. Este software possibilita o controle das experiências em tempo real, permitindo assim uma grande flexibilidade no que se refere ao armazenamento, processamento numérico e manipulação gráfica dos resultados adquiridos. O sistema foi testado com sucesso na medida da evolução temporal de fenômenos ópticos.

OPERAÇÃO DE UM MAGNETÔMETRO DE DIAFRAGMA NUM REFRIGERADOR DE DILUIÇÃO PLÁSTICO COM UM GRADIENTE DE CAMPO MAGNÉTICO OSCILANTE

BINDILATTI, V.; OLIVEIRA JR, N. F.

IFUSP

Nós construímos e testamos um magnetômetro de força do tipo de diafragma, num refrigerador de diluição plástica, utilizando um gradiente de campo magnético oscilante. Através de detecção síncrona, este método

detecta somente a componente da força sobre a o momento magnético da amostra devida ao gradiente, rejeitando os efeitos de torques. Com precauções contra correntes induzidas nas partes metálicas do dispositivo, fomos capazes de operar o magnetômetro a temperaturas de até 20 mK com o gradiente oscilando com frequências em torno de 5 Hz. A resolução do magnetômetro é pelo menos comparável à obtida quando se emprega um gradiente estático da mesma magnitude.

SISTEMA DE MEDIDA DE MAGNETOSTRICÇÃO EM FILMES FINOS

VIEGAS, A. D. C.; SCHMIDT, J. E.

Instituto de Física - UFRGS

O efeito da magnetostricção sobre o filme origina uma tensão biaxial na superfície que resulta na deformação do substrato. Prendendo-se uma de suas extremidades, a outra livre deflexiona em função do campo aplicado proporcionalmente ao valor da magnetostricção. Para detectar esta deflexão construiu-se uma ponte capacitiva em que o próprio filme atua como dois de seus capacitores, arranjados de maneira que o aumento de uma capacitância ocasiona a diminuição da outra. Isto resulta no desbalanceamento da ponte que é detectada por um amplificador lock-in, sendo esta tensão proporcional ao valor da deflexão. Esta configuração, inédita para detectar microdeslocamentos, tornou o sistema compacto, simples e de grande sensibilidade. É possível medir magnetostricção de filmes tão finos quanto 30nm em substratos de 0.20mm de espessura e 5cm de comprimento. Obteve-se resolução na deflexão em torno de 5nm.

ESTAÇÃO INSTRUMENTAL PARA COLETA E MEDIDA AUTOMÁTICA DE PARÂMETROS CLIMATOLÓGICOS

CRUVINEL, P. E.; HERRMANN JR, P. S. DE P.;

TORRE NETO, A.

EMBRAPA/NPDIA

Foi desenvolvida uma estação instrumental para coleta e medida automática de parâmetros climatológicos constituída por oito instrumentos para as medidas de temperatura do ar e do solo (resolução de 0.1°C), umidade relativa (resolução de 3%), índice de evaporação (resolução de 0.1mm), radiação global (linearidade de 1.5% e constante de tempo de 4 segundos), índice pluviométrico (resolução de 0.1mm), velocidade do vento (resolução de 0.3m/s), direção do vento (resolução de 11.25 graus) e interface paralela para o controle e aquisição de dados. Foram utilizados circuitos de tecnologia CMOS ("Complementary metal oxide semiconductor") de alta confiabilidade, bem como desenvolveu-se um "software", em linguagem UCSD Pascal, para o controle e a aquisição de dados, possibilitando operação em tempo real e a emissão de relatórios. O intervalo en-

tre as coletas de dados é programável através do uso de um relógio externo, o qual proporciona o uso de uma interrupção mascarada, através da interface para o computador. Foram utilizados resistores de platina, como sensores de temperatura, e um transdutor capacitivo para a medida de umidade relativa. Para a medida do índice de evaporação utilizou-se, em um tanque classe-A um transdutor resistivo montado em ponte de Wheatstone alimentado com tensão alternada para evitar efeitos de eletrólise. No desenvolvimento do piranômetro automatizado foi utilizado como transdutor de radiação global o radiômetro proposto por Escobedo et al (Revista de Física Aplicada e Instrumentação, Vol. 3, no. 2, 118-133, 1988). Para a medida do índice pluviométrico foi utilizado um transdutor em balança, calibrado mecanicamente, e chave óptica, operando na região do infravermelho, para a contagem e posterior integração da quantidade de chuva. Como transdutor de velocidade do vento utilizaram-se três conchas, com 7 gramas cada, feitas de acrílico de 2mm e montadas sobre rolamentos auto-lubrificadas, separadas por 120 graus. Foi ainda utilizada, nesse transdutor, uma outra chave óptica, para a contagem de pulsos e posterior conversão em grandeza de velocidade. Para a medida da direção do vento utilizou-se como transdutor um disco posicionador, codificado em código Gray de 5 bits, e detectores com emissores independentes, operando também na região do infravermelho, para a leitura das 32 posições, as quais são diretamente utilizadas como endereço para as memórias EPROM, do instrumento, possibilitando a leitura. Essa estação instrumental possibilita ainda a operação no modo manual, com visualização dos dados em tempo real, em mostradores de 7 segmentos ou no modo computadorizado, com o armazenamento de dados em intervalos pré-programados.

PROJETO, DESENVOLVIMENTO E AUTOMAÇÃO DE UM SUSCEPTÔMETRO

ac

SCHETTINI, C.; AGUIAR, J. A.
Departamento de Física - UFPE

O projeto e desenvolvimento de um susceptômetro ac e de um sistema automático de aquisição de sinais de susceptibilidade magnética e de temperatura é descrito em detalhes. O sistema de aquisição de dados e de comando de acionamento de um motor de passo, acoplado ao mecanismo de movimentação da haste do porta amostra, é feito através de um computador tipo PC. O susceptômetro foi projetado para operar na faixa de frequência de 100Hz a 10kHz e para temperaturas entre 4.2K e 300K. Os sinais de susceptibilidade e temperatura são digitalizados através de um conversor A/D de 8 bits (ADC 0820), para processamento pelo microcomputador. A interface entre o sistema de aquisição e o usuário é feita através de um software dedicado.

Trabalho financiado pelo CNPq e FINEP

REFRIGERADORES DE DILUIÇÃO CONSTRUÍDOS EM PVC

JR, N. F.; RODRIGUES, A. R.; BINDILATTI, V.
IFUSP

TER-HAAR, E.; FROSSATI, G.
Kamerlingh Onnes Lab. - Leiden

Nós construímos e testamos vários refrigeradores de diluição plásticos, com diâmetros entre 40mm e 20mm, usando polivinil cloreto (PVC) como material estrutural. Os trocadores de calor foram confeccionados com tubos de CuNi ou Teflon, e folhas de Kapton. A área dos trocadores de calor, nos vários protótipos, variaram de 100cm² a 1000cm². O desempenho de todos os refrigeradores foi como esperado, com temperaturas mínimas entre 8mK e 18mK. O PVC, uma material barato e muito fácil de se obter, provou ser excelente para uso em baixas temperaturas. Tanto as juntas coladas de metal-PVC quanto as juntas cônicas são muito confiáveis. As análises do desempenho de alguns dos refrigeradores testados indicaram uma resistividade média de Kapitza para o Teflon de 0.006 K²m²/W).

EFEITO DE VIBRAÇÃO LONGITUDINAL NA TEMPERATURA FINAL DE UM REFRIGERADOR DE DILUIÇÃO PLÁSTICO. A POSSIBILIDADE DE SUA UTILIZAÇÃO COMO UM MAGNETÔMETRO DE AMOSTRA VIBRANTE

BINDILATTI, V.; RODRIGUES, A. R.; OLIVEIRA JR, N. F.

IFUSP

TER-HAAR, E.; FROSSATI, G.
Kamerlingh Onnes Lab. - Leiden

Nós investigamos a influência de vibrações longitudinais sobre a temperatura final de um refrigerador de diluição feito totalmente em plástico. O interesse é o eventual uso do refrigerador como um magnetômetro de amostra vibrante (MAV). Para a frequência de trabalho de um MAV comercial (82 Hz), e amplitudes que permitem sensibilidades da ordem de 100µV/emu, as vibrações produzem cerca de 60µW de calor. Esta potência pode ser absorvida por um refrigerador de diluição plástico, por exemplo com trocadores de 1000cm² de área, a temperaturas em torno de 40mK. Com trocadores de área ainda maior, podemos prever sensibilidades da ordem de 1mV/emu a temperaturas inferiores a 50mK.

SISTEMA PARA MEDIDAS DA CORRENTE CRÍTICA EM SUPERCONDUTORES

VALENÇA-FILHO, M. M.; LIMA-JÚNIOR, J. O.;
FERREIRA, J. M.
DEPARTAMENTO DE FÍSICA - UFPE

NASCIMENTO, G. C. DO

Fundação Instituto Tecnológico de Pernambuco - ITEP
Av. Luis Freire 700, 50730 Recife, PE, Brasil.

Na medição direta da corrente crítica, em amostras supercondutoras, a resistência dos contatos, utilizados no método de quatro pontas, é da ordem de 1Ω . Para correntes superiores a 1A, uma quantidade expressiva de aquecimento por efeito Joule ocorre nas regiões de contato. Visando minimizar este aquecimento desenvolvemos uma fonte de corrente pulsada ajustável, cuja característica de saída são pulsos programáveis (amplitude e taxa de repetição) de 10A a 300A com duração de 1ms. O funcionamento desta fonte pulsada ajustável baseia-se no princípio de funcionamento transitório do circuito RLC série típico. Inicialmente apenas no banco de capacitores é despositada a quantidade de carga definida pelo operador, em seguida uma chave eletrônica fecha a malha RLC, permitindo que a energia seja transferida para o indutor e a carga resistiva do sistema. Esta carga é constituída principalmente da amostra e das resistências de contato. Apenas o primeiro semiciclo da corrente é aproveitado e a medida é realizada por amostragem quando esta corrente atingir o ponto de máximo. As principais características deste sistema estão sendo observadas e serão apresentadas.

CONSTRUÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE UM DIFRATÔMETRO Θ - Θ ACIONADO POR FITAS DE AÇO

PESSOA, J. D. C.

EMBRAPA/NPDIA

RODRIGUES, A. R. D.

LNLS

MASCARENHAS, Y. P.

IFQSC/USP

Os difratômetros de Raios X comerciais utilizam o sistema de engrenagens para movimentar a torre e o detetor. A fabricação de engrenagens de precisão exige a conjugação de equipamento e técnica nem sempre disponíveis nas oficinas dos institutos de pesquisa ou mesmo de indústrias. Este trabalho apresenta os resultados da construção e caracterização de um novo sistema de movimentação por cintas de aço, aplicado a um difratômetro Θ - Θ . O sistema produz as rotações da fonte e do detetor baseado no princípio que duas polias concêntricas, com o mesmo diâmetro e ligadas a cintas, giram igualmente quando estas cintas forem puxadas com a mesma força. O sistema é constituído portanto de duas polias concêntricas de aço, duas cintas de aço e um carro que se movimenta ao longo de um fuso, onde o eixo das polias é perpendicular ao eixo do fuso. Cada cinta é presa a uma das

laterais do carro e a uma das polias. A movimentação do carro ao longo do fuso, na vertical, provoca a rotação das polias (em sentido oposto, uma em relação a outra). Utilizamos um motor de 1000 passos por revolução e polias com 242.54mm de diâmetro. Com estes valores, e considerando a espessura das cintas (150micra), a variação angular mínima esperada é de 0.00502graus (correspondente a 1 passo do motor). Caracterizamos o equipamento por difratometria utilizando como amostra Silício monocristalino (111) e o seguinte procedimento: 1) posicionamos tubo e detetor em aproximadamente 14graus e fazemos uma varredura (de dois passos entre pontos) em torno do pico 111 α . 2) posicionamos tubo e detetor em aproximadamente 47graus e fazemos a varredura em torno dos picos 333 α 1 e 333 α 2. 3) repetimos os dois procedimentos em sentido angular descendente. Todo o procedimento foi repetido 5 vezes. Obtivemos com isto uma variação angular mínima de 0.0049965graus (por passo do motor), uma histerese de +/-0.02graus e uma reprodutibilidade de +/-0.002graus.

Determinação simultânea da suscetibilidade e da resistividade de amostras de geometria arbitrária em um suscetômetro-ac

FARIA, C. C. DE; ORTIZ, W. A.

Grupo de Supercondutividade e Magnetismo - DF/UFSCar

No caso especial em que a amostra tem a forma de um cilindro longo, e respeitada a limitação de baixas frequências (alta profundidade de penetração do campo eletromagnético) a tensão de saída de um suscetômetro ac pode ser expressa como uma série convergente de potências de μ/ρ . Com o objetivo de obter resultados empíricos para o caso de amostras de geometria livre, para as quais não há expressão analítica disponível, projetamos e construímos um sistema de bobinas de alta sensibilidade. Nele, o campo de excitação do primário apresenta uma homogeneidade melhor que 0,006% ao longo de 8 cm. O novo sistema foi incorporado à estação experimental $LN_2 - 0,1T$, que inclui uma bobina de cobre, projetada e construída em nosso laboratório, capaz de gerar campos de até 0,1T, para operação em temperaturas desde 77 até 350 K. Neste trabalho serão apresentados os resultados obtidos com cilindros de metais comerciais (cobre e alumínio) com comprimentos variando entre 1 e 4 cm. As amostras estão sendo investigadas em toda a faixa de temperaturas atendidas pela estação experimental, submetidas a excitações de frequências diversas, respeitando o limite de alta penetração. O objetivo é determinar os valores limiares da relação raio/comprimento a partir dos quais se pode considerar válida a aproximação de cilindro infinito para as amostras reais.

CONSTRUÇÃO DE UM GERADOR DE PULSOS E SUA APLICAÇÃO NA CARACTERIZAÇÃO TENSÃO-CORRENTE DE MATERIAIS CERÂMICOS

LAS, W. C.; BENEDITO, A. C.; CILENSE, M.

Instituto de Química de Araraquara - UNESP

DORDOR, P.

Laboratoire de Chimie du Solide - CNRS - Talence, France

Na caracterização de tensão em função de corrente de materiais cerâmicos, pode ocorrer eventual aquecimento da amostra, para correntes acima de 10 mA. Para evitar esse efeito indesejável, utiliza-se o método de tensão pulsada. Nelson et al.^a desenvolveram um sistema utilizando um plotter HP-7090 e um gerador de pulsos montado na nossa oficina eletrônica. Neste trabalho, relatamos a modificação desse sistema, substituindo o plotter por um osciloscópio HP-54501, de dois canais, 100 MHz, e introduzindo outros componentes no gerador de pulsos. O sistema foi também conectado a um microcomputador 486, para aquisição e manipulação de dados. O gerador de pulsos consta de um temporizador duplo, sendo possível regular a largura dos pulsos e o intervalo entre eles. Uma combinação apropriada de resistores variáveis forma um divisor de tensões de modo a permitir leituras correspondentes à tensão e corrente, de acordo com o fundo de escala do osciloscópio. Isso é necessário, já que a resistência de materiais cerâmicos, como os varistores, varia significativamente com a tensão aplicada. Foram feitas medidas com uma amostra de óxido de estanho dopada com Bi e Cu, variando-se a largura dos pulsos de tensão. Mostra-se que existe realmente um aquecimento de 10° C com o aumento da largura dos pulsos, o que acarreta uma variação na curva de tensão em função da corrente.

^aN.Lopes, D.Gouvêa, C.V.Santilli e C.S.Fugivara, *Cerâmica*, 35(236), 127-128,1989.

SISTEMA AUTOMATIZADO PARA MEDIDAS DE RESISTIVIDADE

ANDRADE, R.; AGUIAR, J. A.

Departamento de Física - UFPE

Foi desenvolvido um sistema automatizado para medidas de resistividade em amostras supercondutoras. O sistema consiste de um amplificador lock-in modelo SR 530 da Stanford Research, um computador tipo PC, uma fonte de corrente ac para excitação da amostra com 10mA, um circuito para adequar a leitura da temperatura (sensor usado é um resistor de Pt) para o conversor AD/DA do lock-in e software de comunicação. O circuito que adequa a leitura do sensor de temperatura para o conversor AD/DA do lock-in consiste de dois módulos simples baseados no amplificador operacional TL 084. O primeiro consiste de dois estágios amplificadores que fornecem um ganho final de aproximadamente 130. O segundo módulo trata-se de uma fonte

de corrente ac cuja finalidade é excitar a amostra. O método de medição utilizado é o das quatro pontas. O sistema funciona na faixa de temperatura 15K - 300K (limitação devido ao sensor) e para frequências entre 10Hz e 100Kz.

Trabalho financiado pelo CNPq e FINEP

UM MAGNETÔMETRO DE TORQUE PARA O ESTUDO DE MATERIAIS NANOESTRUTURADOS

CARARA, M. A.; SCHMIDT, J. E.

Instituto de Física - UFRGS

Uma balança de torção acoplada a uma ponte de capacitores giratória é o coração do torquímetro constituído para a investigação de propriedades magnéticas de filmes finos ferromagnéticos. O torque exercido pelo campo magnético aplicado sobre a amostra é medido através do torque restaurador de um solenóide com apenas uma semi-espira montada junto ao portaamostras. A posição da amostra é determinada com uma resolução angular de 10^{-6} rad, permitindo assim uma sensibilidade em torque de 10^{-5} dyn.cm em medidas de torque. Serão apresentadas curvas típicas para a extração dos parâmetros magnéticos em filmes de Fe e multicamadas de Co/Ag.

CONTROLADOR E COLETOR AUTOMÁTICO PARA TROCA DE AMOSTRAS COM MEDIDAS DE CORRENTE E TEMPO EM UM SISTEMA PIXE BASEADO NO MICROCONTROLADOR AMD80535

CRUVINEL, P. E.

EMBRAPA/NPDIA

Foi desenvolvido um controlador e coletor automático para troca de amostras e medidas de corrente e tempo para um sistema PIXE, técnica de análise por indução de raios X por prótons, do Laboratório Nuclear Crocker, Universidade da Califórnia, Davis, U.S.A., baseado no microcontrolador AMD80535. Esse microcontrolador está fundamentado na família do 8051 incluindo, entretanto, uma série de vantagens, dentre as quais destacam-se a flexibilidade no uso e a operatividade. Possui conversores A/D de 8 bits e temporizadores programáveis de 16 bits, bem como memória RAM ("Random Access Memory") de 256X8 bits e 48 linhas de I/O ("Input/Output"). A comunicação com um computador PDP11/44 foi feita através de linha serial e todos os sinais necessários para um otimizado controle na troca de amostras foram gerados por "software", usando-se interrupções e medindo-se o tempo de contagem por espectro. Possibilita ainda o registro dos valores de corrente, bem como da corrente integrada no tempo, sincronizado com a obtenção dos espectros de

raio X, a partir de leituras obtidas do copo de Faraday e de um eletrômetro. Movimentos mecânicos das amostras, aloçadas em porta "slides", foram obtidos com o uso de motores de passo controlados pelo sistema. Posicionadores ópticos, operando na região do infravermelho, foram utilizados para a sinalização da posição das amostras no porta-amostras. Resultados do uso da arquitetura desenvolvida apresentaram-na como tendo um substancial desempenho operativo, bem como mostraram que com o uso desse microcontrolador obtém-se uma significativa simplificação na implementação de módulos controladores e coletores dedicados.

Automação de um sistema de medidas de EPR

CERNICCHIARO, G. R. C.
CBPF

Neste trabalho apresentamos a automação de um sistema de medidas de EPR baseado em um espectômetro Varian, modelo E-9, cujos módulos de modulação/demodulação de microonda e controle de campo magnético se encontram em boas condições operacionais, contudo os sistemas de detecção, controle e aquisição de sinais se mostravam limitados. Os sistemas de detecção de sinal, controle e registro foram substituídos por um sistema de detecção síncrona, um amplificador Lock-in com interface IEEE-488, uma interface para o controlador de campo e um microcomputador compatível IBM PC-AT. O programa foi desenvolvido em linguagem "C" e permite controlar e registrar todos os parâmetros da experiência, tem interface amigável com o usuário, gráficos, menus e permite a opção de compatibilidade com vários pacotes de tratamento de dados de EPR. Foram implementados vários modos de medida: detecção de sinal EPR convencional, medidas com dupla cavidade, detectando, simultaneamente, o sinal da amostra e um sinal padrão de referência e modo de medida de cinética.

ESTUDO DOS FATORES QUE DEGRADAM A SENSIBILIDADE DE UM MAGNETÔMETRO DE FLUXO SATURADO COM NÚCLEO TOROIDAL

SOUSA, P. L. DE; BAFFA FILHO, O.

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

Um magnetômetro de fluxo saturado (MFS) baseado num sensor toroidal de permalloy está sendo desenvolvido para utilização em medidas biomagnéticas. Os campos biomagnéticos mais intensos são da ordem de $10^{-9}T$, portanto dentro do limite inferior de detecção destes magnetômetros.

Vários cuidados vêm sendo adotados para se obter a máxima sensibilidade com este MFS tais como: utilização do sensor como um detector de zero, escolha de componentes eletrônicos de baixíssimo ruído como o CI LT1028 e configuração do tipo sensor curto-circuitado.

Além desses fatores o efeito do acoplamento do fluxo da bobina excitadora para a bobina detectora tem sido objeto de análise^a. Devido a este acoplamento a bobina sensora detecta parte do sinal como se fosse de um campo DC, com valores da ordem de $0.5 \mu T$ em nosso MFS, muito maior que o ruído intrínscico do núcleo (da ordem de 10 pT). Este efeito, conhecido como efeito transformador, tem origem principalmente na não homogeneidade dos enrolamentos do toróide e das bobinas.

Uma câmara blindada magneticamente está sendo construída para a realização de ensaios em campos baixos. Apoio financeiro CNPq, FAPESP, CAPES e TWAS.

^aJ.R.Peterson, F.Primdahl, B.Hernando, A.Fernandez e O.V.Nielsen, Meas. Sci. Technol., 3, 1149 - 1154 (1992)

PROJETO E CONSTRUÇÃO DE CALORÍMETRO PARA PEQUENAS AMOSTRAS

TORRES, B. C. M.

Instituto de Física - Universidade Federal do Rio de Janeiro

CHAVES, F. A. B.

Instituto de Física - Universidade Federal do Rio de Janeiro

Um bom calorímetro deve ter capacidade calorífica baixa comparada à da amostra a ser medida, τ interno pequeno e τ externo grande comparado ao tempo de medida. O primeiro cuidado a ser tomado é minimizar a capacidade calorífica do background. Para isto o nosso calorímetro é suportado pelos próprios fios elétricos, o termômetro é um resistor de germânio desencapsulado e o aquecedor, um resistor de filme de evanon montados em uma folha de cobre de $2\mu m$ de espessura. O isolamento térmico é garantido pelas ligações elétricas feitas com fio Eureka 48, com 5cm de comprimento. Como a resistência elétrica destes fios é da ordem de 30Ω , o filme de Evanon tem 2000Ω afim de garantir que somente uma fração do calor aplicado seja dissipado nos fios. Também usamos uma configuração de tres fios para o aquecedor, a fim de compensarmos eletricamente o calor dissipado nos fios. O τ interno depende da condutividade térmica da amostra a ser medida. Nos casos de baixa condutividade já está previsto preparar a amostra de modo a fixa-la ao calorímetro através de microsolda. Este calorímetro foi projetado para medidas de capacidade calorífica pelo método adiabático entre 2K e 30K.

a)Ota B.S. and Gmelin E. Mead. Sci Technol. 3(1992) 1047

b)Rapp R.E.,Siqueira M.L.,Viana R.J.,Norte L.C. Rev.Sci.Instrum.63(11) 5390

Projeto e Implementação do Software e Hardware do Computador de Bordo do Míssil MSA-1.

MIRANDA, C. T. DE; NISHIYAMA, L.

Instituto de Estudos Avançados - São José dos Campos, SP

O objetivo deste trabalho é de mostrar a o projeto e a implementação física dos algoritmos de guiagem e pilotagem do computador de bordo do Míssil Superfície-ar, MSA-1. O Hardware do CDB foi implementado com o microprocessador Intel 8086 operando no seu modo máximo juntamente com o co-processador matemático 8087. Estes dois processadores juntamente com duas interfaces paralelas 8255, uma interface serial 8251, um contador programável de eventos 8253 e mais conversores A/D e D/A de 12 e 8 bits respectivamente, constituem os chips principais do computador de bordo. O

lay out do CDB foi implementado em duas placas circulares de circuito impresso de 140 mm de diâmetro, CPU e I/O. O grau de compactação destas duas placas pode ser avaliado pelo número de camadas das mesmas: sete e cinco "layers", respectivamente. O software do CDB foi implementado totalmente em forma modular em linguagem "C" utilizando o compilador MCC86, fornecido pela Microtec Inc.

Workshop: Sensores a Fibra Ótica (INS) - 20/05/93

SENSORES A FIBRA ÓTICA PARA O SETOR ELÉTRICO

VALENTE, L. C. G.

CEPEL - Centro de Pesquisas de Energia Elétrica

As vantagens de se utilizar fibras óticas no sensoriamento das mais diversas grandezas têm sido apontadas desde o início de seu desenvolvimento. O Setor Elétrico se constitui num campo onde estas vantagens são especialmente importantes, podendo ser decisivas para sua aplicação em substituição a tecnologias convencionais. A facilidade de isolamento elétrico e a imunidade a ruídos eletromagnéticos em sistemas de alta tensão são fatores imediatamente apontados quando se pensa em fibras óticas no Setor Elétrico. No entanto as dificuldades de penetração desta tecnologia têm se mostrado maior do que se poderia supor alguns anos atrás. Os principais motivos são a robustez de equipamentos antigos associada à atitude conservadora, normalmente encontrada nos profissionais da área. Um aliado dos sensores a fibra ótica tem sido a recente disseminação de sistemas automáticos de monitoração e controle de sistemas elétricos, desde a geração até a distribuição. Os sensores convencionais, em geral, são pesados, de difícil instalação e oferecem saídas incompatíveis com circuitos eletrônicos baseados em microprocessadores.

SENSORES A FIBRA ÓTICA PARA APLICAÇÕES AEROESPACIAIS

CARRARA, S. L. A.

** Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá, UNESP*

A importância de sensores no mundo moderno cresce constantemente, principalmente devido aos avanços tecnológicos nas áreas de eletrônica, materiais e informática. Com o aumento da capacidade e velocidade de processamento e transmissão da informação, são cada vez mais sofisticadas as possibilidades de automação e controle nas mais variadas áreas da atividade humana. Neste contexto, sensores a fibra ótica vêm-se apresentando como uma alternativa vantajosa, especialmente em aplicações onde baixos peso e volume aliados a altas sensibilidade e confiabilidade são necessários, como por exemplo na área aeroespacial.

Nos últimos anos o CTA (Centro Técnico Aeroespacial), em São José dos Campos, vem desenvolvendo sensores a fibra ótica para guiagem e controle de veículos (giroscópios e acelerômetros), e para monitoração de esforços em estruturas (*strain gauges* para as chamadas "estruturas inteligentes").

Nesta palestra serão abordados aspectos tecnológicos do desenvolvimento de sensores a fibra ótica e algumas das soluções apresentadas no Brasil e no exterior, incluindo fontes óticas, fibras óticas especiais (por exemplo, fibras de núcleo elíptico, desenvolvidas em conjunto com o CPqD-Telebrás), topologias de circuitos óticos a fibra e técnicas de processamento de sinal.

Industrial liaison and product developement activity in optical fibre sensors: The experience of Strathclyde

CULSHAW, B.

University of Strathclyde (UK)

O desenvolvimento de sensores a fibra ótica para aplicações comerciais passa por todos os estágios de pesquisa e desenvolvimento de produtos. No ambiente universitário normalmente são realizadas as etapas de pesquisa básica e aplicada, finalizando com protótipos a serem posteriormente desenvolvidos pelo setor industrial. Essa passagem de resultados entre a universidade e a indústria não é perfeita, limitando o surgimento de produtos comerciais baseados na tecnologia de sensores a fibra ótica. A Universidade de Strathclyde atua no desenvolvimento de sensores a fibra ótica há quase 20 anos e teve várias experiências de transferência de tecnologia para o setor industrial, tanto boas quanto más. Nesta apresentação serão discutidos aspectos gerais dessa interação e comentados alguns exemplos ocorridos. Outras experiências semelhantes, ocorridas no Reino Unido, também serão rapidamente mencionadas.

Sensores a Fibra Ótica (INS) - 20/05/93

MEDIDA DO DIÂMETRO DE UM FEIXE DE LASER UTILIZANDO UM NÚCLEO DE FIBRA ÓTICA COMO 'PINHOLE' PARA SE FAZER A VARREDURA

RIBEIRO, R. M.; MARGULIS, W.

Departamento de Física, PUC-Rio

Em vários experimentos de ótica não linear, a intensidade do feixe laser deve ser bem conhecida para que se possa inferir informação quantitativa. Isto requer que além da potência, o "spot-size" seja determinado com precisão, e em geral esta medida tem erros significativos. Neste trabalho descreve-se o uso de uma fibra ótica de diâmetro do núcleo de $6.7\mu\text{m}$ para substituir o "pinhole" comercial de diâmetro típico de $> 10\mu\text{m}$ na medida do "spot" de um feixe de laser focalizado.

Ambos os extremos de uma fibra de $> 1\text{m}$ de comprimento são descascadas, uma das pontas é apoiada num suporte de fibra com controle micrométrico tridimensional, e dessa forma faz-se a varredura em toda a seção do feixe de laser. Na referida extremidade acoplamos a luz do laser enquanto que a outra está acoplada num fotodiodo calibrado.

Desta forma é possível mapear-se a intensidade luminosa em função da coordenada radial e através de um modelo matemático simples onde levamos em conta o fato de que o núcleo da fibra possui um diâmetro finito, obtemos então o diâmetro exato do feixe de laser.

SENSOR A FIBRA ÓTICA PARA ESTRUTURAS EM CONCRETO

SILVA, R. B. DA; ZÂNGARO, R. A.; ALENCAR, J.;

SILVEIRA JR, L.

Universidade do Vale do Paraíba - UNIVAP

Este trabalho visa o desenvolvimento de sensores a fibra ótica voltados para o ensaio não destrutivo de estruturas em concreto. Nos propomos aqui a desenvolver uma proteção para a fibra ótica, designada por "CORE" - Cabo Ótico Reforçado. Ela foi desenvolvida visando a sua inserção em vigas de concreto de forma a evitar cuidados especiais na operação de enchimento do molde da viga. Esta casca protetora, constituída de fibra de vidro e resina de poliéster, deve apresentar uma densidade próxima da fibra ótica, de forma a permitir a total transferência do stress mecânico imposto à viga para a fibra ótica. Foram fabricados diversos corpos de prova em concreto medindo $150\text{mm} \times 200\text{mm} \times 1000\text{mm}$, onde foram alojados os COREs. O princípio ótico utilizado para a caracterização da deformação é baseado no giro de polarização causado pelo stress mecânico. Para tal foi utilizado um laser de He-Ne polarizado, um polarizador e um detector de potência. A curva de caracterização obtida é apresentada tendo em seus eixos: potência ótica X alongamento da fibra.

Processamento de sinal de girômetros a fibra ótica

CARRARA, S. L. A.

Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá - UNESP

ALMEIDA, J. C. J. DE; FUGIVARA, S.

Instituto de Aeronáutica e Espaço - São José dos Campos, SP

ZIER JR, H. J.; BIANCHI, J. C.

Instituto de Estudos Avançados - São José dos Campos, SP

Discutem-se a técnica de medidas e o diagrama de blocos de diferentes opções de projeto de um amplificador "lock-in", com resolução de 100 nV , não linearidade $< 0,2\%$; possibilidade de "autoranging" numa faixa dinâmica de medidas de 120 dB , e flexibilidade de programação de seus parâmetros. Em cada caso, analisa-se o "trade-off" da configuração utilizada nas etapas de pré-amplificação, filtragem, controle automático do ga-

nho, circuitos de interface e demodulação, do sinal de saída de um amplificador de corrente; integrado ao fotodetector acoplado à fibra óptica com a informação de rotação medida pelo girômetro. Uma análise de desempenho do projeto é apresentada, e novas configurações sugeridas, visando à otimização do processamento de sinal de girômetros a fibra óptica, baseados no Efeito Sagnac; e à sua adequação aos requisitos da instrumentação de sistemas inerciais.

SENSORES DE TENSÕES ELÉTRICAS E MECÂNICAS EM FIBRAS ÓPTICAS

BEZERRA, V. M.; PACHECO, M. T. T.

Laboratório de Laser e Opto-Eletrônica, Departamento de Engenharia Elétrica - UNIVAP

Quando submetemos uma fibra óptica à tensões elétricas ou mecânicas, esta altera suas propriedades estruturais se tornando birrefringente (Efeitos Kerr e Fotoelástico, respectivamente). O material birrefringente tem índice de refração dependente da direção do campo elétrico da radiação incidente. Incidindo uma radiação polarizada numa fibra óptica e aplicando uma tensão à mesma, verifica-se que devido à anisotropia formada, o plano de polarização da radiação na saída da fibra varia proporcionalmente à diferença entre os Índices de refração formada pela birrefringência. A birrefringência é mais acentuada quanto maior for a tensão submetida e pode ser expressa da seguinte forma:

$$\Delta n = k \cdot \lambda \cdot E^2 \quad (\text{E. Kerr})$$

$$\Delta n = 1/2 \cdot n^3 \cdot q \cdot T \quad (\text{E. Fotoelástico})$$

Onde E e T representam respectivamente o campo elétrico e a tensão mecânica incidentes. Baseado nestes princípios, desenvolveu-se um sensor de tensões elétricas e um de mecânicas onde a tensão é medida pela variação do plano de polarização da luz na saída da fibra.

Aplicações (INS) - 20/05/93

ESTÁGIO DE AMPLIFICAÇÃO PARA LASER Nd:YAG CONTÍNUO

SPINA, F. D.; LIMA, C. J. DE; SILVEIRA JR, L.; ZÂNGARO, R. A.

Universidade do Vale do Paraíba - UNIVAP

Este projeto tem por objetivo o desenvolvimento e construção de um amplificador laser de Nd:YAG operando em modo contínuo, utilizando como sistema de bombeamento o oscilador laser de Nd:YAG desenvolvido no LOPE - Laboratório de Laser e Opto-Eletrônica da Universidade do Vale do Paraíba. O amplificador laser é

do tipo passagem única, e consiste de uma cavidade elíptica onde o cristal de Nd:YAG é bombeado por uma lâmpada de kriptônio de 3500W. O bastão do amplificador é alinhado no mesmo eixo do feixe de saída do oscilador, fazendo com que o mesmo o atravesse longitudinalmente. A refrigeração da cavidade amplificadora é feita por meio de um sistema em malha fechada, onde temos água circulando pelo bastão, lâmpada e parte interna da cavidade. O oscilador atual fornece 30W contínuo. Os cálculos realizados indicam que a potência de saída do amplificador a ser obtida é da ordem de 150W. Com este nível de potência será possível a realização de experimentos nas áreas de corte e tratamento de materiais. O amplificador laser oferece uma boa opção de instrumentação a nível nacional, desde que, este sistema tem estado disponível, até agora, somente via importação.

GERAÇÃO DE PULSOS ÓPTICOS ULTRACURTOS COM LASER DE Ti:Al₂O₃

MARQUEZINI, M. V.; CESAR, C. L.

UNICAMP

Através do acoplamento passivo dos modos oscilantes na cavidade laser ("Passive Mode-Locking"), estamos gerando pulsos ultracurtos sintonizáveis com um laser de Ti:Al₂O₃. Este é um laser de estado sólido que tem se mostrado uma ótima fonte laser em termos de sintonização, potência e geração de pulsos curtos. Percebeu-se que o acoplamento dos seus modos provém da autofocalização no bastão de Ti:Al₂O₃, o que só ocorre no regime pulsado. Portanto, a menos que alguma coisa inicie os pulsos curtos, o laser funciona *cw*. É necessário então criar um mecanismo que diminua as perdas na cavidade para oscilação "mode-locked" comparada com a oscilação *cw*. Uma das formas de se fazer isso é através do uso de absorvedores saturáveis. No caso, utilizamos uma mistura dos corantes HITCI e IR140 em baixas concentrações como absorvedor saturável. //
Suporte financeiro: CNPq.

MONTAGEM ÓTICA PARA MEDIDAS COM CAMPO MAGNÉTICO

CRUZ, G. K.; BASSO, H. C.

Instituto de Física e Química de São Carlos

Apresentamos, nesse trabalho, um sistema ótico para medidas de absorção, luminescência e tempo de vida de estados excitados. O objetivo foi desenvolver um sistema de modo a permitir que o arranjo para cada uma das diferentes medidas (absorção ou luminescência com campo magnético paralelo ou perpendicular à excitação e luz circularmente ou linearmente polarizada) seja fácil e rapidamente obtido. O sistema opera na região de 0.3 até 1.0 μ m, e a temperatura de 1.7K a 4.2K, e um campo magnético de até 6T pode ser aplicado sobre a amostra. A montagem ótica, eficiência e pontos

críticos, bem como sistema eletrônico de aquisição de dados serão discutidos. Resultados envolvendo medidas com $GdAlO_3 : Cr^{+3}$ serão apresentados.

UTILIZAÇÃO DE SF_6 COMO ELEMENTO PASSIVO EM CAVIDADE DE LASER DE CO_2 -TEA

OLIVEIRA, A. C. DE; BARRETA, L. G.; MIYAKAWA, W.

Instituto de Estudos Avançados - CTA

A largura espectral de linha de um laser de CO_2 -TEA é de 3 GHz e, em geral, o laser oscila em regime de multimodos longitudinais. Com a introdução de uma célula contendo um absorvedor saturável na cavidade do laser, é possível obter diferentes efeitos. Dependendo de condições de operação, como a pressão da célula e o tamanho da cavidade, pode-se obter "mode-locking" (travamento de modos), oscilação em monomodo longitudinal ou, ainda, sintonia dinâmica do laser. O estreitamento espectral dado pela oscilação em monomodo longitudinal e a varredura em frequência obtida pela sintonia dinâmica encontram aplicações práticas em áreas como processos fotoquímicos de excitação seletiva de moléculas e processos de conversão de frequência da radiação do laser para a região de 16 μm por espalhamento Raman. Assim, este trabalho tem por objetivo o estudo do comportamento do pulso de um laser de CO_2 -TEA, utilizando SF_6 como absorvedor saturável.

FORNO DE LÂMPADAS PARA TRATAMENTOS TÉRMICOS RÁPIDOS E ANÁLISE TÉRMICA DE MATERIAIS

HOYOS, F. J. DE; GAMA, S.; YAGUESHITA, E. M.

* UNICAMP

Para implementar a técnica de análise de Smith, construiu-se um forno de lâmpadas de baixa inércia térmica e, conseqüentemente, maior sensibilidade. Essencialmente, 6 espelhos elípticos concentram a luz de 6 lâmpadas (halógenas) sobre um tubo de tântalo ($10cm \times \phi = 1.5cm$), que desempenha a função de forno. No interior do tubo então, é centralizado um cadinho ($6mm \times \phi = 5mm$) contendo a amostra ($\sim 1g$). Além disto, o conjunto tubo e cadinho está inserido dentro de um tubo de quartzo (transparente) selado nas suas extremidades por flanges, com entradas para vácuo e argônio. Termopares ligados ao tubo e ao cadinho são lidos por um multímetro digital acoplado a um computador (interface IEEE-488). O forno é controlado por uma unidade microprocessada programável (comercial). É capaz de aplicar taxas de aquecimento de até $100^\circ C/s$, estabiliza uma dada temperatura com oscilação menor que $1^\circ C$, e atinge a temperatura máxima de $1450^\circ C$. O aparato já foi aplicado para análise térmica de Smith, tratamentos térmicos rápidos, e detecção de transformações de fases, podendo

ser aplicado também para análise térmica diferencial e calorimetria. (Apoio FAPESP/CNPq).

INTERFACEAMENTO DO MICROCOMPUTADOR COM EXPERIMENTOS DE ESPECTROSCOPIA DE LUMINESCÊNCIA POR FIBRA ÓPTICA

DORNELAS, J. C. A.; LI, M. S.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

O objetivo deste trabalho é o de automatizar os experimentos de espectroscopia de luminescência por fibra óptica realizados no Grupo de Óptica do IFQSC. Para tal, confeccionou-se uma placa de interface que interligou o micro IBM/PC-XT (ou AT) ao experimento e desenvolveu-se um software de controle na linguagem Pascal para monitorar o mesmo e oferecer ao usuário diversas opções, com o intuito de tornar a realização do experimento e a análise dos resultados mais eficiente.

O experimento é realizado da seguinte forma: um feixe contínuo de laser, conduzido por fibra óptica, excita uma amostra dentro de uma sonda criogênica, a intensidade luminescente é dispersada e analisada através de um monocromador, que é acionado por um motor de passo, controlado pelo microcomputador, através das saídas digitais/analgicas da placa de interface e acionadas via software. Assim, é feita uma varredura do espectro para cada amostra específica e plotado um gráfico do sinal luminescente da amostra em função do comprimento de onda. Após o término do experimento, o usuário poderá manipular os resultados obtidos de forma a obter uma melhor compreensão dos mesmos. Para isto, ele tem à sua disposição algumas opções, tais como: fazer o "zoom" (aumento) de determinadas partes do gráfico gravar e/ou ler o arquivo de determinado experimento, fazer comparações entre gráficos obtidos de diferentes experimentos (adição, subtração, multiplicação e divisão das ordenadas de um gráfico em relação a outro) e obter relatórios com diversas informações sobre os experimentos realizados.

A versatilidade do sistema montado é propício para aquisição da luminescência da amostra de uma forma rápida. Já que não é necessária a utilização de um sistema de alto vácuo para atingir temperaturas de Hélio líquido, fazendo do sistema um instrumento útil para caracterização em laboratórios de produção de novos materiais.

Controlador de Sensor de Imagem CCD

MENEZES, L. DE S.; BARTHEM, R. B.

IF/UF RJ

Foi projetado e construído um dispositivo eletrônico capaz de controlar um sensor de imagem de tecnologia CCD, comandando o seu tempo de exposição, assim como o início do processo de aquisição de dados. esse

sensor destina-se a trabalhar com luz pulsada como, por exemplo, a emissão de um laser pulsado. O controle do início e término do tempo de aquisição destina-se a reduzir ruídos indesejáveis no sinal decorrentes da luz ambiente entre dois pulsos de luz. Houve também a preocupação em construí-lo de maneira a permitir uma boa faixa de regulagem no tempo de exposição, de forma a utilizar o sensor na aquisição de transientes de sinais luminescentes de forma a integrá-lo ou mesmo resolvê-lo no tempo.

Este trabalho contou com o apoio do CNPq e da Fundação Volkswagen.

HERMETICALLY PACKAGED SEMICONDUCTOR OPTICAL AMPLIFIER FOR APPLICATION IN SINGLEMODE FIBER SYSTEMS

BARBOSA, F. R.; CORAL, C.; CAUMO, J. R.;
FLACKER, A.

CPqD-Telebrás, Campinas SP

Travelling wave semiconductor optical amplifiers (TW-SOA) need high internal gain, no oscillation, and stable coupling with singlemode fibers in a hermetic package, for long-haul optical link applications. In this work, we present results of inclined stripe DCPBH-structure $1.3\mu\text{m}$ InGaAsP semiconductor laser amplifiers with single layer Si_3N_4 anti-reflection (AR) coatings; combination of inclined stripe with low reflectivity ARc, has yielded modal reflectivity $< 0.5\%$. Devices have been fully prepared, characterized, and packaged in our labs. The hermetic package of TWSOAs includes a unique solution for coupling singlemode fibers at both ends; fibers are fixed at optimized active coupling by use of low-temperature In-based solders. Temperature monitoring and control are also provided in the package. Spectra and gain measurements of TWSOAs were performed and up to 12dB fiber-to-fiber external gain, 23dB internal gain, and 17dB front-end gain have been obtained.

CÂMERA SEMI ANECÓICA PARA MEDIÇÃO DE INTENSIDADE E POTÊNCIA SONORA.

MAULE, C. R. N.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

ALVEY, A. M.

*SICOM - Sociedade Intercontinental de Compressores
Herméticos - São Carlos*

Com o objetivo de medir intensidade e potência sonora em compressores herméticos, foi projetada e construída uma Câmara Semi Anecóica e adquirido equipamentos de instrumentação em acústica na SICOM, sob orientação do Laboratório de Vibração e Acústica do INMETRO. A Câmara Semi Anecóica é uma sala com um piso de material totalmente reflexivo as ondas so-

noras, e suas paredes e teto são recobertas com absorvedores acústicos (cunhas) com um coeficiente de absorção, não menor que 0.99, com o objetivo de obter uma condição de campo livre. Esta condição é observada, quando há uma diminuição de 6 dB a cada vez que se dobra a distância entre a fonte sonora e o ponto de medida. Mostra-se características construtivas da câmara, dimensionamento e caracterização dos absorvedores acústicos, os primeiros resultados de ruído de fundo e também o método e instrumentação utilizada nas medidas de potência sonora.

DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS ÓTIMOS DE UM PULSO LASER DE CO_2 EM TECIDOS DENTÁRIOS

SANTOS, M. DOS; FURUZAWA, S. K.; ZÂNGARO, R.
A.

Universidade do Vale do Paraíba - UNIVAP

Este trabalho prevê a determinação de parâmetros ótimos de um pulso de um laser de CO_2 a fim de determinar o limiar de dano do tecido dentário. O interesse básico é a obtenção de um tecido duro e impermeável na região já atingida pela cárie, através de um processo de fusão e recristalização. O laser de CO_2 utilizado é um laser contínuo excitado por RF fornecendo 12 watts. O controle de potência bem como o tempo de exposição pode ser controlado com o auxílio de um gerador de sinais. O diâmetro do feixe laser foi medido através da técnica de deslocamento de fenda, apresentando um diâmetro igual a 1mm na região de impacto. O limiar de dano foi observado quando a energia atingiu 600mJ onde pode-se notar a modificação da cor do tecido dentário. Também se observa que a reação sobre a dentina e sobre o esmalte pronunciavam-se de formas diferentes. Para energias superiores a 1.8J temos a ocorrência de evaporação do tecido dentário seja para o esmalte ou para a dentina. Estamos atualmente em fase de análise das irradiações em lamelas e hemidentes para observar com microscopia eletrônica por varredura.

Detector de Íons Rápidos Utilizando Conversor

LANZA, A. C.; KOIDE, K.; MACCHIONE, E. L. A.;
HIRATA, J. H.; VASCONCELOS, S. S.; DIETZSCH, O.

Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Neste trabalho utilizamos para detecção de íons rápidos um conjunto formado por um conversor de elétrons (folha de "mylar" aluminizada com espessura de $6\mu\text{m}$ e 26 mm de diâmetro) e dois pequenos fragmentos de MCP's (diâmetro efetivo de 6 mm) montados em configuração do tipo "chevron". Os íons ao colidirem sobre o conversor arrancam elétrons que são focalizados por uma lente eletrostática sobre a face do primeiro MCP. Quando estes elétrons atingem as paredes internas dos

microtubos, novos elétrons são gerados e acelerados devido a uma diferença de potencial entre as duas faces do MCP. Colidindo novamente com as paredes do microtubo estes elétrons iniciam um processo de avalanche. A nuvem eletrônica formada é coletada em um anodo cônico usado para adequar a impedância do detector com a da eletrônica de aquisição de 50Ω . Este dispositivo foi testado usando-se uma fonte de ^{252}Cf que fornece produtos de fissão, com energias da ordem de 100 MeV. Observou-se um aumento considerável na amplitude do sinal formado pelos íons detectados de 80% com relação ao sinal do conjunto de MCP's sem o uso do conversor. Isto é devido a quantidade de microtubos excitados pelos elétrons provindos do "mylar" em comparação com o choque direto do íon com a superfície do MCP. A grande área do conversor utilizado (em relação ao diâmetro do MCP), propicia um aumento na área de detecção do sistema em 19 vezes. Os trabalhos de caracterização do detector com íons mono-energéticos, bem como os estudos para melhorar as características de "timing" encontram-se em andamento.

DETECTOR PARA CORRENTE DE PRÓTONS COM O USO DE UM CRISTAL PEROVSKITE

CRUVINEL, P. E.; MASCARENHAS, S.

EMBRAPA-NPDIA

MIRANDA, J.

Universidad Nacional Autonoma de Mexico

FLOCCHINI, R. G.

Crocker Nuclear Laboratory, University of California

Um detector térmico para a medida de corrente de prótons foi desenvolvido com o uso de um cristal Perovskite. Para uma dada energia, ao detector apresenta uma resposta linear em intensidade de corrente e uma resposta inversamente proporcional à frequência de modulação do feixe de prótons. Medidas de até 50nA (4.5MeV) foram obtidas usando um isochronous cyclotron, instalado no Laboratório Nuclear Crocker, da Universidade da Califórnia, Davis, U.S.A. A curva de calibração obtida experimentalmente foi comparada ao modelo teórico encontrado e os resultados se mostraram compatíveis. A corrente piroelétrica do cristal foi determinada como uma função da espessura e do calor específico do cristal, da condução e radiação do calor gerado, bem como pela energia depositada pelo feixe de prótons. O cristal utilizado pertence ao grupo dos ferroelétricos e, quando exposto a um fluxo de radiação, sofre um aumento de temperatura proporcional à magnitude da energia absorvida e inversamente proporcional ao seu calor específico. A expansão térmica induzida no material do cristal produz um sinal elétrico de saída proporcional à quantidade de energia absorvida. Resultados mostraram várias vantagens, tais como simples construção, operatividade em temperatura ambiente, não-requerimento de polarização externa, possi-

bilidade operativa fora ou dentro do vácuo, resposta linear a intensidade de corrente para uma dada energia e, para um feixe de prótons completamente freado, encontra aplicações como um medidor de corrente calorimétrico.

SIMULAÇÃO DO DESTINO DE UM SOLUTO ORGÂNICO EM UM MEIO POROSO NATURAL.

CRESTANA, S.

Embrapa - Nuc. Pesq. Des. Inst. Agropecuária.

GIULIANO, A. D.

U.S.P. - Inst. Fis. Qui. S. Carlos.

A utilização de modelos ambientais nos países desenvolvidos, para previsão e destino de solutos no solo, particularmente pesticidas, tem ganho importância crescente nos últimos anos. Neste trabalho, as simulações foram realizadas através do modelo determinístico LEACHIMP (Leaching Estimation and Chemistry Model - Pesticides), desenvolvido na Universidade de Cornell - E.U.A. Basicamente, utiliza-se o conceito de balanço de massa para obtenção da equação que governa o transporte do pesticida através do solo. Particularmente, o agroquímico atrazina foi o pesticida escolhido assim como algumas das variáveis edafoclimáticas-ambientais de entrada do modelo, foram obtidas a partir de um caso real. Para melhor adequar o modelo às condições brasileiras, a dependência da condutividade hidráulica original como conteúdo de água do solo, foi alterada para exponencial. Vários valores de meia-vida do pesticida foram empregados, variando desde 10 até 360 dias. O programa gerou, como saída, gráficos de concentração da atrazina em função da profundidade do solo, para diferentes instantes da simulação e valores de meia-vida. Medidas de campo e em laboratório estão sendo realizadas, com o fim de validar os resultados simulados. A possibilidade de um modelo confiável, preciso e validado, para previsão do destino de pesticidas no solo, nas condições tropicais brasileiras é altamente alentadora. As modificações introduzidas no modelo, assim como as simulações realizadas, constituem um passo inicial importante nesta direção. // (Este trabalho conta com o apoio do projeto temático FAPESP 90/3773-7)

SISTEMA PROGRAMADO PARA O CONGELAMENTO DE EMBRIÕES

CRUVINEL, P. E.; RABELLO, L. M.; BERTUCCI NETO, V.

EMBRAPA/NPDIA

CASAGRANDE, J. F.; ALMEIDA, C. A. DE

SEMBRA

BEM, A. R. DE

EMBRAPA/CENARGEN

QUEIROZ, F. H.

UNIKLIMA IND. E COM. LTDA

O uso de um sistema programado para o congelamento de embriões pode ser considerado um agente acelerador para o melhoramento genético de rebanhos, o que vem a representar melhorias que poderão ser alcançadas pela agropecuária e a agroindústria brasileira. Utilizou-se nesse desenvolvimento o método sugerido por Takeda (Techniques for freezing mammalian embryos, Laboratory Animal Reproduction, Colorado State University, 32-38, 1984), e Schneider et al (Theriogenology, 21(1):68-79, 1984), onde afirmam não ser importante a velocidade do resfriamento a partir da temperatura ambiente até o "seeding" (-5°C ou -7°C), recomendando velocidades de 0.3 a $0.8^{\circ}\text{C}/\text{minuto}$ até -30°C ou -40°C e posterior mergulho em nitrogênio líquido. O controle foi desenvolvido em malha fechada, onde é controlada a temperatura em uma resistência elétrica alocada na câmara dos embriões, seguindo uma função de duas variáveis, isto é, tempo e temperatura. Foi utilizado álcool etílico na câmara dos embriões e refrigerante R 502 como elemento ativo no processo térmico. O instrumental para a medição e o controle de temperatura que compõe o sistema opera na faixa de -40°C a $+40^{\circ}\text{C}$, com resolução de 0.1°C . Devido a ser microprocessado, o controlador apresenta a possibilidade de flexibilidade nas programações para auxílio no controle do processo de congelamento. Devido a essa flexibilidade, outros métodos além do sugerido por Takeda e Schneider et al, poderão ser testados posteriormente. O sistema apresenta ainda um frontal para informações sobre o processo, composto por barras gráficas de 101 pontos, bem como possibilita interligação com computadores via interface serial RS422. Resultados sem uso direto pelos produtores, mas de interesse da pesquisa, mostraram o estudo e o projeto de um controlador versátil, com flexibilidade de programações alternativas e a otimização do desenho mecânico para um congelador de embriões. Resultados de uso direto pelos produtores mostraram a possibilidade da conservação de embriões por tempo praticamente não-limitado, a não-necessidade de sincronização entre as doadoras e receptoras de embriões, a escolha da data do parto, a possibilidade do transporte de embriões em longas distâncias e o desenvolvimento de tecnologia nacional nessa área.

MEDIDOR DE NÍVEL PARA LÍQUIDOS VIA GUIA ÓTICO

SILVA, R. B. DA; ZÂNGARO, R. A.; SILVEIRA JR, L.
Universidade do Vale do Paraíba - UNIVAP

Este trabalho visa a implementação de um medidor de nível para líquidos, cujo princípio fundamenta-se no fenômeno da reflexão total. O protótipo construído é constituído de um cilindro de vidro ($n=1,52$) com diâmetro igual a 5mm e comprimento igual a 20cm, submerso em um recipiente acrílico, que pode ter seu volume preenchido por um determinado líquido; em nosso

caso utilizamos a água ($n=1,33$). Como fonte de luz, foi utilizado um laser de He-Ne não polarizado, fornecendo 3,5mW de potência ótica. A detecção foi realizada com o auxílio de um detector de silício. A idéia básica consiste em obter-se um ângulo de incidência no interior do guia situado entre os ângulos críticos das interfaces vidro-ar ($\theta_c=41^{\circ}$) e vidro-água ($\theta_c=61^{\circ}$). Desta forma quando o guia estiver circundando apenas pelo ar, teremos a garantia da reflexão total, obtendo portanto potência máxima no detector. Quando o nível da água começar a subir, na região da interface vidro-água, a reflexão total deixará de existir, implicando em uma perda de potência. A variação de potência em função da altura da coluna d'água mostrou-se linear.

ESPECTROSCOPIA FOTOACÚSTICA EM GASES: CARACTERIZAÇÃO DE SISTEMAS

PARMA, M.; SCALABRIN, A.; PEREIRA, D.
Instituto de Física - UNICAMP

A técnica de Espectroscopia Fotoacústica a Laser tem sido aplicada, nos últimos anos, a uma série de investigações científicas, desde a determinação de propriedades térmicas de gases e sólidos até a busca de novas linhas laser. Entre outras aplicações, tal técnica tem se destacado na detecção de poluentes atmosféricos. Os gases poluentes estão presentes na atmosfera em concentrações muito baixas, que variam do nível de sub-ppb até ppm. Esta técnica simples preenche todos os requisitos necessários (tais como sensibilidade e seletividade) necessários para sua aplicação na detecção destes traços gasosos. Tem-se buscado continuamente novos desenhos para os sistemas fotoacústicos para a maximização destes quanto à razão sinal/ruído (S/N). Neste trabalho apresentamos dados referentes a um sistema fotoacústico gasoso. Nele empregamos metanol como molécula absorvedora e um laser de CO_2 em guia de onda para o bombeamento óptico. O sistema usa como cela uma cavidade cilíndrica do tipo Ressonador de Fabry-Perot. Com esta cela foram efetuadas medidas para a sua caracterização como uma cela de múltiplas passagens para a radiação de bombeamento. Seu desempenho será comparado ao de outros sistemas em fase de caracterização.

Realização radiométrica da candela através do método de auto calibração de fotodiodos de Si
PIMENTEL, R.
IF/UFP
BARTHEM, R. B.
IF/UFRJ

Um fotodiodo de silício Laser Precision RsP-595 é utilizado para realizar a unidade fotométrica básica, a candela, desde 1979 definida em termos radiométricos. O

método de autocalibração consiste em caracterizar o detector através de três experimentos capazes de determinar sua eficiência quântica interna e seu fator de absorção de forma puramente comparativa: a reflectância das camadas superficiais do detector, as recombinações na parte posterior do detector e as recombinações na superfície frontal do detector. Uma vez calibrado, o detector será testado com lâmpadas padrões do Laboratório Nacional de Óptica, no INMETRO, e comparado com padrões realizados em outros países.

FATORES DE AMPLIFICAÇÃO EM CONTADORES PROPORCIONAIS COM USO DE GEOMETRIA MULTIFILAR

SOARES, I. M.; ALMEIDA, D. P.

UFRJ

Os mecanismos de amplificação em contadores proporcionais tem sido estudados por diversos autores. Zastawny tem estimado que há cinco regiões onde em cada uma destas regiões, o primeiro coeficiente de ionização de Townsend $\frac{\alpha}{p}$ possui uma dependência diferente sobre S ($\frac{S \equiv E}{p}$, p é a pressão, e E o campo elétrico, e α é o número de pares de íons formado por um elétron por centímetro). O ganho de um contador proporcional é dado pela integral do primeiro coeficiente de Townsend. $\ln g = \int_r a^n f t y \alpha(E) dr$ Várias expressões de amplificação de gases foram obtidas tomando $\frac{\alpha}{p}$ como função explícita de S , para um detector monofilar onde o campo elétrico E é dado por $E = \frac{V}{pr \ln(\frac{b}{r})}$ V é a voltagem aplicada entre o anodo e o catodo a, b são os raios anódicos e catódicos C é a capacitância por unidade de comprimento do fio anódico Neste trabalho fazemos uma abordagem em uma geometria multifilar, que consiste de uma grade plana formada de fios igualmente espaçados. Neste caso o campo elétrico é dado pela expressão $E = \frac{CV}{\tan \frac{\alpha}{2}}$.

Bibliografia

Electrostatic Problems In Multiwire Proportional Chambers G.A. Skine Nuclear Instruments And Methods 105 (1972) 565-572

Generalized Gas Gain Formula For Proportional Counters Takahiko Aoyama Nuclear Instruments And Methods in Physics Research A234 (1985) 125-131

Gas Amplification Factor In Neon-Nitrogen Filled Proportional Counters A. Othman Nuclear Instruments And Methods in Physics Research A270 (1988) 492-497

UTILIZAÇÃO DA CÉLULA ELETROÓPTICA PARA MEDIÇÃO DE TENSÕES ELÉTRICAS ELEVADAS

LIMA, C. J. DE; SPINA, F. D.; LEMES, J. C.

Universidade do Vale do Paraíba - UNIVAP

Os sistemas convencionais utilizados para medição de tensões elétricas muito elevadas além de ocupa-

rem grande espaço, tem um tempo de resposta lento. Utilizando-se uma célula eletroóptica, estes dois problemas são resolvidos, pois o espaço que o sistema da célula ocupa é mínimo e a resposta é praticamente em tempo real. Este sistema é fundamentado na anisotropia dos cristais, onde os parâmetros de permissividade dielétrica e a permeabilidade magnética, dependem de vários fatores, entre os quais a pressão, a temperatura, a intensidade de campo elétrico. O nosso interesse está direcionado para a dependência da permissividade elétrica com o campo elétrico, ou seja, o efeito eletroóptico, no qual a permissividade dielétrica depende do campo elétrico aplicado. O princípio de funcionamento do sistema baseia-se na incidência de um feixe laser linearmente polarizado sobre uma das faces do cristal e da aplicação de um campo elétrico às faces perpendiculares ao feixe laser. O campo elétrico provocará uma mudança no eixo de polarização do feixe laser. Utilizando este princípio, através de uma montagem óptica simples, podemos medir a tensão elétrica.

CONSTRUÇÃO DE UM LASER DE CO₂-TEA

OLIVEIRA, A. C. DE

Instituto de Estudos Avançados - CTA

Devido à sua característica de apresentar a emissão de pulsos de alta potência, o laser de CO₂ tipo TEA tornou-se uma ferramenta amplamente utilizada em diferentes áreas de pesquisa e desenvolvimento tecnológico. Este trabalho apresenta um laser de CO₂-TEA construído em nossos laboratórios. Trata-se de um laser sintonizável, através de uma grade de difração de 120 linhas/mm, que permite varrer a região de 9 a 11 μm . O laser dispõe de um sistema de circulação da mistura gasosa e um trocador de calor para a refrigeração da mesma. O volume do meio ativo é de 0,1 l e está sendo extraída uma densidade de energia de 10 J/l, em regime de multimodos. Atualmente, o laser está operando com uma taxa de repetição de 30 pulsos por segundo. Serão apresentados resultados obtidos para diferentes pressões parciais da mistura CO₂:N₂:He.

DESENVOLVIMENTO DE UMA FONTE DE POTÊNCIA VERSÁTIL PARA CARACTERIZAÇÃO DE MAÇARICOS DE PLASMAS

CUNHA, A. G.; BARRETO, M. T.; FRANCISCO, T. B. B. E

Departamento de Física e Química - CCE/UFES

Desenvolvemos uma fonte de potência, de 70 kw, para os maçaricos de plasmas do Laboratório de Materiais Carbonosos e plasma Térmico do DFQ. Esta fonte tem duas finalidades básicas: i) ser usada nas diversas aplicações dos maçaricos de plasmas desenvolvidos; ii)

fazer parte do sistema computadorizado de diagnóstico para os mesmos. Esta fonte è constituída de tr es estágios de pot encia; um deles t em curva de pot encia fixa e os dois outros t em curvas ajustáveis, deste modo pode-se variar a pot encia continuamente até 70 kw, com correntes de até 300 A. A combinação dos tr es estágios permite ajustar a curva característica da

fonte para uma operação estável com diversos tipos de maçaricos de plasmas. Esta nova fonte, juntamente com a primeira (desenvolvida numa fase anterior neste laboratório), formam um sistema versátil que poderá ser usado em diferentes tipos de maçaricos de plasmas.

CRISTAIS LÍQUIDOS

Cristais Líquidos I (LIQ) - 19/05/93

Image analysis of quenched blue phase 1: transmission electron microscopy

DELACROIX, H.

Centre de Génétique Moléculaire, CNRS, 91190, Gif sur Yvette, France

MARIANI, P.

Istituto di Scienze Fisiche, Università di Ancona

GILLI, J. M.

CNRS, UA 190, Faculté des Sciences de Nice, Parc Valrose 06034 Nice Cedex, France

A side chain mesomorphic cooligomer present a large blue phase 1 temperature domain. The relatively slow cooling of the sample starting from BP1 allows the quench of colored crystallites below the T_g of this material (1). The microtome cut of these crystallites and observation by direct transmission electron microscopy reveal the presence of biperiodic textures very different from the cholesteric ones (2). Digitalization of these textures, associated with a 2D Fourier transform, and to an original model of diffraction by a crystalline layer of thickness lower than the mail, allowed us to index the spots and to confirm the presence of the BP1 O^3 symmetry.

ANÁLISE TEÓRICA DE SUPERFÍCIES INOMOGÊNEAS: EFEITOS SOBRE A ORIENTAÇÃO NEMÁTICA.

EVANGELISTA, L. R.

UEM, Maringá

BARBERO, G.

Politecnico di Torino, Itália

A descrição física dos cristais líquidos nemáticos é feita a partir da introdução de um campo diretor, \vec{n} , que coincide com a orientação molecular média das moléculas que formam a fase. Esse campo define o eixo óptico do material nemático uniaxial. Na ausência de campos externos, \vec{n} depende somente do tratamento superficial. Se esse tratamento assegurasse um ângulo de "tilt" ou "twist" uniforme, no volume, o ângulo deveria depender somente da distância do ponto considerado às duas placas limitantes da amostra nemática. Entretanto, como não se obtém uma orientação uniforme perfeita do diretor, torna-se importante conhecer a influência da não uniformidade do tratamento superficial sobre propriedades experimentalmente detectáveis, como, por exemplo, a diferença de caminho óptico. Diante disso, propomos um modelo analítico bem definido para essas superfícies inhomogêneas e apresentamos a solução geral do problema elástico em termos dos propagadores. Diversos casos particulares são detalhadamente analisados. Eles envolvem, em geral, modulações periódicas ou aleatórias do ângulo de "tilt" na superfície, nas situações de ancoramento forte e fraco. A análise revela que uma flutuação aleatória do eixo fácil poderia ser interpretada como uma situação de ancoramento fraco, quando, na verdade, o ancoramento é forte. Portanto, a presença de um eixo fácil não uniforme requer uma determinação experimental mais cui-

dadosa da energia de ancoramento, que é determinada por métodos ópticos.

PROPRIEDADES DE ANCORAMENTO DE UM CRISTAL LÍQUIDO LIOTRÓPICO NA TRANSIÇÃO NEMÁTICO-ISOTRÓPICO

OLIVEIRA, E. A. DE; FIGUEIREDO NETO, A. M.

Instituto de Física - USP

Para esse estudo foi utilizada uma mistura liotrópica composta por laurato de potássio (29% peso), decanol (6.6%) e água (64%). A sequência de fases em função da temperatura é a seguinte: isotrópica (17^0), nemática calamítica (50^0) e isotrópica. A temperatura da transição nemática-isotrópica, T_C é determinada a partir de medidas da birrefringência em função da temperatura. Os processos dinâmicos de orientação e relaxação são estudados introduzindo-se uma distorção tipo twist através de um campo magnético e medindo-se a transmitância da amostra entre polarizadores cruzados. Os resultados experimentais são comparados aos valores calculados para a transmitância da amostra, supondo dois tipos de configuração para o diretor. O parâmetro de ajuste é o tempo característico de orientação nas superfícies de contorno, τ_s . Os resultados obtidos mostram que o τ_s é cerca de 10^3 vezes maior que o tempo de orientação no volume e que a configuração do diretor no interior da amostra corresponde ao modelo de ancoramento proposto para cristais líquidos liotrópicos[1]. De acordo com o modelo proposto, τ_s é proporcional a χ_a^{-1} (anisotropia de susceptibilidade magnética). Medidas de τ_s em função da temperatura mostram que τ_s diminui próximo de T_C . O expoente crítico da susceptibilidade determinado experimentalmente é: $\gamma = 1.1 \pm 0.1$

que está de acordo com o valor previsto pela teoria de campo médio. //

[1] E.A. Oliveira, A.M. Figueiredo Neto and Durand, Phys. Rev. A. 44, R825 (1991).

INTERAÇÕES PARTÍCULA-PARTÍCULA EM FERROFLUÍDOS IÔNICOS POR RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA

TRONCONI, A. L.; PELEGRINI, F.
UFG

TOURINHO, F. A.; MORAIS, P. C. DE
UnB

A largura de linha de ressonância paramagnética eletrônica, à temperatura ambiente, para amostras de um ferrofluido iônico à base de ferrita de manganês é analisada em função da distância média interpartícula. A distância média partícula-partícula é alterada por diluição aquosa de uma amostra concentrada do ferrofluido iônico. O comportamento do alargamento da linha de ressonância é explicado por um modelo que considera o ferrofluido como composto de centros magnéticos, com spin efetivo localizado na partícula magnética, imersos numa matriz diamagnética e arranjados dentro de uma rede do tipo BCC. O spin efetivo associado às partículas magnéticas é avaliado dentro de um modelo de dois níveis usando estatística clássica. A natureza do sistema físico e a avaliação dos resultados experimentais indicam a possibilidade de estudar interações de natureza elétrica e magnética entre as partículas do ferrofluido. Esta é a primeira vez que se utiliza a ressonância paramagnética eletrônica no estudo de materiais ferrofluidos.

RELAXAÇÃO BROWNIANA EM FERROFLUÍDOS IÔNICOS POR RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA

PELEGRINI, F.; TRONCONI, A. L.
UFG

SILVA, G. J. DA; TOURINHO, F. A.; MORAIS, P. C.
DE
UnB

A largura de linha de ressonância paramagnética eletrônica, para uma amostra concentrada de um ferrofluido iônico à base de ferrita de manganês é analisada em função da temperatura e em função da distância interpartícula. Em uma primeira sequência de medidas a temperatura foi mantida numa faixa abaixo da temperatura ambiente, onde o ferrofluido permanece congelado. Em uma segunda sequência de medidas, à temperatura ambiente, a distância média partícula-partícula é alterada por diluição aquosa de uma amostra concentrada do ferrofluido iônico. O comportamento do alargamento da linha de ressonância é estudado em

ambos os casos. Os parâmetros foram controlados de forma que a diferença básica entre as duas medidas é em relação aos processos de relaxação magnética; na amostra congelada o processo de relaxação é dominado pelo mecanismo "Neel", enquanto que na amostra não congelada o processo de relaxação apresenta componentes "Browniano" e "Neel". A comparação entre os dados obtidos com as duas medidas oferece, pela primeira vez, uma forma alternativa de estimar o tempo de relaxação browniano de uma amostra de ferrofluido. O tempo estimado foi da ordem de 48 microsegundos, portanto dentro da faixa esperada para materiais ferrofluidos.

Cristais Líquidos II (LIQ) - 19/05/93

ESPALHAMENTO CENTRAL DE RAIOS-X EM FERROFLUIDOS IÔNICOS COM CARACTERÍSTICAS NEMÁTICAS.

SILVA, M. DE F. DA; FIGUEIREDO NETO, A. M.
IFUSP/Laboratoire pour l'Utilisation du Rayonnement
Electromagnetique - Orsay - França

Estudamos por meio da técnica de espalhamento central, os ferrofluidos iônicos de base aquosa e partículas de $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ e MnFe_2O_4 . Esses materiais apresentam, na ausência de campos magnéticos, um sinal de birrefringência óptica, característico de um cristal líquido nemático. O experimento foi realizado com fonte sincrotrônica e a curva de espalhamento obtida atingiu valores de $s^2 \approx 2.5 \times 10^{-3} \text{ \AA}^{-2}$ (onde $s \approx 2\Theta/\lambda$, 2Θ é o ângulo de espalhamento e λ o comprimento de onda dos raios-x). As curvas de espalhamento da amostra de $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ revelaram o comportamento usual de Guinies, fornecendo um diâmetro de 108 \AA para as partículas magnéticas. Já a amostra de MnFe_2O_4 apresentou "bumps" e bandas na curva de espalhamento ao longo da direção do campo magnético aplicado. O "bump" está em $s_1 \approx 2.1 \times 10^{-2} \text{ \AA}^{-1}$ (que equivale a uma distância média $d_1 \approx 60 \text{ \AA}$) e a banda em $s_2 \approx 3.9 \times 10^{-2} \text{ \AA}^{-1}$ ($d_2 \approx 30 \text{ \AA}$). Os resultados indicam a formação de "dusters" anisotrópicos nesse material.

Estudos teóricos e experimentais de Birrefringência em ferrofluidos à base de

MnFe_2O_4 e $\gamma\text{Fe}_3\text{O}_4$

SILVA, M. DE F. DA

Instituto de Física Universidade de São Paulo

FIGUEIREDO NETO, A. M.

Instituto de Física Universidade de São Paulo

Neste trabalho medimos o sinal da birrefringência em ferrofluidos à base de MnFe_2O_4 (*) e $\gamma\text{Fe}_3\text{O}_4$ (**) com diferentes concentrações, diferentes tamanhos de partículas e tipo ácido e base (1), (2). Foram efetuadas

medidas de birrefringência para as diferentes amostras, nos seguintes casos:

- a) birrefringência em função do campo magnético ($\Delta n \times H$).
- b) birrefringência em função da temperatura ($\Delta n \times T$).
- c) birrefringência em função do campo magnético e da temperatura

$\Delta n \times H(T)$. Observamos que os ferrofluidos $MnFe_2O_4$ têm comportamento diferente dos ferrofluidos γFe_2O_3 , quando submetidos à diferentes temperaturas. Para os nossos estudos ópticos os ferrofluidos são colocados em capilares de diferentes espessuras (50 nm, 100 nm, 200 nm e 400 nm), e observamos que a birrefringência independe das espessuras dos capilares. Outro objetivo deste trabalho é determinar a origem do sinal da birrefringência dos ferrofluidos. De acordo com Osborn (3), a birrefringência está associada à forma das partículas, e se assumimos as partículas como tendo a forma de elipsóides prolatos de razão axial

$$\frac{b}{a} = \frac{c}{a}$$

há uma forma de calcularmos a sua anisotropia óptica e suabirrefringência de forma (4), (5). Efetuamos então estes cálculos e verificamos que o sinal da birrefringência, para os ferrofluidos estudados, é negativo e da ordem de grandeza de 10^3 , o que vem de encontro com os resultados obtidos experimentalmente.

- (1) Tourinho, F.A. et al. J. Mater.Sci. **25** (1990) 3249
- (2) Massart, R., C.R. Acad. Sci., Paris **291c** 1 (1980)
- (3) Osborn, J.A. Phis. Rev. **67** 351-7 (1945)
- (4) Davies, H.W., Llewellyn, J.P. J.Phys.D : Appl. Phys. **12**, 1357-63 (1979)
- (5) Peterlin, A., Stuart, H.A., Z.Phys. **112** 129-47 (1939)
- (*) ferrofluido sintetizados por F.A. Tourinho
- (**) ferrofluido sintetizados por V. Cabuil

Medida da viscosidade de cristais líquidos liotrópicos utilizando um viscosímetro de ferrofluidos

BACRI, J.

Université Pierre et Marie Curie, Paris-França

GIMENES, O.; SILVA, M. R. DA; FIGUEIREDO NETO, A. M.

IFUSP

O viscosímetro a base de ferrofluidos utiliza como princípio básico, a resposta das partículas desse ferrofluido a campos magnéticos, quando diluídas em um líquido de suporte. Neste trabalho, dopamos um cristal líquido liotrópico de lamato de potássio/decanol/água com ferrofluidos iônicos de base aquosa e orgânica (partículas de $\gamma - Fe_2O_3$). A amostra é colocada em "microslides" de $100\mu m$ de espessura e em seguida submetida a um campo estático $200G < H_i < 3000G$ e

a um pulso $40G < H_2 < 600G$ respectivamente, perpendicular a H_1 . A intensidade de luz que atravessa a amostra, entre polarizadores cruzados, é medida em função do tempo (fotodiodo acoplado a um PC). A partir dos tempos de relaxação obtidos em função de H , obtivemos a viscosidade de $8,5 \times 10^{-1}$ poise para o liotrópico à temperatura de $25^\circ C$. Apoio financeiro: CNPq/RHAE e FAPESP

DETERMINAÇÃO DO COMPRIMENTO DE DEFORMAÇÃO A PARTIR DA BIRREFRINGÊNCIA INDUZIDA POR FLUXO EM LIOMESOFASES ISOTRÓPICAS

FERNANDES, P. R. G.; FIGUEIREDO NETO, A. M.
Universidade de São Paulo

Neste trabalho, apresentamos o estudo da birrefringência induzida por fluxo na fase isotrópica de uma mistura liotrópica (KL DeOH H_2O). As amostras são isotrópicas à temperatura ambiente. As deformações são cosequências de fluxos produzidos a partir do movimento de uma esfera de aço ($\phi = 4mm$) no interior da mistura homogênea. Com a amostra entre polarizadores cruzados mede-se o tempo de relaxação da birrefringência induzida da ordem de $\tau \sim 10^{-2}$, com um viscosímetro de Ostwald mede-se a viscosidade da mistura isotrópica, à temperatura ambiente, da ordem de $\gamma \sim 1$ poise. Utilizando esses resultados experimentais e o valor da constante elástica dos liotrópicos $K \sim 10^{-6}$ din determinamos um comprimento de deformação elástica, λ , induzido por gradientes de velocidades no interior da amostra. Os valores de λ são obtidos a partir da equação de balanço de torques com "backflow" e as condições de contorno atribuídas ao problema. Efetuamos medidas de λ em função da temperatura e o valor encontrado é da ordem de 10^{-6} m.

Análise Estrutural de Liomesofases (LIQ) - 20/05/93

Structure analysis of cubic phases of lipid-containing systems: freeze fracture electron microscopy

DELACROIX, H.; GULIK-KRZYWICKI, T.; LUZZATI, V.

Centre de Génétique Moléculaire, CNRS, Avenue de la Terrasse, 91118 Gif sur Yvette, France

MARIANI, P.

Istituto di Scienze Fisiche, Università di Ancona

A systematic structural analysis based on X-ray diffraction experiments has permitted to identify on lipid-containing systems six different lyotropic cubic phases and to determine their structures. In particular, three of them (Q^{224} , Q^{230} and Q^{229} , in our notation) can be described in terms of two three-dimensional networks of joined rods, mutually intertwined and unconnected. The structure of the Q^{212} phase is derived from that of the Q^{230} one of the two networks of rods is preserved and the other is replaced by a lattice of closed micelles. Concerning the last two cubic phases, it has been recently showed that their structure consists of two types of disjointed and quasi-spherical micelles, embedded in a three-dimensional hydrocarbon (Q^{227}) or water (Q^{223}) matrix. Freeze fracture electron microscopy images relative to cubic samples show, quite unexpectedly, flat areas containing a periodical information, which also indicate that the fracture crosses the structure following preferential directions. Moreover, the image processing appears extremely useful to correlate the structure with freeze fracture images. We report here some recent results obtained using a sophisticated image processing method for the analysis of electron micrographs relative to the Q^{223} (Pm3n) and the Q^{230} (Ia3d) cubic phases. In particular, the analysis of the similarity between filtered images and electron density maps of the X-ray scattering study will be exposed in detail and discussed, emphasizing the role that such an approach presents in the understanding of the local aspect and symmetry of the fractured surfaces.

1. V. Luzzati, P. Mariani, H. Delacroix, Makromol. Chem. Macromol. Symp., **15**, 1 (1988).
2. P. Mariani, V. Luzzati, H. Delacroix, J. Mol. Biol., **204**, 165 (1988).
3. V. Luzzati, R. Vargas, A. Gulik, P. Mariani, J. Seddon, E. Rivas, Biochemistry (in press).
4. H. Delacroix, P. Mariani, T. Gulik-Krzywicki, J. de Phys. (Coll), **51**, C7-119 (1990).

ESTUDO DE FASES NEMÁTICAS CILÍNDRICAS (Nc) POR ESPALHAMENTO DE RAIOS-X

TEIXEIRA, C. V.; ITRI, R.

Instituto de Física, Univ. de São Paulo

Este trabalho tem como objetivo o estudo de micelas no domínio nemático cilíndrico Nc do sistema lauril sulfato de sódio (SLS)/água/decanol, à temperatura ambiente, por espalhamento de raios-X. Para isso foram preparadas fases dentro do domínio Nc, mantendo-se constante a razão molar água/SLS (45.2) com variação gradativa da razão molar decanol/SLS de 0.17 a 0.38. Este intervalo compreende as transições Isotrópica \rightarrow Nc e Nc \rightarrow Nd (nemática discótica). Inicialmente as amostras, acondicionadas em capilares cilíndricos com diâmetro interno de 1mm, foram observadas por espalhamento de raios-X (método fotográfico de Laue — distância amostra-filme de 10cm). Após certo tempo de permanência no capilar, as fases Nc apresentam duas bandas intensas de difração dispostas na região equatorial (perpendicular ao eixo do capilar), intrinsecamente relacionadas ao efeito de orientação superficial das micelas (nenhum campo externo aplicado). Verifi-

cada a condição acima descrita para cada amostra, foram levantadas as respectivas curvas de espalhamento de raios-X em baixo ângulo. As fases isotrópica e Nd também estão sendo estudadas por espalhamento de raios-X a baixo ângulo. A análise das curvas vem sendo feita via modelagem do fator de forma micelar e da função de interferência intermicelar. Paralelamente, as amostras Nc foram também caracterizadas por difração de raios-X (método de Laue) na presença de campo magnético.

Comportamento do Sistema Ternário SLS/DeOH/H₂O em Função da Concentração de Decanol

SANTIN FILHO, O.; AMARAL, L. Q. DO
IFUSP

Sistemas ternários a base de anfílico, água e compostos orgânicos exibem diversos tipos de estrutura que vão desde agregados pré-micelares até bicamadas de anfílico de área bastante extensa. A forma e tamanho de tais objetos é bastante dependente tanto da temperatura quanto da concentração de cada um dos componentes do meio^a.

O sistema constituído por lauril sulfato de sódio (SLS), decanol (DeOH) e água vem despertando interesse crescente desde a descoberta e caracterização de um domínio nemático entre as fases isotrópica e lamelar^b, tendo sido estudado por microscopia óptica e difração de raios-X a baixo ângulo. Também foi abordada a transição isotrópica-hexagonal no sistema binário^c SLS/H₂O e o comportamento tipo micelas finitas na fase hexagonal^d.

Neste trabalho investigamos o comportamento estrutural do sistema ternário acima, com ênfase nas transições ISO → HEX e HEX → LAMELA, mantendo-se a razão molar $M_w = n(\text{H}_2\text{O})/n(\text{SLS})$ constante ($M_w = 39,40$) e alterando-se a razão molar decanol/anfifílico $M_d = n(\text{DeOH})/n(\text{SLS})$, a fim de se verificar o papel do decanol nas diversas transições. Para tanto, foram elaboradas vinte amostras com valores de M_w entre 0,12 e 0,60. As amostras foram colocadas em capilares cilíndricos de quartzo e analisadas por difração de raios-X com geometria de Laue e por microscopia óptica. Os resultados mostram que ocorre uma evolução da estrutura com o aumento da quantidade de decanol, da forma

ISO → ISO+HEX → HEX → N_c → N_d → LAMELAS.

Observou-se um ligeiro aumento na distância média entre os objetos ao longo dessa evolução, evidenciando um crescimento destes. Planeja-se a partir de agora um estudo mais detalhado em torno das diversas transições descritas acima tanto por concentração quanto por temperatura.

^aEkwall, P.; *Adv. Liq. Cryst.*; 1975, (1), 1.

^bAmaral, L.Q., Helene, M.E.M.; *J. Phys. Chem.*; 1988, (92), 6094.

^cItri, R. e Amaral, L.Q.; *J. Phys. Chem.*; 1990, (94), 2198.

^dAmaral, L.Q., Gulik, A., Itri, R. e Mariani, P.; *Phys. Rev. A*; 1992, (46), 3548.

Cristais Líquidos (LIQ) - 21/05/93

DIFERENÇAS EXPERIMENTAIS ENTRE OS VALORES DE VOLUME ESPECÍFICO MEDIDOS COM DENSÍMETRO E OS MEDIDOS COM DILATÔMETRO EM SISTEMAS LIOTRÓPICOS, APRESENTAÇÃO E DISCUSSÃO DE RESULTADOS

PINTO, A. V. DE A.; BARBOSA, A. A.

Grupo de Cristais Líquidos da UFSC

No momento uma controvérsia se estabelece quanto à conveniência no uso do densímetro, *PAAR DMA-602*, em sistema micelares estruturados. O ponto central da dificuldade tem origem na não reprodução de discontinuidades no volume específico, como função da temperatura nas transições de fases em sistemas liotrópicos,

quando comparados os dados obtidos no densímetro com dados obtidos no dilatômetro. Examinando os chamados *Efeitos Complexos*, alegadamente presentes no densímetro e devidos a vibração da cela, provocamos efeitos vibracionais, mecânica e eletromagneticamente, sobre o dilatômetro e nenhuma resposta mensurável foi observada sobre o comportamento do volume específico da amostra à transição. Todavia, examinando o sistema binário, octilcloreto de amônio - água, onde a transição hexagonal-isotrópica, ainda na ausência dos *Efeitos Complexos* mostra uma pequena mas mensurável variação do volume específico, quando medida ao dilatômetro. Assim, alguma dúvida se lança sobre tais *Efeitos Complexos*. Em nossa apresentação discutiremos nossos resultados e suas implicações.

UM MODELO DE TEORIA DE CAMPOS PARA A FASE NEMÁTICA: A TRANSIÇÃO NEMÁTICO-ISOTRÓPICO.

SIMÕES, M.; EVANGELISTA, L. R.; PALANGANA, A. J.

Univ. Est. Maringá, Paraná

Cristais líquidos nemáticos são materiais caracterizados por uma ordem orientacional de longo alcance, sendo a orientação média das moléculas definida pelo diretor \vec{n} . Considerando as moléculas como bastões ríes, propomos um modelo de teoria de campos para a descrição da estrutura nemática dos cristais líquidos. O modelo é baseado em algumas características fundamentais da fase nemática, e é equivalente ao modelo de sine-Gordon. Neste trabalho utilizamos o modelo para investigar a transição de fase nemática-isotrópica. A descontinuidade no parâmetro de ordem é calculada. Os resultados concordam com os dados experimentais. O modelo é igualmente útil no estudo dos defeitos da fase nemática e é potencialmente adequado para uma análise das características não lineares do sistema.

INSTABILIDADES TÉRMICAS EM MESOFASES NEMÁTICAS LIOTRÓPICAS UNIAXIAIS.

ARROTÉIA, A. A.; PALANGANA, A. J.

UEM, Maringá.

FIGUEIREDO NETO, A. M.

IFUSP

Uma característica fundamental dos cristais líquidos é a natureza anisotrópica de suas propriedades físicas. Essa anisotropia se manifesta na resposta que esses materiais apresentam, quando submetidos à ação de campos externos. Na presença de gradientes térmicos os sistemas termotrópicos exibem instabilidades térmicas, que são descritas à luz das teorias clássicas. No entanto, em sistemas liotrópicos o seu estudo é recente^a, e tem revelado uma estrutura periódica de rolos nas proximidades da transição de fase nemático calamítico-isotrópico.

Esta instabilidade térmica, peculiar aos sistemas liotrópicos, não é descrita pelas abordagens clássicas. Diante disso, estendemos esta investigação a outros sistemas liotrópicos que apresentam, também, a mesofase nemática discótica, submetidos a gradientes térmicos verticais. Os resultados mostram a existência de instabilidades, sob condições apropriadas dos parâmetros térmicos. O aparecimento dessas estruturas independe do sinal do gradiente térmico. A configuração topológica do diretor, fundamental para a compreensão do mecanismo dessas instabilidades, é investigada e confrontada com os resultados anteriormente obtidos.

^aA. J. Palangana, J. Depeyrot and A. M. Figueiredo Neto, *Phys. Rev. Lett.*, 65, 2800 (1990).

**STRUCTURAL ANALYSIS OF THE
LYOTROPIC POLYMORPHISM OF
FOUR-STRANDED AGGREGATES OF
2'-DEOXYGUANOSINE
3'-MONOPHOSPHATE DERIVATIVES**

MARIANI, P.; MORAIS, M. M. D.

Istituto di Fisica Medica Università di Ancona (Italy)

GOTTARELLI, G.; SPADA, G. P.

*Dipartimento di Chimica Organica Università di Bologna
(Italy)*

DELACROIX, H.

*Centre de Genetique Moleculaire, CNRS Gif-sur-Yvette
(France)*

TONDELLI, L.

LCo.C.F.A.-CNR Ozzano Emilia (Italy)

Guanosine derivatives, dissolved in water, can form cholesteric and hexagonal mesophases. The common structural unit is a chiral columnar aggregate composed of a stacking of Hoogsteen-bonded guanosine tetramers. By using optical microscopy, circular dichroism and X-ray diffraction techniques, we analyse the complex columnar polymorphism of two derivatives of 2'-deoxyguanosine, 3'-monophosphate d(Gp) and 3'-monophosphate monoisobutyl ester d(Gp)iBu. As a function of water concentration, both compounds exhibit four different columnar phases: in addition to the well known cholesteric (Ch) and hexagonal (II) phases, a 2-dimensional square (Sq) lattice and a new hexagonal packing have been observed. In such a structure (H_b), two columns are packed in the 3m special positions of co-ordinates 1/3,2/3 and 2/3,1/3 of the two dimensional hexagonal unit cell. The unusual phase sequence appears to be related to the presence of strong short-range intercolumnar interactions. Moreover, the release of stacking constraints determined by changes in hydration seems to induce a tilting of the guanosine residues which form the tetramers.

**ESTUDOS PRELIMINARES DE
ESPALHAMENTO RAYLEIGH NUM
CRISTAL LÍQUIDO FERRONEMÁTICO**

SANTOS, M. B. L.; AMATO, M. A.

Departamento de Física, Universidade de Brasília

A dopagem de um cristal líquido com pequenas quantidades de ferrofluido, leva a intrigantes efeitos descritos na literatura, como exemplificado pelo alinhamento de uma fase nemática [1] em campos magnéticos bastante baixos (~ 10 G). O uso dessa facilidade num experimento de espalhamento Rayleigh, contudo, tem sido evitado, provavelmente em função da indesejável superposição de espectros que tal sistema misto tende a exibir, em virtude do movimento browniano das partículas magnéticas em suspensão. Nesse trabalho procuramos contornar esse problema através de uma adequada escolha do sistema e dos modos hidrodinâmicos de flutuação térmica (responsáveis pelo espalhamento de luz dinâmico), de forma que o efeito dinâmico intrínseco (do cristal líquido) se situe numa escala de tempo (mais lenta) bastante diferenciada do efeito browniano mencionado acima. Assim, selecionamos o sistema liotrópico K-laurato/ decanol/ D_2O , do qual já acumulamos razoável conhecimento sobre seu comportamento dinâmico [2], dopado com um ferrofluido de base aquosa. Adotando uma geometria de espalhamento que permita selecionar as deformações de torção ("twist"), conseguimos evitar o problema de superposição de espectros acima referido. Nessas condições, acreditamos que o estudo do sistema ferronemático por espalhamento de luz abre excelentes possibilidades, que ultrapassam em muito a facilidade mencionada de orientação de amostras. No presente trabalho apresentaremos resultados preliminares do efeito da aplicação de campos fracos como método de controlar a própria dinâmica de flutuações do sistema.//

[1] L. Liébert, A. Martinet, *J. Physique Lett.* 40 (1979) L-363. [2] M.B. Lacerda Santos, Y. Galerne, G. Durand, *Phys. Rev. Lett.* 53, (1984) 787; M.B. Lacerda Santos, G. Durand, *J. Physique* 47, (1986) 529; M.B.L. Santos, W.B. Ferreira, M.A. Amato, em preparação.

**ESTUDO DO EFEITO DE "BACKFLOW"
EXTENDIDO A FASE NEMÁTICA
CALAMÍTICA (N_c) DE UM CRISTAL
LÍQUIDO LIOTRÓPICO**

SANTOS, M. B. L.

Universidade de Brasília, Depto. de Física

Nesse trabalho foram feitas medidas de espalhamento Rayleigh na fase nemática tipo- cilindro (N_c) da mistura liotrópica K- laurato decanol D_2O . Medindo-se o tempo de decaimento das flutuações térmicas em função do vetor de onda em geometrias adequadas, foi possível extrair as difusividades associadas às deformações tipo "twist", "splay" e "bend" (torção, leque e flexão, respectivamente). A elevada razão encontrada entre a di-

fusividade de "bend" e as outras duas, é interpretada em termos da anisotropia entre as viscosidades devido ao "backflow" (escoamentos induzidos), segundo modelo elaborado em trabalho anterior [1], no qual medidas similares foram realizadas na fase nemática tipo-disco (N_d) desse mesmo sistema. Uma análise comparativa entre os resultados dos dois trabalhos tende a reforçar a tese que considera as fases N_d e N_c como estados de ordenamento distintos de objetos invariantes (micelas de forma ortorrômbica).

[1] M.B. Lacerda Santos, Y. Galerne and G. Durand, J. Physique 46 (1985) 933.

PROCESSOS DE ORIENTAÇÃO DE UM CRISTAL LÍQUIDO LIOTRÓPICO EM CAMPO MAGNÉTICO

TURCHIELLO, R. DE F.; OLIVEIRA, E. A. DE
Instituto de Física - USP

Estudamos o processo de orientação induzido por um campo magnético em um cristal líquido liotrópico composto por laurato de potássio (LK), cloreto de decilamônia (DaCl) e água. Essa mistura é particularmente interessante pois apresenta maior estabilidade química que as misturas contendo álcool e apresenta fases nemáticas uniaxial e biaxial[1].

As temperaturas de transição entre as fases nemática calamítica N_C e nemática biaxial (N_{BX}) foi determinada a partir das medidas de birrefringência em função da temperatura. Os experimentos para estudo dos processos de orientação são realizados na fase N_C , a partir de medidas da transmitância da amostra entre dois polarizadores cruzados quando o campo magnético é aplicado, introduzindo uma deformação tipo twist. A transmitância da amostra é calculada a partir do modelo proposto para ancoramento de cristais líquidos liotrópicos[2] e o tempo de orientação das camadas superficiais τ_s permite o ajuste das curvas teóricas às curvas experimentais. Observamos que o tempo de orientação para essas amostras é cerca de 30% maior que o observado para amostra contendo álcool, que é atribuído as diferentes propriedades físico-química dessas misturas.

[1] E.A. Oliveira, L. Liebert and A.M. Figueiredo Neto, Liq. Cryst. 5, 1669 (1989).

[2] E.A. Oliveira, A.M. Figueiredo Neto and G. Durand, Phys. Rev. A 44, R825 (1991).

SÍNTESE E PURIFICAÇÃO DE DECILSULFANATO DE SÓDIO E EXPLORAÇÃO DE SEU DIAGRAMA DE FASES EM SISTEMAS LIOTRÓPICOS.

BARBOSA, A. A.; PINTO, A. V. DE A.
Grupo de Cristais Líquidos da UFSC

O uso de decilsulfato de sódio (SDS) em sistemas liotrópicos tem muito de tradiç ao e pouco de prati-

cidade. Um inconveniente notório no uso deste anfílico é sua relativa instabilidade térmica. Sistemas liotrópicos à base de SDS, mantidos em temperaturas relativamente altas ($T > 80^\circ\text{C}$), por intervalos de tempo relativamente curtos tendem a degradarem-se devido à hidrólise do anfílico. Tendo em conta irreversibilidade da reação no sistema, isso acarreta dificuldades operacionais de monta. Tentando preservar as características desejáveis do sistema à de SDS, mas sem as dificuldades impostas por sua hidrólise, decidimos sintetisar o decilsulfonato de sódio (DSnatoNa), cuja forma molecular é semelhante à do SDS, mas cuja estabilidade à hidrólise lhe é muito superior. Os diagramas de fases para os sistemas liotrópicos para os dois anfílicos ser ao apresentados e um cotejamento dos resultados ser ao objeto da discuss ao do presente.

MEDIDA DA POLARIZAÇÃO ESPONTÂNEA DE CRISTAIS LÍQUIDOS FERROELÉTRICOS.

MARTINS, O. G.; FIGUEIREDO NETO, A. M.
Instituto de Física da USP

A polarização elétrica espontânea é o parâmetro de caracterização do cristal líquido ferroelétrico, CLF. O método usual de sua medida consiste na verificação da resposta da amostra de CLF, colocada como dielétrico de um capacitor, a um campo elétrico variável. A medida seria trivial se não ocorressem simultaneamente outros processos induzidos de polarização elétrica. O presente trabalho reproduz os métodos de Diamant^a e de Martinot-Lagarde^b. O método de Diamant separa a polarização induzida da polarização espontânea pela saturação da densidade superficial de carga. A curva da carga elétrica pelo campo aplicado deve apresentar uma figura de histerese enquanto um circuito capacitivo em ponte é ajustado para fazer as compensações necessárias. O método de Martinot-Lagarde mede a variação da carga do capacitor no tempo, após inversão de polaridade. A rotação das moléculas com momento dipolar permanente é um processo mais lento do que os demais processos de polarização induzida. A integral da corrente em atraso corresponde a polarização espontânea. Com a implementação de ambos os métodos pretende-se medir polarização elétrica de CLF na faixa de $0.5a200nC/cm^2$. Inicialmente serão utilizadas amostras de DOBAMBC.

^aH. Diamant,....,Rev. Sci. Instr. 28,30(1957).

^bPh. Martinot-Lagarde, J. Physique(Lett.) 38:L-17, (1977)

ESTUDO SOBRE A EXISTÊNCIA DE FASES NEMÁTICAS EM MISTURAS LIOTRÓPICAS DO TIPO REVERSO.

MAGALHÃES, M.; FIGUEIREDO NETO, A. M.
IFUSP

Estudamos a mistura liotrópica de H_2O -DeOH-AOT (bis (2-etil exil) sulfaccionato) em várias concentrações relativas destes três componentes. Observamos diversas fases de cristais líquidos no microscópio óptico de luz polarizada, com a amostra colocada em "microslides" de 200 μm de espessura, submetidos a campos magnéticos. As amostras foram dopadas com ferrofluido de base orgânica. Inicialmente, foi feita uma amostra com concentração relativa [49.38% molar, 27.41, 23.22] que apresentou uma textura típica de fase hexagonal à temperatura $T = 25^\circ\text{C}$. Alterando-se a concentração relativa [65.52, 21.36, 13.13], observamos uma co-existência de fase isotrópica e hexagonal à temperatura ambiente. A textura típica da fase hexagonal era formada por "battonets". Observamos, para temperaturas acima de $T=40^\circ\text{C}$, uma fase isotrópica. Inversamente, abaixando-se a temperatura até $T=15^\circ\text{C}$, observamos a manutenção da fase hexagonal. A difração de raios-X em geometria de Laue com essa amostra à temperatura de 11.6°C e 23°C apresentou um arranjo hexagonal com parâmetro de rede $a = 32\text{\AA}$. Posteriormente, na concentração [75.76, 14.82, 9.42], verificamos a diminuição significativa de "battonets" à temperatura $T = 25^\circ\text{C}$, co-existindo a fase hexagonal e isotrópica, sendo esta última, pouco expressiva. Abaixando-se a temperatura até 15°C , a amostra torna-se mais birrefringente, desaparecendo por completo os "battonets". À concentração [30.60, 65.49, 3.91] não foram observados os "battonets". A textura é composta, principalmente, por regiões orientadas por campo magnético, ainda típica da fase hexagonal.

ESTUDO DA INTERAÇÃO DE FERROFLUIDOS DE BAIXA ANISOMETRIA COM CRISTAIS LÍQUIDOS.

MATUO, C. Y.; FIGUEIREDO NETO, A. M.

Instituto de Física da USP

TOURINHO, F. A.

Depto Química - Inst. Ciências Exatas - UnB

Cristais líquidos liotrópicos nemáticos (mistura de laurato de potássio, decanol e água) dopados com ferrofluidos iônicos de CoFe_2O_4 com grãos magnéticos de diferentes tamanhos (7,9 nm; 8,8 nm; 13,8 nm; 13,9 nm e 15,6 nm) são estudados por meio de técnicas ópticas. É determinada a concentração mínima (C_m) de grãos necessária para orientar cristais líquidos. Estudamos a teoria de Brochard e de Gennes para suspensões magnéticas, para podermos incluir grãos elipsoidais de pequena anisometria ($y = a/b \sim 2$, onde a e b são respectivamente os semi-eixos maior e menor de um elipsóide). Obtivemos um intervalo de concentrações que engloba todos os tipos de ferrofluidos iônicos utilizados (em $\text{grãos}/\text{cm}^3$):

$$2,1 \times 10^8 < C_m < 5,8 \times 10^8$$

É realizado também um estudo da birrefringência magnética em função do campo aplicado dos ferrofluidos, a fim de estimar o tamanho das partículas em função da sua concentração na solução. Foi verificado que a anisometria das partículas aumenta, com a diminuição da concentração.

Apoio financeiro: CNPq

ESTUDO DO DIAGRAMA DE FASES DA MISTURA LAURATO DE POTÁSSIO/CLORETO DE DECIL AMÔNIO/ÁGUA/SULFATO DE BRUCINA HEPTAHIDRATADO.

PEREIRA, R. A. R.; FIGUEIREDO NETO, A. M.

IFUSP

A influência da concentração de moléculas quirais em uma matriz nemática é aqui investigada, e para tanto, mantém-se a anisotropia de forma das micelas. A técnica utilizada é a microscopia óptica de luz polarizada. A mistura estudada é composta de laurato de potássio (LK), cloreto de decil amônio (DaCl), água (H_2O) e para colesterizar a amostra utilizamos o agente quiral sulfato de brucina heptahidratado (BS). Foram fixas as concentrações molares relativas entre $\text{DaCl}:\text{KL}:\text{H}_2\text{O}$; a amostra foi então submetida a sucessivas dopagens com sulfato de brucina. A concentração molar da molécula quiral é dada por:

$$Ma = \frac{(BS)}{(BS) + (KL) + (\text{DaCl})}$$

Variando-se a temperatura da amostra pode-se observar uma transição de fase, se existir, e registrar a temperatura desta transição. Obtivemos que em torno da concentração $Ma = 3,5 \cdot 10^{-3}$ (e para uma concentração em massa dos componentes LK, DaCl e H_2O os respectivos valores percentuais: 33,70, 5,68 e 60,62) uma transição da fase colesterica discótica para a fase colesterica biaxial, que ocorre aproximadamente em 35°C . O passo do arranjo helicoidal é da ordem de 100 μm . O estudo visa encontrar regiões não exploradas do diagrama de fases onde possa ser efetuada a medida do parâmetro de ordem biaxial nas vizinhanças de T_c .

Apoio financeiro: CNPq/RHAE

Caracterização da ancoragem em mostradores de cristal líquido nemático torcido produzidos no IM/CTI

AMARAL, A. C. C. DO; MAMMANA, A. P.

Laboratório de Mostradores de Informação/IM/CTI

AUER, M.; LESSKE, H. M.

Fachhochschule Muenchen

VARGAS, H.

IFGW/UNICAMP

O LMI/IM/CTI vem estudando os processos básicos de obtenção de mostradores de cristal líquido nemático torcido, buscando estabelecer seu controle numa linha piloto de fabricação de dispositivos para aplicações especiais. Dois processos críticos são a deposição e o tratamento da camada polimérica para o alinhamento e a ancoragem molecular (tilt angle) do cristal, os quais influem no contraste, tempo de resposta e capacidade de multiplexagem dos mostradores. Para controlar precisamente o "tilt angle" de mostradores fabricados com camadas de PVA depositadas por microcentrifugação (spinning) e tratadas por esfregamento manual com fibras orgânicas, o LMI se propôs a estabelecer técnicas de medida a serem utilizadas em sua linha piloto. Foi investigada a técnica da determinação da transmissão óptica em função do ângulo de incidência da luz, para diferentes comprimentos de onda, a partir da qual pode-se calcular o ângulo de ancoragem, desde que se conheçam os índices de refração do cristal, o ângulo de torção molecular e a espessura das células. Para realizá-la desenvolveu-se um sistema goniométrico controlado por um microcomputador PC-XT, com precisão de $\pm 0,7$ grau. Outra técnica foi a da determinação da orientação da amostra num campo magnético forte (11 kGauss) na qual a transmissão óptica é independente do campo, este ângulo sendo idêntico ao "tilt angle". Para efetuar estas medidas desenvolveu-se um suporte goniométrico para o posicionamento e iluminação da amostra no campo com laser He-Ne de 4 mW. Medidas efetuadas em diversas séries de mostradores com cristal Meck E7 levaram a ângulos de ancoragem entre 1 e 3 graus, com desvios avaliados de $\pm 0,7$. O método óptico mostrou-se mais simples devendo, por isso, ser utilizado rotineiramente na avaliação e acompanhamento dos processos de fabricação do LMI. Os resultados obtidos indicam estar controlado e repetitivo o processo de deposição e tratamento do PVA desenvolvido no LMI, permitindo obter ângulos de ancoragem adequados para a operação multiplexada.

SÍNTESE DE CRISTAL LÍQUIDO FERROELÉTRICO

SANTOS, R. T. DOS; FIGUEIREDO NETO, A. M.
INSTITUTO DE FÍSICA - USP

Sistemas líquido cristalinos exibindo atividade óptica são conhecidos de longa data, somente a partir do meio da década de 70, estabeleceu-se que algumas mesofases esméticas exibindo atividade óptica também apresentam ferroeletricidade. O estado mesomórfico é formado de modo geral por "objetos" com forte anisotropia de forma-objetos estes que podem ser moléculas ou micelas dependendo do sistema líquido cristalino ser termotrópico ou liotrópico. Particularmente no caso de cristais líquidos ferroelétricos na fase

esmética as moléculas quirálicas apresentam-se inclinadas dentro de camadas estratificadas, o que caracteriza a ferroeletricidade. Um desses ferroelétricos é p-decilo-xibenzilideno, p-amino 2 metil butilcinamato. A síntese dessa molécula compõe-se de:

Etapa 1

- preparação e purificação do cloreto de p-nitrocinaoila

Etapa 2

- preparação e purificação do p-nitrocinaoato

Etapa 3

- preparação e purificação do p-aminocinaoato

Etapa 4

- preparação e purificação do p-decilo-xibenzilideno, p-amino 2 metil butilcinamato

Medidas de Birrefringências : estática e dinâmica em ferrofluidos à base de $CoFe_2O_4$ e γFe_3O_4

SILVA, M. DE F. DA; FIGUEIREDO NETO, A. M.

Instituto de Física Universidade de São Paulo

PERZYNSKI, J. B.

Laboratoire d'acoustique et optique de la matière condensée
- Université Pierre et Marie Curie - Paris - France

Efetuamos medidas de birrefringências estática e dinâmica [1] em ferrofluidos à base de $CoFe_2O_4$ citrato e γFe_3O_4 citrato [2], os líquidos portadores eram água e glicerol, as soluções foram diluídas ($\phi \approx 10^{-4}$) para evitar a interdição magnética entre os grãos e também para que houvesse transmissão de luz suficiente. As medidas das birrefringências foram feitas usando um arranjo experimental só com analisador e polarizador, e outro usando um modulador óptico para detectar pequenos sinais. Para efetuarmos as medidas de birrefringência dinâmica, o arranjo era montado de acordo com o tempo de relaxação a ser medido. Trabalhamos com tempos pequenos ($0,5 \mu s$, ζ e 1 ms) e com tempos longos (ζ $\geq 100 \mu s$), utilizamos campo magnético constante e campo magnético alternado. A relaxação da birrefringência dinâmica é muito sensível à grandes partículas na solução. Verificamos também que a espessura do capilar não influencia na medida do tempo de relaxação. Através das medidas de birrefringência estática podemos obter o diâmetro magnético das partículas do ferrofluido. Efetuamos medidas do tempo característico para ambas amostras estudadas. [1] J.C. Bacri, R. Perzynski - nag. Fluids apl. Handbook Unesco - 1-35- [2] Massart, R., Patents: France 7918842,9006484, Germany P3207012.3, Japan 98.202180, USA 4329241

CIÊNCIA DOS MATERIAIS

Workshop: Técnicas de Caracterização de Materiais I (MAT, CCP)

– 19/05/93

Técnicas de Microscopia Eletrônica na Caracterização de Materiais

MONTEIRO, W. A.

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares-Comissão Nacional de Energia Nuclear.

Durante as últimas três décadas foi desenvolvido um número excepcionalmente grande de técnicas de caracterização de materiais empregando elétrons que levaram a obtenção de informações da estrutura cristalográfica e também da análise elementar destes materiais.

Estas técnicas físicas envolvem bombardeamento da amostra com elétrons de maneira a: produzir uma determinada excitação dos elementos na amostra que pode ser detectada pela emissão de partículas ou de radiação eletromagnética; obter informação quantitativa da amostra por espalhamento ou absorção das partículas incidentes; determinar orientações cristalográficas dos materiais por meio de difração eletrônica bem como informações da estrutura dos defeitos presentes.

Tais técnicas empregam equipamentos que necessitam fonte de elétrons (filamento de tungstênio ou de hexaboreto de lantânio), alto vácuo, lentes eletrostática e eletromagnética. É produzido um feixe de elétrons que pode ser colimado, focalizado e também "varrido" na superfície da amostra. Nos instrumentos de "transmissão", o feixe eletrônico passa através da amostra e é analisada a modificação do feixe com a matéria (amostra).

O objetivo deste trabalho é apresentar as principais técnicas da Microscopia Eletrônica para caracterização de materiais bem como suas principais aplicações.

Espectroscopia Fototérmica aplicada na caracterização de materiais

SILVA, E. C. DA

Departamento de eletrônica quântica, Instituto de Física Gleb Watagin, UNICAMP

A Espectroscopia Fototérmica tem como base fundamental o calor gerado em um material devido a absorção de energia incidente modulada. As flutuações de temperatura e/ou pressão ocasionadas pela fonte de calor na amostra podem então ser detectadas por sensores térmicos ou acústicos. No caso mais usual, o da Fotoacústica, a fonte de energia é luminosa e o detector é um microfone.

As principais aplicações da técnica vem do fato de que o sinal fotoacústico depende das propriedades ópticas e térmicas da amostra. Uma primeira aplicação significativa é a espectroscopia de absorção óptica. Apresenta grande vantagem sobre as técnicas convencionais porque não exige preparação especial da amostra, como polimentos ou outros tratamentos de superfície, permitindo obter os espectros de absorção para amostras dos mais variados tipos: opacas, transparentes, rugosas, na forma de pó, etc.

Parâmetros térmicos dos materiais, em particular a difusividade térmica, são obtidos com geometrias experimentais simples e, além da importância em si da sua obtenção, permitem monitorar processos de evolução dos materiais, suas propriedades microestruturais, diferenças nos seus métodos de preparação, etc.

Devido a dependência do chamado comprimento de difusão térmica com a frequência de modulação, a técnica permite estudar um perfil de profundidade da amostra.

Recentemente desenvolvemos um método alternativo de estudar ressonâncias magnéticas utilizando-se detecção fotoacústica, com vantagem para os casos de sistemas fortemente magnetizados. No presente estamos utilizando a detecção fototermicamente modulada de ressonâncias a qual permite resolução espacial para o caso de amostras que apresentem uma distribuição espacial das propriedades magnéticas, como por exemplo, fitas magnéticas de gravação.

Exemplos de aplicações das técnicas fototérmicas são apresentados para diversos tipos de materiais : vidros, cerâmicas, materiais catalíticos zeolíticos, materiais magnéticos, semicondutores, polímeros, metais e materiais biológicos.

THERMOLUMINESCENCE AND ITS APPLICATIONS IN THE STUDY OF CONDENSED MATTER

SUNTA, C. M.

Laboratório de Dosimetria, Instituto de Física, USP on leave from Atomic Energy Regulatory Board, Bombay, India.

Thermoluminescence (TL) is the thermally stimulated emission of light after a solid insulating sample is subjected to ionizing radiations or other forms of excitation such as optical or even to mechanical pressure. TL emission is observed in the form of glow peaks. The number of glow peaks emitted from a given sample represent the number of defect centre types. The phenomenon of TL provides a unique tool for the study of a large area of low concentration defect centres. The technique can be used at 7 to 10 orders of magnitude lower defect concentrations in comparison to optical absorption. The photonically induced re-distribution of charge carriers in a sample pre-irradiated by ionizing radiations provides a very sensitive way to correlate certain glow peaks with the colour centre type defects. One can for example observe F-F' and M-M' conversions by tunneling effect. There are a variety of other radiation effects in solids which too are related to lattice defects. These include electrical conductivity and exo-electron emission. The correlative studies of these different thermally stimulated phenomena provide important information about the defect centre structures. This paper gives a critical overview of the subject including the aspects which remain to be further investigated.

Workshop: Técnicas de Caracterização de Materiais II (MAT, CCP)
 - 19/05/93

Hyperfine Interactions and Angular Distribution of Nuclear γ -rays: Applications in Solid States Physics.

SAXENA, R. N.

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

Until recently, the whole subject of angular distribution or correlation of γ -rays was from the experimental point of view mainly of interest to nuclear physicists, where it provided a valuable tool for the determination of some important properties of nuclear states such as spin, magnetic moment, and quadrupole moment under special circumstances. However it is realized that the study of the perturbation of the angular correlation is of great interest in its own right and provides important method for measuring hyperfine interactions in solids and liquids.

Both methods, perturbed angular correlation (PAC) utilizing radioactive probe and perturbed angular distribution (PAD) following nuclear reactions measure hyperfine interaction parameters and allow to study the electronic (charge) and magnetic (spin) structure of materials. Like Nuclear Magnetic Resonance (NMR) and Mossbauer Spectroscopy (MS) they yield insight into materials of interest and the electromagnetic fields therein on a rather local and microscopic scale. As nuclear techniques both, PAC and PAD take the advantage of high sensitivity in detecting nuclear radiation allowing investigations with negligible probe atom concentrations e.g. extremely dilute alloys.

The techniques have been used extensively to study the origin of electric and magnetic hyperfine fields at dilute impurities in (metallic) hosts. They have also been used to study a variety of other phenomena such as radiation damage, point defects in metals and semiconductors and more recently high temperature superconductors and related oxides.

A brief introduction to the underlying principles and experimental techniques in PAC and PAD will be outlined. Some special features of PAD studies following the heavy reactions will be described. A brief discussion of the parameters which can be extracted from the experiment will be presented. Some examples will illustrate the recent developments in the field of magnetism including measurements of hyperfine fields at impurities in 3d and rare-earth ferromagnetic hosts and other magnetic systems like Heusler alloys. Role of impurity valence on the electric field gradients (EFG) in non-cubic metallic systems will also be discussed. Some examples of the study of point defects in metals and alloys using perturbed γ - γ angular correlation will be presented.

A Difractometria de nêutrons no estudo de materiais

PARENTE, C. B. R.

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

Tradicionalmente, a difratometria de nêutrons tem sido utilizada no estudo do estado cristalino da matéria como técnica complementar à difratometria de raios-X. Devido à natureza diferente da interação do nêutron com a matéria, contrariamente ao que ocorre com raios-X, a radiação neutrônica é pouco absorvida pela maioria dos elementos, a intensidade da radiação espalhada em forma coerente não mostra qualquer dependência do número atômico do átomo espalhador e não existe um fator de forma diminuindo essa intensidade conforme aumenta o ângulo de espalhamento. Adicionalmente, o nêutron interage com núcleos que possuem momento magnético, produzindo o espalhamento coerente magnético. É a baixa absorção dos nêutrons que permite, por exemplo, a determinação da textura cristalina global de uma amostra. Com raios-X, a textura observada limita-se à superfície da amostra, a não ser que uma técnica sofisticada seja empregada. Por outro lado, a determinação de estruturas cristalinas contendo átomos leves na companhia de átomos pesados, ou átomos pesados vizinhos na tabela periódica, é, em geral, mais precisa quando empregada a difratometria de nêutrons. A determinação de estruturas magnéticas é uma exclusividade desta técnica. Na última década, com a construção de fontes de nêutrons mais intensas e o desenvolvimento de detectores de posição, surgiram novas técnicas exclusivas da difratometria de nêutrons. Entre elas destacam-se a análise estrutural feita com difratometria por tempo de voo e a análise não-destrutiva das tensões residuais internas em soldas e componentes estruturais.

O difratômetro de nêutrons do IPEN-CNEN/SP, instalado junto ao reator de pesquisas IEA-R1, de 2MW de potência térmica, é um instrumento de múltiplos propósitos, automatizado por microcomputador, podendo ser utilizado em muitas das técnicas correntes de análise de materiais. Atualmente, o grupo de difratometria de nêutrons desse instituto, responsável pela operação do difratômetro, vem realizando estudos de texturas, de orientação magnética de ferrofluidos sob a ação de um campo magnético, da qualidade cristalina de monocristais através da observação da mosaicidade, de determinação de fases em sistemas multifásicos e de desenvolvimento da difração múltipla como método de análise de estruturas cristalinas e magnéticas. Alguns desses estudos são feitos em colaboração com outros grupos de pesquisa, da própria instituição ou de outras instituições.

Efeitos de Impurezas e Defeitos em Materiais e Superfícies (MAT) - 19/05/93

EFEITO DE ELEMENTOS INTERSTICIAIS NAS MEDIDAS DE ATRITO INTERNO EM Nb E Nb-Ti.

FLORÊNCIO, O.; MANCINI, M. W.; QUEIROZ, J. R. O.; TEJIMA, H.; JORDÃO, J. A. R.; BOTTA FILHO, W. J.; SILVA, J. R. G.

Universidade Federal de São Carlos

GRANDINI, C. R.; FERNANDES, R. M.

Universidade Estadual Paulista

FRANCISCO, R. H. P.; RODRIGUES, A. M. G. D.
Universidade de São Paulo

Medidas de atrito interno em função da temperatura (na faixa de 290 K a 700 K) estão sendo realizadas, num pêndulo de torção; em amostras de Nb e Nb-Ti com diferentes graus de pureza. Os resultados encontrados neste trabalho para o Nb sem o elemento substitucional Ti, são comparados com aqueles obtidos para a liga, pretendendo-se desta maneira levantar dados sobre a interação dos elementos intersticiais O e N com o

Nb puro e com a liga Nb-Ti. Os espectros de múltiplas relaxações anelásticas obtidos para estas amostras são decompostos em picos elementares devido à interação metal-intersticial. Simultaneamente são obtidos padrões de difração de Raios-X para informações sobre as estruturas cristalinas destes metais e as consequentes variações nos parâmetros da rede devido à presença dos elementos intersticiais e substitucionais, podendo ser detectadas mudanças devido a formação de novas fases. Apoio CNPq, CAPES, FINEP, FTI-CEMAR.

Estudo da interação quadrupolar elétrica na liga $ZrCr_2$: influência da absorção de hidrogênio.

MESTNIK FILHO, J.; CARBONARI, A. W.; PENDL JÚNIOR, W.; MOURA, J. I. DE; SAXENA, R. N.

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

A liga $ZrCr_2$ faz parte de uma família de fases de Laves que apresentam peculiaridades interessantes no processo de absorção/liberação do gás hidrogênio como a presença de histereses e patamares inclinados nos diagramas de pressão, composição e temperatura. Estes fenômenos ainda não compreendidos do ponto de

vista microscópico devem estar associados à competição entre as várias energias envolvidas no processo de absorção de hidrogênio, tais como a energia de ligação metal-hidrogênio num sítio particular ocupado pelo hidrogênio, a energia devida à deformação elástica local da rede cristalina e a energia associada aos elétrons provenientes dos átomos de hidrogênio que são incorporados ao sistema eletrônico da liga metálica hospedeira. O estudo dos aspectos microscópicos da interação do átomo de hidrogênio com a rede cristalina dessas ligas é portanto de interesse, uma vez que pode fornecer subsídios para a compreensão dos vários fenômenos termodinâmicos observados.

Neste trabalho utiliza-se a técnica de correlação angular gama-gama perturbada com o objetivo de inferir sobre a distribuição das cargas eletrônicas ao redor do núcleo de prova. Com a medida da correlação angular perturbada determina-se o gradiente de campo elétrico (GCE) sentido pelo núcleo de ^{181}Ta , formado pelo decaimento β^- do ^{181}Hf inserido como impureza na matriz de ZrCr_2 , ocupando alguns sítios do Zr. Da diferença entre os valores dos parâmetros do GCE para a liga com e sem hidrogênio, procura-se determinar a preferência de ocupação do hidrogênio nos vários sítios existentes bem como a configuração dos átomos de hidrogênio ao redor do núcleo de prova. Resultados preliminares parecem indicar a preferência do hidrogênio em formar configurações que resultem em baixos valores do GCE mesmo em baixas concentrações de hidrogênio, o que equivale a pressupor que mesmo nestas condições vários átomos de hidrogênio distribuem-se simetricamente ao redor do núcleo de prova.

ANÁLISE DE ESPECTROS DE FREQUÊNCIA COMO FUNÇÃO DA TEMPERATURA

FERNANDES, R. M.; GRANDINI, C. R.; SHUKLA, M. M.

UNESP - BAURU

Na maior parte dos trabalhos envolvendo o estudo de relaxações anelásticas devido à reorientação induzida por tensão de átomos de impurezas intersticiais em torno de átomos da matriz metálica, seus autores apresentaram os resultados em termos de espectros de atrito interno como função da temperatura. Alguns autores mostram os espectros do quadrado da frequência como função da temperatura, sem mencionar qualquer análise ou comentário a respeito da curva. Este trabalho propõe uma relação entre o quadrado da frequência e a temperatura, para processos de relaxação que envolvem a reorientação induzida por tensão de defeitos pontuais em sólidos. Esta relação é comprovada através do "fitting" de espectros do quadrado da frequência como função da temperatura para amostras de nióbio e tântalo contendo baixas concentrações de intersticiais pesados como oxigênio e nitrogênio. (Apoio: CNPq,

Capes e FUNDUNESP).

ELECTROLYTICAL DIFFUSION OF F CENTERS IN KCl CRYSTALS

SILVA, L. F. D.

Laboratorio de Optica de Sólidos, Departamento de Física, Universidad Técnica Federico Santa María

At room temperature alkali halides are dielectric solids, whereas, at high temperatures they present electrolytic conductivity. As the current flows through the crystal, a simultaneous coloring of it takes place. If the sample polarity is reversed, then the crystal is bleached. *KCl* crystals have been electrolytically colored. Optical density hysteresis was observed during bleaching. In addition, when simultaneous measuring of current and optical transmission is made, an almost simultaneous coloring is detected within the first zone of current. An activation energy of 0.62 eV was obtained between 778 K and 850 K, corroborating earlier literature data [1,2], but at temperatures lower than 778 K, is observed the presence of another diffusion process. In this range the estimated activation energy corresponds to 1,3 eV.

1. A. K. Maiti & K. Goswami, *Solid State Commun.* 48, 517 (1983).

2. Luis F. Da Silva, *Solid State Commun.* 84, 991 (1992).

ESTUDO DA MOBILIDADE IÔNICA NO QUARTZO NATURAL USANDO A TÉCNICA DE ELETRODIFUSÃO

YUKIMITU, K.

FACULDADE DE ENGENHARIA DE ILHA SOLTEIRA UNESP

WATANABE, S.

LABORATÓRIO DE DOSIMETRIA, DEPARTAMENTO DE FÍSICA NUCLEAR, IFUSP

Dentre a larga utilização do quartzo, talvez a mais importante seja a sua aplicação na indústria eletrônica. A sua propriedade piezoelétrica torna-o, ainda hoje, imprescindível na fabricação de osciladores utilizados pela indústria de telecomunicações. Cite-se, ainda, a sua forma artificial vítrea que possui especiais propriedades elétricas, mecânicas e ópticas. A estrutura cristalina do quartzo apresenta, na direção do seu eixo de simetria (eixo óptico c), canais abertos onde as impurezas podem ser acomodadas. Estas impurezas (íons alcalinos principalmente) influem nas propriedades solicitadas do quartzo. Uma técnica utilizada para retirar e introduzir íons do canal é a eletrólise. Esta técnica resume-se na aplicação de um campo elétrico na direção do canal e aquecimento simultâneo da amostra de quartzo. A impureza em forma de sal que se quer difundir é previamente depositada na face em contato com o eletrodo positivo. Desta forma é possível a troca de íons no material. Desenvolvemos um equipamento de eletrólise,

com possibilidade de medida da corrente elétrica durante o ciclo de eletrodifusão. A câmara de aquecimento permite atingir temperaturas de até 700°C. As curvas de corrente elétrica, durante o estágio de aquecimento de amostras de quartzo, apresentam um máximo na região de 300°C. No estágio onde a temperatura é mantida constante, a corrente diminui até atingir também um valor constante, quando então considera-se que a troca iônica foi completa. A presença do máximo de corrente, em torno de 300°C, foi interpretado como originário de uma polarização do centro de armadilhas de íons de metais alcalinos. A atuação de impurezas substitucionais ao Si serão discutidos como possíveis centros desses máximos. A eficiência da eletrodifusão será discutida também com base em dados obtidos por absorção no infravermelho e luminescência termicamente estimulada (TL) de amostras naturais de quartzo submetido à troca iônica.

Monolithic Gels of Mullite Composition by Sol-Gel Process

DONATTI, D. A.; VOLLET, D. R.

Departamento de Física, IGCE - UNESP, Rio Claro

Mullite gels of the composition $3Al_2O_3 \cdot 2SiO_2$, were prepared by mixing an alcoholic solution of hydrolyzed TEOS and a clear boehmite colloidal sol. The latter was obtained from aluminum sulfate precipitation and subsequently peptization by HNO_3 . The mixtures were held at 30°C for gelification and aging. The humid gels are monolithic and transparent. The drying causes volumetric shrinkage and gradual loss of optical transparency. The opacity is caused by the presence of interlinked empty pores, because the original optical transparency is recovered by water reabsorption. The X-ray diffraction of the xerogels shows that the silica is amorphous and the boehmite holds its original microcrystallinity. The gradual heating of the material up to 1300°C yields a mullite piece which exhibits reduced optical transparency. The monolithicity is compromised by some cracking at the first stages of heating.

INTERAÇÃO DO HIDROGÊNIO COM A MATRIZ METÁLICA ATRAVÉS DE UM PROCESSO DE RELAXAÇÃO DE LONGO ALCANCE

GRANDINI, C. R.

UNESP - BAURU

FLORÊNCIO, O.; TEJIMA, H.; JORDÃO, J. A. R.

UFScar

A interação do hidrogênio com a matriz metálica através de um processo de relaxação de longo alcance, conhecido como Efeito Gorsky, é investigado por intermédio de medidas de atrito interno num sistema Nb-Ti-H, contendo 46% em peso de Ti. As medidas de atrito interno foram efetuadas em um pêndulo de

torção, com frequência de oscilação em torno de 4.0 Hz num intervalo de temperatura compreendido entre 80 e 700 K. O coeficiente de difusão, D, obedece a Lei de Arrhenius no intervalo de temperatura compreendido entre 300 e 700 K, com difusividade de $7.43 \times 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$ e energia de ativação de 0.102 eV. Para a região de baixa temperatura, há um desvio da Lei de Arrhenius, com difusividade de $0.37 \times 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$ e energia de ativação de 0.063 eV. Este desvio ocorre em razão do hidrogênio se difundir pela matriz metálica através de saltos entre sítios tetraedrais equivalentes e entre sítios octaedrais equivalentes. (Apoio: FAENQUIL-CEMAR, CNPq, Capes e FUNDUNESP).

Caracterização de Filmes Finos GeSeY Fotodopados com Prata

MASTELARO, V. R.

Depto. de Engenharia de Materiais - UFSCar

PEYTAVIN, S.; IBANEZ, A.

Lab. de Physico-Chimie des Matériaux Solides - Montpellier - França

DEXPERT, H.

Lab. pour l'Utilisation du Rayonnement Electromagnetique (LURE) Orsay - França

Os vidros calcogênicos obtidos sob a forma de filmes finos, e particularmente os vidros GeSeY (2 ; y ; 9) tem sido extensivamente estudados por apresentarem propriedades interessantes para a microlitografia. As principais vantagens destes vidros quando comparados as resinas poliméricas convencionais são uma melhor resistência mecânica e uma melhor resolução em litografia. Apresentamos neste trabalho resultados quanto ao perfil de fotodissolução da prata bem como estudos sobre a estrutura atômica dos filmes binários e fotodopados com prata utilizando a técnica de EXAFS. O perfil da fotodifusão do átomo de prata nos filmes finos binários GeSeY foi caracterizado através da técnica de RBS (Rutherford Backscattering Spectroscopy). Os resultados mostraram que nos filmes não saturados com prata existem várias camadas com diferentes espessuras e composições. A concentração de prata é mais importante na camada mais próxima a superfície. Os resultados de EXAFS mostraram que nos filmes finos binários GeSeY o átomo de germânio é coordenado por quatro átomos de selênio, os átomos de selênio são coordenados por dois átomos de germânio. Observou-se que nos filmes finos fotodopados com prata que o átomo de germânio também tem uma coordenação tetraédrica. Entretanto, a fotodissolução da prata no filme fino faz com que estes tetraédros sejam mais irregulares. Para estas mesmas amostras, os átomos de selênio apresentam uma coordenação mista formada por ligações Se-Ge e Se-Ag.

ESTUDO DA CINÉTICA DO ENVELHECIMENTO DO SOL DE CeO₂-TiO₂

MACÊDO, M. A. DE; DALL'ANTONIA, L. H.; ANDRÉ AEGERTER, M. A.

Instituto de Física e Química de São Carlos, USP

O sol de CeO₂-TiO₂ preparado a partir do (NH₄)₂Ce(NO₃)₆ e Ti(OPrⁱ)₄ em isopropanol foi estudado através das técnicas de absorção no ultra-violeta e titulação potenciométrica. Encontrou-se que o Ce⁴⁺ se reduz para Ce³⁺ com o envelhecimento do sol. Vários filmes de CeO₂ - TiO₂ com espessura de 40 nm foram feitos a partir do sol em função do tempo de envelhecimento e caracterizados por voltametria cíclica em carbonato de propileno e LiCPO₄ 0,1 M. A densidade de carga máxima inserida nos filmes (~ 4mc/cm²) foi encontrada quando o sol tinha uma quantidade maior de Ce³⁺ do que Ce⁴⁺ (35 mM).

ESTUDO DE ESPECTROS FOTOACÚSTICOS DE METAIS DE TRANSIÇÃO ANCORADOS EM SUPERFÍCIES MODIFICADAS DE SILÍCIO

NAKAMURA, O.

Instituto de Física da UFBA

ALCÂNTARA, E. F. C.

Instituto de Química e Geociências da UFG

AIROLDI, C.

Instituto de Química UNICAMP

VARGAS, H.

Instituto de Física UNICAMP

Modificações de superfícies de sílica-gel foram efetuadas de modo a permitir o ancoramento de silanos orgânico funcional. As funções orgânicas a elas anexadas foram de dois tipos: N2-piridil-acetamida (NPAC) e a diacetamida (DAC). À superfície assim funcionalizada, são agregados metais de transição, tais como o Cu²⁺, Ni²⁺ e o Co²⁺. O complexo formado na superfície foi estudado usando-se a Espectroscopia Fotoacústica, tanto na faixa do UV-Visível quanto no IV próximo. A análise dos espectros foi baseada na Teoria do Campo Ligante e permitiu as atribuições das transições óticas associadas aos picos de absorção, assim como a coordenação daqueles íons na estrutura do complexo.

OXIDAÇÃO DE LIGAS NbTi

TEIXEIRA, S. R.

UNESP - FCT - Pres.- PRUDENTE

Está sendo aplicada a técnica de difração de raios-x, em alta temperatura, para estudar "in situ" a reação de ligas de NbTi (50%, 20% e 1,6% em peso de Ti) com o ar, sob baixa pressão (aproximadamente 53 mTorr) na faixa de temperatura de 650 a 850 C. O objetivo do trabalho é estudar a formação de camadas de óxidos (e/ou

nitretos) na superfície das amostras (placas laminadas, polidas e recozidas), identificar as fases formadas, estudar a cinética de crescimento e a morfologia dessas fases. Além da difratometria de raios-x serão utilizadas, também, as técnicas de microscopia óptica e eletrônica de varredura. Os testes preliminares, a 650 C e 4,5 hs de reação, apresentam os picos (hkl) da matriz e alguns picos com intensidade relativa maior que 10%, os quais não puderam ser identificados através das fichas existentes, de nitretos e óxidos de Nb e/ou Ti.

Estudo Mossbauer de Rhodochrosite.

JÚNIOR, P. A. DE; GARG, V. K.

UFES

FABRÍS, J. D.

EMBRAPA, Centro Nacional de Pesquisa do Milho, Sogro, Sete Lagoas, MG.

O mineral Rhodochrosite vindo de depósitos de manganês de Conselheiro Lafaiete (20°36' S 45°46' W), MG, Brasil, tem sido caracterizado por análise química, raios-X e Electron Probe Micro Analysis. O mineral apresenta ferro (2.4 %), Mn (33.8 %), SiO₂ (18.0 %), Al₂O₃ (4.35 %), MgO (3.0 %) e P₂O₅ (0.1 %). O espectro Mossbauer da amostra peneirada mostrou dois dubletos parcialmente resolvidos. Os parâmetros ajustados são:

Temp.(K)	I.S. (Fe) (mm/s)	Q.S. (mm/s)	Γ mm/s	Absorção
RT	1.45	2.87	0.236	22.32
	0.15	0.55	0.290	77.68
15 K	1.07	2.81	0.217	20.58
	0.51	0.55	0.291	79.42

Os parâmetros indicam a presença de dois sítios de Fe²⁺, um de alto spin e outro de baixo spin. Ambos os dubletos mostraram considerável dependência de temperatura de deslocamento isomérico (I.S.= 1.07 e 0.51 mm/s respectivamente a 15 K) e independência de temperatura de desdobramento quadrupolar. O mineral Rhodochrosite é usado como matéria-prima para obtenção de Mn por eletrólise pelo Grupo Ferro e Ligas, proprietário da mina. O espectro Mossbauer deste produto mostrou ausência de qualquer ressonância. Os dados estão sendo analisados.

OS MODELOS DE LORENTZ E DE MAXWELL-GARNETT APLICADOS À MATERIAIS COMPOSTOS DIELETRICO-METAL TIPO ELÉTRON LIVRE

PEDROSO, C. B.; SANTOS, M. B. F.

IFGW-UNICAMP

Calcula-se a função dielétrica de materiais compostos, na região de energia de 1.5 a 5.5 eV, para uma matriz dielétrica ($\epsilon_h = 1, 2.99$ ou 6) na qual estão dispersas partículas metálicas do tipo elétron livre (Ag ou Cu) através da teoria de Maxwell-Garnett. Essa teoria considera partículas esféricas em baixa concentração e sem interação mútua. As funções dielétricas obtidas apresentam uma região anômala quando as transições interbandas das partículas metálicas estão distantes da frequência de ressonância dos materiais compostos ($2\epsilon_h \simeq -Re(\epsilon_m)$). Para estes casos, onde o material composto apresenta uma região anômala, usa-se o modelo de osciladores de Lorentz para analisar e interpretar o comportamento óptico do material composto. Para cada material composto os parâmetros de Lorentz são calculados e discutidos.

Apoio : CNPq

BIESTABILIDADE ÓTICA DISPERSIVA E ABSORSIVA EM VIDROS DOPADOS COM MICROCRISTAIS DE CdSe

SOMBRA, A. S. B.

LABORATORIO DE ÓTICA NÃO LINEAR E LASERS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA UNIVERSIDADE
FEDERAL DO CEARÁ

Neste trabalho estudamos o fenômeno de biestabilidade ótica em vidros dopados com semicondutores. Estes vidros são bastante atrativos para a fabricação de dispositivos não lineares totalmente óticos devido a sua alta não-linearidade. O alto valor da não-linearidade é atribuído a geração de plasma elétron-buraco. Efeitos locais associados ao confinamento dielétrico dos microcristalitos são responsáveis pelos altos valores da não-linearidade. A presença do alto valor da não-linearidade e o feedback leva ao aparecimento da biestabilidade (OB). A vantagem da biestabilidade induzida por absorção e que ela não requer a presença do ressonador ótico Fabry-Perot ou elemento para phase-matching. A ausência de ressonadores adicionais simplifica os dispositivos baseados em biestabilidade e suas aplicações em complicados sistemas de processamento ótico. Recentemente foram reportados resultados aonde biestabilidade ótica absorpsiva e dispersiva foram observadas nestes materiais (1,2,3,4). Partindo de um Fabry-Perot não-linear absorpsivo realizamos simulações numéricas que explicam o chaveamento não linear observado, bem como a presença simultânea dos dois processos biestáveis nestes vidros. Neste trabalho apresentamos a ocorrência de biestabilidade ótica e chaveamento não linear devido a absorção crescente em semicondutor dopando vidro. Realizamos simulações numéricas que explicam os resultados observados em laboratório e os resultados de chaveamento ótico. 1) A.S.B.Sombra, Opt. and Quantum Elect. 22, 335 (1990) 2) A.S.B.Sombra e J.Mendes Filho, Proc. of the 5th Brazilian School on Semicond. Physics paper THU27, São Paulo (1991)

3) A.S.B.Sombra, Solid State Comm. 82, 805 (1992)
4) R.K.Jain e R.C. Lind, J. Opt. Soc. Am. B. 73, 647 (1983)
Trabalho financiado por CAPES, CNPq e FINEP

INFLUÊNCIA DO TRATAMENTO TÉRMICO E DA ESPESSURA NA INSERÇÃO DO Li^+ NO FILME $\text{CeO}_2 - \text{TiO}_2$

MACÊDO, M. A.; AEGERTER, M. A.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

Filmes de $\text{CeO}_2 - \text{TiO}_2$ obtidos via processo sol-gel são armazenados de íons H^+ ou Li^+ . A capacidade de armazenamento dos íons foi determinada em função da espessura e do tratamento térmico realizado na faixa de 350°C a 600°C por técnicas eletroquímicas. A densidade de carga máxima medida à velocidade de 50 mV/s é de 8 mC/cm² para o Li^+ em filmes com espessura de 200 nm. Medidas de tempo de vida e coeficiente de difusão do Li^+ no $\text{CeO}_2 - \text{TiO}_2$ serão apresentadas. Estes filmes são promissores para utilização como contra-eletrodo em dispositivos electrocrômicos e em baterias de filmes finos.

Preparação e Caracterização de Ligas e Metais Especiais (MAT) - 20/05/93

DEPOSIÇÃO DE FILMES FINOS PROTETORES DE $\text{TiO}_2 - \text{SiO}_2$ SOBRE O AÇO INOX 316L

PERATELLO, S. H.; SILVA, C. C.; ATIK, M.;
AEGERTER, M. A.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

Filmes densos e finos foram depositados em chapas de aço inoxidável do tipo 316L via sol-gel para protegê-las contra o ataque químico de H_2SO_4 diluído e aquecido. Os filmes foram preparados com os alcóxidos $\text{Ti}(\text{OC}_2\text{H}_5)_4$ e $\text{Si}(\text{OC}_2\text{H}_5)_4$, etanol absoluto, ácido acético em presença de ultrassom (20 kHz). Diferentes soluções foram apresentadas com composições $x\text{TiO}_2 - (100-x)\text{SiO}_2$, ($x=10-60\text{mol}\%$). Os filmes foram densificados a 800°C durante 1 hora e uma fase cristalina com estrutura ortorrômbica de titânio (anatase) foi detectada. A espessura do filme varia de 0.4 a 0.9 μm dependendo da composição da solução. As propriedades dos filmes foram analisadas por difração de raio X e a espectroscopia da reflexão infravermelha. A evolução estrutural dos filmes foi determinada por varredura em microscópio eletrônico. Esses filmes mostraram-se bons protetores contra ataque químico causado por H_2SO_4 diluído e aquecido entre 72 e 89°C durante 40 horas.

EFEITO DA ADIÇÃO DE CROMO E DE TRATAMENTOS TÉRMICOS NA RESISTÊNCIA MECÂNICA E DUCTILIDADE DA LIGA Fe-24%Al

COUTO, A. A.; PAOLA, J. C. C. D.; FERREIRA, P. I.

IPEN-CNEN SP

As ligas intermetálicas ordenadas formam uma classe única de materiais por apresentarem um arranjo atômico distinto do convencional. Abaixo do ponto de fusão ou da temperatura crítica de transição ordem-desordem, as várias espécies atômicas destas ligas tendem a ocupar sítios específicos no reticulado cristalino, formando estruturas ordenadas. Ligas intermetálicas baseadas em Fe_3Al geralmente possuem boa resistência à corrosão e oxidação com maior razão resistência mecânica peso e menor custo que o aço inoxidável. Entretanto, a ductilidade limitada a temperatura ambiente e a queda brusca da resistência mecânica acima de 600°C são suas maiores desvantagens para uso estrutural. Neste trabalho, foram investigadas ligas Fe-24at%Al com adições de até 6at%Cr, fundidas sob atmosfera de argônio laminadas a quente (800-1000°C) e tratadas termicamente. Obteve-se as estruturas $\alpha + FeAl$ (ordenado do tipo B2) e $\alpha + Fe_3Al$ (ordenado do tipo $D0_3$). A melhor combinação de ductilidade e resistência mecânica foi conseguida na liga Fe-24at%Al-2%at%Cr apresentando uma microestrutura parcialmente recristalizada com estrutura cristalina $\alpha + B2$. A presença da estrutura $D0_3$ mostrou-se prejudicial tanto à ductilidade como à resistência mecânica.

EFEITO DO HIDROGÊNIO NA NUCLEAÇÃO DE BANDAS DE DEFORMAÇÃO NA SUPERFÍCIE LATERAL DE AÇOS AUSTENÍTICOS SUBMETIDOS A ENSAIOS DE FADIGA

GAVILLET, J.; MIRANDA, P. E. V.

PEMM/COPPE/UFRJ

KUROMOTO, N. K.

DF/UFRJ

Os aços austeníticos encontram grande aplicação nas indústrias onde a possibilidade de contaminação, em serviço, pelo hidrogênio (H) pode existir. Como uma contribuição a melhor compreensão dos mecanismos que conduzem a fragilização pelo H destes aços, este trabalho tem por objetivo avaliar o efeito do H na nucleação e crescimento das bandas de deformação (BD), na superfície lateral do corpo de prova, submetido a ensaios de fadiga. Esta investigação foi realizada através de deformações cíclicas de amostras de chapas de aços austeníticos tipo ABNT 304L, com e sem H e observações sucessivas no microscópio ótico, utilizando a técnica de Nomarski. Os ensaios mecânicos foram conduzidos em uma máquina de fadiga por flexão alternada (fator R = -1 e f = 50Hz). A hidrogenação foi realizada

catodicamente em meio salino ($KHSO_4 + NaHSO_4$), a temperatura de 200°C com a aplicação de um potencial de -850mV durante 60 horas. Observou-se que a medida que se aumentou a porcentagem de deformação, a quantidade de BD aumentou e que estas se formaram, principalmente, nas regiões centrais dos grãos, servindo como semente para a nucleação das trincas de fadiga. A densidade da trincas nucleadas na superfície do aço foi maior para o material hidrogenado. Estas já foram observadas a 40% da vida útil do material, enquanto que no material não hidrogenado, elas só foram observadas após uma amplitude de deformação de 60%.

Efeitos da Composição na cristalização de fitas amorfas ($Fe_{1-c}Si_c$)₈₇Si₁₃.

NETA, E. C. DE R.; RECHENBERG, H. R.

Instituto de Física da USP, São Paulo.

Fitas amorfas de composição $Fe_{80-x}Si_{7+x}B_{13}$ ($x = 0, 1, \dots, 4$), preparadas por melt-spinning, foram aquecidas a taxa constante (2°C/min) até 800°C num aparelho de análise térmica diferencial (DTA). As curvas ΔT vs. T apresentam dois picos próximos, de alturas diferentes, sugerindo que a cristalização ocorre em duas etapas. As posições dos picos são função de x , e aparentemente ocorre uma inversão de suas posições entre $x = 3$ e $x = 4$. As fases cristalinas resultantes foram identificadas por difração de raios x como Fe-Si (solução sólida bcc) e Fe_2B (composto tetragonal). Uma análise quantitativa a partir dos espectros Mössbauer das amostras cristalizadas permitiu determinar a composição da liga Fe-Si e a fração volumétrica das duas fases em função da concentração de silício.

FABRICAÇÃO DA LIGA $Fe_{20}Al_{80}$ PELO MÉTODO DE MOAGEM MECÂNICA: CARACTERIZAÇÃO ESTRUTURAL E MAGNÉTICA.

LIMA, J. C. DE; GRANDI, T. A.; DRAGO, V.;

SANTOS, V. H. F. DOS

UFSC

Desde que Koch et al.^a obtiveram a liga Ni-Nb na fase amorfa, a partir da mistura dos pós de níquel e nióbio e usando a técnica de moagem mecânica (Mechanical Alloying), um considerável número de sistemas com interesse tanto do ponto de vista fundamental como tecnológico foram obtidos^b. Neste trabalho, pós de alumínio e ferro com alta pureza, foram pesados separadamente e misturados para obter uma composição $Fe_{20}Al_{80}$. A mistura foi lacrada em um container cilíndrico de aço, em atmosfera inerte, juntamente com 9 esferas de aço (10; 15 e 20 mm de diâmetro). A razão entre o peso das esferas e o peso dos pós era de 9:1. A mistura foi moída em um moinho de bolas do tipo planetário. A reação do estado sólido foi acompanhada em diferentes intervalos de tempo por medidas

de difração de raios-x e por medidas de espectroscopia Mossbauer do ^{57}Fe . Os espectros Mossbauer à temperatura ambiente mostram que o produto final da reação é um duplete que pode ser associado à formação de uma fase amorfa superparamagnética. A existência desta fase é reforçada pelos difractogramas de raios-x.

^aC. C. Koch, O. B. Mckamay e J. O. Scarbrough, Appl. Phys. Lett. 43, 1017 (1983).

^bV. A. Pena Rodriguez, E. Baggio-Saitovitch, S. K. Xia, C. Larica e J. C. de Lima, Hyperfine Interactions 69, 721 (1991).

STRUCTURAL STUDY OF $\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x$ POWDERS PREPARED BY MECHANICAL MILLING

XIA, S. K.; BAGGIO-SAITOVITCH, E.
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Cr - Fe system is considered to be difficult to form an amorphous alloy by melt-spinning technique, because the two constituents have the similar atomic size. However, it may be conceivable that, if the long periodic structure is destroyed at a temperature lower than the crystalline temperature and the subsequent relaxation toward a crystalline structure does not occur, the resulting amorphous structure will be retained.

In this work, $\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x$ alloy powders with initial compositions $x=0.06, 0.28, 0.80$ and 1.00 have been mechanically milled at room temperature. The structural evolution of the powders were followed by X-ray diffraction and Mössbauer spectroscopy. The results indicate that in the certain composition range an amorphous structure can be formed by a long time milling, while out of this range the powders keep their original structures. The mechanism of amorphization in Cr-Fe system has been discussed based on the thermodynamics of the system.

Preparação e Caracterização de Materiais de Interesse Tecnológico (MAT)
- 20/05/93

EFEITO DA MIGRAÇÃO IÔNICA INDUZIDA POR UM CAMPO ELÉTRICO EXTERNO SOBRE A PROPAGAÇÃO DE FRATURAS E A RUPTURA DIELÉTRICA DO VIDRO.

LEPIENSKI, C. M.

Laboratório de Materiais - Departamento de Física - UFPR

Nos vidros de silicatos com óxidos alcalinos, submetidos a ação de um campo elétrico externo, ocorre uma migração de íons alcalinos em direção ao cátodo. Formam-

se duas regiões com composição diferente do restante do vidro. Junto ao cátodo há uma grande concentração de íons alcalinos, principalmente Na^+ , enquanto que na região do anodo ocorre uma depleção desses íons. A formação dessas camadas juntamente com a medição dos campos elétricos internos formados no processo, já foram alvo de estudos anteriores. Na sequência do trabalho foi verificado que as modificações da composição junto à superfície alteram as propriedades mecânicas do vidro quanto à geração e à propagação de fraturas, influenciando portanto na ruptura dielétrica do vidro. Observou-se que a presença de trincas na superfície do vidro, na região do cátodo, acelera significativamente o processo de ruptura dielétrica durante a aplicação de um campo elétrico externo. Observou-se também que a inversão da polaridade da tensão aplicada é um outro fator acelerador da ocorrência de ruptura dielétrica. Para se estudar a origem desses fenômenos as propriedades mecânicas do vidro, nas regiões próximas à superfície, estão sendo investigadas por meio de microindentações. Por essa técnica é possível provocar a geração de pequenas fraturas, próximas da superfície das amostras de vidro, além de medir a dureza dos materiais. São apresentados os resultados dos ensaios de microindentações comparando os obtidos para regiões do vidro modificadas pela ação do campo elétrico externo com os obtidos em regiões não modificadas. Como as modificações do vidro são dependentes do tipo de eletrodo utilizado durante a aplicação do campo externo, são comparados os resultados dos ensaios de microindentações em amostras onde foram utilizados diferentes tipos de eletrodos.

ESTUDO COMPARATIVO DA CONSTANTE DIELÉTRICA DE UM CAPACITOR DE BaTiO_3 A PARTIR DE PÓS PRODUZIDOS POR TÉCNICAS DIFERENTES.

BENTO, C. A.; MACHADO, A. J. S.; HOLANDA, J. N. F. DE

Faculdade de Engenharia Química de Lorena - FAENQUIL - Centro de Engenharia de Materiais

O titanato de bário (BaTiO_3) tem encontrado numerosas aplicações comerciais desde a década de 40, sendo que a maioria de suas aplicações se baseiam nas propriedades ferroelétricas. Estas aplicações incluem capacitores cerâmicos, filtros, aparelhos de medição, sensores de pressão, receptores e transmissores. O maior uso do BaTiO_3 é de longe na fabricação de capacitores cerâmicos, porque possuem uma alta constante dielétrica. Este trabalho teve por objetivo a fabricação de um capacitor de BaTiO_3 a partir de pós produzidos por técnicas diferentes. O primeiro pó de BaTiO_3 foi produzido pela co-precipitação com ácido oxálico a partir da mistura dos precursores cloreto de titânio (TiOCl_2) e cloreto de bário (BaCl_2). O precipitado foi lavado várias vezes e calcinado a 700°C para obtenção

do pó. Uma outra técnica foi aplicada para obter o pó de $BaTiO_3$, que consistiu numa reação de difusão no estado sólido do carbonato de bário ($BaCO_3$) e do dióxido de titânio (TiO_2) numa relação estequiométrica Ba/Ti igual a 1. Os pós obtidos foram caracterizados a partir de técnicas como: DTA, Difração de Raios X, Picnometria de hélio e BET. Serão mostrados resultados da dependência da constante dielétrica e do fator de dissipação em função da temperatura de sinterização do composto cerâmico $BaTiO_3$, bem como uma comparação destes resultados com as duas técnicas de produção dos pós mencionadas acima.

CARACTERIZAÇÃO DIELETRICA DO TITANATO ZIRCONATO DE CHUMBO PURO E SEMENTADO

ZAGHETE, M. A.; LAS, W. C.; VARELA, J. A.; MARIO CILENSE, M.; TOLEDO, M. P. DE
Instituto de Química de Araraquara - UNESP
DORDOR, P.

Laboratoire de Chimie du Solide - CNRS - Talence, France

Amostras de titanato zirconato de chumbo com razões Zr/Ti de 49/51, 53/47 e 55/45 foram preparadas pelo método de Pechini. O método consiste na poliesterificação do complexo metal-citrato em meio de etileno glicol e posterior calcinação para eliminação da parte orgânica. Foram obtidas amostras puras e sementadas com 1, 3 e 5% de sementes tetragonal ou romboédrica. O pó foi compactado e as pastilhas sinterizadas a 1100° C por duas horas, em um sistema fechado, em atmosfera rica em chumbo. O material sinterizado foi caracterizado quanto à microestrutura e fases cristalinas^a. Neste trabalho, foi feita a caracterização dielétrica das amostras, medindo-se a capacitância em função da temperatura em amostras não polarizadas, usando-se espectroscopia de impedância complexa. A temperatura de Curie varia entre 380° C e 400° C para as várias amostras. A constante dielétrica complexa foi determinada em função da frequência nas amostras polarizadas (35 kV/cm). As frequências de ressonância, f_r , e anti-ressonância, f_a , que levam à determinação do fator de acoplamento planar, k_p , foram obtidas em um analisador de espectros. O coeficiente piezolétrico, d_{33} , foi obtido por medida direta e concorda com valores determinados a partir de f_r , f_a e k_p . Os valores dos parâmetros obtidos comparam-se aos do PZT na literatura.

^aM.A.Zaghete, J.A.Varela, C.O.Paiva Santos e E.Longo, 37º Congresso Brasileiro de Cerâmica, Curitiba, PR, 22 a 25 de Maio de 1993.

DESEMPENHO TÉRMICO DE UMA PAREDE CONVENCIONAL

ANDRADE, T.; NAKAMURA, O.
Instituto de Física da UFBA

FREIRE, T.

Faculdade de Arquitetura da UFBA

Este trabalho faz um estudo teórico - experimental do desempenho térmico de uma parede convencionalmente construída (reboco/ bloco/ reboco) em Salvador-BA. A temperatura da superfície externa foi medida em intervalos regulares durante 72 horas em um período sem chuvas e com baixa nebulosidade. Através de um processo de ajuste de curvas pudemos estabelecer uma equação para a evolução temporal desta temperatura nesta superfície. Uma vez estabelecida esta condição de contorno, resolvemos a equação de difusão de calor considerando 3 meios homogêneos de propriedades térmicas distintas. Os resultados são comparados a valores obtidos anteriormente pelos autores, onde foram utilizadas outras metodologias. Este estudo tem como meta o estabelecimento de um método para a determinação de propriedades térmicas, tais como o coeficiente de amortecimento e tempo de retardo, de uma parede construída com materiais diferentes.

DETERMINAÇÃO DO COEFICIENTE DE AUTODIFUSÃO CATIONICA NO ÓXIDO

UO_2

COTA, A. B.

DEFIS/UFOP

FERRAZ, W. B.

CDTN/CNEN

SABIONI, A. C. S.

DEFIS/UFOP

SANTOS, A. M. M. DOS

CDTN/CNEN

O conhecimento da autodifusão cationica no combustível nuclear UO_2 é de grande importância para a compreensão e controle de numerosos fenômenos de interesse tecnológico controlados por difusão, tais como: sinterização, deformação mecânica a altas temperaturas, crescimento de grão, densificação sob irradiação, etc. Neste trabalho foi feita a determinação do coeficiente de autodifusão cationica no óxido UO_2 através do modelo de densificação térmica de Assmann e Stehle, que se aplica ao terceiro estágio da sinterização de óxidos cerâmicos. Os dados experimentais da densificação térmica, necessários para o cálculo do coeficiente de difusão, foram obtidos através de testes de resinterização de pastilhas de UO_2 , com 96% da densidade teórica, entre 1700 e 1900° C, em vácuo de 10^{-2} Pa. Os resultados obtidos para a difusão do urânio no UO_2 são apresentados, discutidos e comparados com os da literatura.

Estudo do Tempo de Solubilização das Partículas de MnS no aço Fe-3%Si.
RODRIGUES, V. A.; MONTEIRO, W. A.; FERREIRA, N. A. M.

COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR,
INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E
NUCLEARES, C.P.11049

Para aplicação em núcleo de transformadores, geradores de potência e outros equipamentos elétricos, o aço silício de grão orientado se caracteriza por apresentar excelentes propriedades magnéticas na direção de laminação. Seu desenvolvimento é motivado pela crescente produção e consumo de energia elétrica e conseqüente busca de maior eficiência das máquinas, onde uma considerável parcela de energia é perdida através do efeito Joule caracterizado pelas correntes parasitas e histerese magnética. As chapas de aço silício de grão orientado começaram a ser comercialmente produzidas em 1945; suas propriedades têm sido continuamente melhoradas e sua utilização é crescente, principalmente em núcleos de transformadores. Os aços elétricos constituem um dos materiais mais importantes, utilizados na forma de chapas laminadas, nos núcleos dos equipamentos elétricos. O precipitado de Sulfeto de Manganês tem como função inibir o crescimento normal do grão durante o processo de fabricação do aço Fe-3%Si. No recozimento final ocorre um crescimento seletivo dos grãos que é função da orientação cristalográfica, e resulta em um crescimento anormal dos grãos com uma determinada orientação (orientação de Goss), consumindo os demais. Foi feito o estudo do tempo de solubilização do precipitado de Sulfeto de Manganês no aço Fe-Si 3% em função da dissolução dos precipitados e do crescimento de grão, bem como a observação de precipitados de MnS por MET, após tratamento térmico. Sabe-se que a solubilização dos precipitados de MnS (inibidores), ocorre a temperatura de aproximadamente 12700C, para este aço. Para o estudo do tempo de solubilização dos precipitados de MnS, foi feito o tratamento térmico nas amostras em um forno resistivo com atmosfera controlada com as seguintes temperaturas: 1300 e 13500C e tempos de 5, 10, 15 e 20 minutos seguido de têmpera. A observação do tamanho de grão foi feita por meio de Microscopia Óptica e a observação dos precipitados de MnS por Microscopia Eletrônica de Transmissão. Utilizou-se para esta última as técnicas, de réplica de extração de precipitados e folhas finas. Na análise dos corpos de prova que foram submetidos a tratamento térmico a 1300 e 13500C, observou-se o crescimento do tamanho do grão para tempos crescentes. Este crescimento do tamanho de grão deve-se ao processo de dissolução dos precipitados na matriz ferrítica e conseqüente liberação do contorno de grão.

OTIMIZAÇÃO DE PÓ DE TÂNTALO PARA
CAPACITORES ELETROLÍTICOS

FREITAS, D. DE; HOLANDA, J. N. F. DE

Faculdade de Engenharia Química de Lorena -

FAENQUIL / Centro de Engenharia de Materiais - CEM

Este trabalho teve, como etapa inicial, a obtenção de pós de tântalo a partir do processo de redução por sódio do sal heptafluor tantalato de potássio (K_2TaF_7). Os pós obtidos apresentaram propriedades físicas adequadas para a aplicação na manufatura de ânodos para capacitores eletrolíticos, tais como tamanho médio de partícula ($1,66 \mu\text{m}$) e área superficial específica ($1,92 \text{ m}^2/\text{g}$). Entretanto, esses pós apresentaram altos teores de oxigênio, principalmente na forma de óxidos, que influencia diretamente nas propriedades dielétricas do capacitor. Frente a esse problema, o presente trabalho tem como principal finalidade a otimização desses pós tornando-os viáveis para essa aplicação. São apresentados os resultados de um estudo sistemático, através de tratamentos térmicos varrendo diversas temperaturas e tempos, visando a deoxidação dos mesmos. Estes pós foram caracterizados mediante difração de Raios X, Microscopia Eletrônica de Varredura e análise química (teor de oxigênio). Na seqüência, os pós otimizados e os originais (sem tratamento) passaram por etapas previamente definidas de prensagem, sinterização e anodização, obtendo-se finalmente os capacitores de tântalo. Nesses capacitores foram realizadas as medidas de capacitância, fator de dissipação, resistência em série equivalente (RSE) e carga específica (cv/g). Os resultados são apresentados em forma de tabelas e também graficamente para as diversas temperaturas e tempos de sinterização.

CRESCIMENTO E DETERMINAÇÃO DE
ESTRUTURA DE MONOCRISTAIS DE

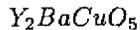
$BaCuO_2$

HERNANDES, A. C.; LIMA, C. J. DE; ANDREETA,
M. R. B.; FERRAZ, M. C. C.; MASCARENHAS, Y.
P.; BASSO, H. C.

Instituto de Física e Química de São Carlos

Cristais crescidos por solução em altas temperaturas (fluxo) apresentam impurezas provenientes do solvente e cadinho utilizados. Com o objetivo de eliminar essas impurezas, monocristais de $BaCuO_2$ foram obtidos a partir de nutrientes estequiométricos, utilizando-se a técnica de fusão a laser. Cristais de $800 \mu\text{m}$ de diâmetro e até 15mm de comprimento foram assim obtidos. As intensidades dos feixes difratados pelo monocristal foram coletadas usando-se um difratômetro automático de 4 círculos CAD4 e os dados obtidos analisados através do programa SHELX. Dados cristalográficos: sistema cúbico, grupo espacial $Im\bar{3}m, a = 18.24(1)\text{Å}$. A estrutura encontrada será comparada com dados já existentes na literatura obtidos com monocristais crescidos pelo método de fluxo [E.F. Paulus et al., Journal of Solid State Chemistry 90,17(1991)].

MÉTODO DE RIETVELD APLICADO AO
ESTUDO DA REAÇÃO DE FORMAÇÃO DO



FERRAZ, M. C. C.; MASCARENHAS, Y. P.; BASSO, H. C.

Instituto de Física e Química de São Carlos

No estudo da reação de formação do supercondutor YBACUO : $Y_2Cu_2O_5 + 4BaCuO_2 \rightarrow 2YBa_2Cu_3O_7$, detetou-se uma etapa intermediária: $Y_2Cu_2O_5 + 4BaCuO_2 \rightarrow Y_2BaCuO_5 + 3BaCuO_2 + 2CuO$. Para melhor caracterização dessa etapa, analisou-se a seguinte reação: $Y_2Cu_2O_5 + BaCuO_2 \rightarrow Y_2BaCuO_5 + 2CuO$ realizada por aquecimento à temperatura de 900C em atmosfera de oxigênio, colhendo-se 5 amostras em tempos diferentes de reação. Em cada caso foi realizada a difratometria usando radiação $K\alpha$ do Cu pelo método de "step scanning" em intervalos de 0.05 graus utilizando o difratômetro automático Rotaflex da Rigaku e as estruturas refinadas pelo método de Rietveld. A reação se completou em 20h tendo sido obtidos bons índices de concordância para as 5 amostra.

EFEITOS ESTRUTURAIS E ELÉTRICOS MODIFICADOS PELO PROCESSAMENTO DA CERÂMICA SUPERCONDUTORA DO SISTEMA Bi:Sr:Ca:Cu:O

SANTOS, D. I. DOS; RUBO, E. A. A.

UNESP - BAURU

CARVALHO, C. L. DE

UNESP - Ilha Solteira

Neste trabalho tratamos acerca da preparação e caracterização de material cerâmico supercondutor de alta temperatura crítica do sistema Bi:Sr:Ca:Cu:O. A partir da dissolução de nitratos em água bi-distilada, obtivemos o pó cerâmico por co-precipitação de oxalatos, com a composição nominal de óxido de (Bi,Pb):Sr:Ca:Cu igual a (1.6:0.4:2:2:3). O pó precursor foi submetido à análises térmicas (ATD/TG), difração de raio-x e microscopia eletrônica de varredura, na qual, através de EDX (Energy Dispersed X-Ray), e com a utilização de padrões de cada elemento, determinamos a sua composição básica. Os pós obtidos através de três procedimentos diferenciados, quanto à proporção de ácido oxálico, foram calcinados e, após pastilhados, foram sinterizados com a aplicação de corrente elétrica (processo em estudo). A mudança nos parâmetros de precipitação deu origem a diferentes topologias e granulações dos pós precursores modificando, conseqüentemente, as propriedades das pastilhas preparadas com cada um. Estas pastilhas foram também, caracterizadas estrutural e eletricamente após a sua sinterização que se deu por dois processos: térmico e elétrico. (Apoio: FAPESP e Capes-PICD).

ESTUDO DA CINÉTICA DE REAÇÃO DE FORMAÇÃO DO YBACUO UTILIZANDO O

MÉTODO DE RIETVELD

FERRAZ, M. C. C.; MASCARENHAS, Y. P.; BASSO, H. C.

Instituto de Física e Química de São Carlos

Com o objetivo de estabelecer-se rotas mais eficientes para a obtenção do $YBa_2Cu_3O_7$ amostras foram produzidas por reação em estado sólido e depois analisadas por difração de raios-x. Inicialmente analisou-se as reações de formação dos compostos que vão gerar o supercondutor cerâmico: $Y_2O_3 + 2CuO \rightarrow Y_2Cu_2O_5$, $BaCO_3 + CuO \rightarrow BaCuO_2 + CO_2$. Após esse estudo, foram produzidas 15 amostras do YBACUO à diferentes temperaturas (850C, 900C, 950C) e em diferentes tempos de reação, todas em atmosfera de oxigênio. A reação de formação do supercondutor é dada a seguir: $Y_2Cu_2O_5 + 4BaCuO_2 \rightarrow 2YBa_2Cu_3O_7$, tendo-se detetado uma etapa intermediária : $Y_2BaCuO_5 + 3BaCuO_2 + 2CuO$. A análise quantitativa dos materiais foi feita utilizando-se o método de Rietveld.

ESTUDO DO DIAGRAMA DE FASES

PSEUDO BINÁRIO $YO_{1.5} - CuO_x$

MACHADO, A. J. S.; JARDIM, R. F.

Faculdade de Engenharia Química de Lorena -

FAENQUIL - Centro de Engenharia de Materiais

Um dos primeiros estudos deste sistema, foi realizado por O. Schmitz e colaboradores, que descobriram a existência do composto intercerâmico de estequiometria $Y_2Cu_2O_5$. Em 1975 M. Arjomand e colaboradores produziram um monocristal deste composto, e descobriram que a estrutura cristalina deste material é ortorrômbica, pertencente ao grupo espacial Pna_21 , com parâmetros de rede $a=10,799 \text{ \AA}$, $b=3,4960 \text{ \AA}$ e $c=12,456 \text{ \AA}$, com densidade teórica de $5,437 \text{ g/cm}^3$. Alguns anos depois T. Ishiguro e colaboradores, conseguiram sintetizar outra fase deste sistema, de estequiometria $YCuO_2$, com estrutura cristalina do tipo Delafossite, isoestrutural com $AlCuO_2$ hexagonal pertencente ao grupo espacial $Pb3/mmc$ com parâmetros de rede $a=3,5206 \text{ \AA}$ e $c=11,418 \text{ \AA}$, de densidade teórica igual a $5,01 \text{ g/cm}^3$. Neste trabalho mostraremos um estudo do equilíbrio de fases entre as temperaturas de 800°C e 1100°C, com amostras preparadas na estequiometria $Y_xCu_{1-x}O_y$, varrendo toda a extensão do diagrama. Serão apresentados resultados de difração de raios X, análise térmica diferencial (DTA), um estudo de densificação, análise termogravimétrica (TGA), titulação iodométrica por potenciometria e análise microestrutural (ceramografia). Será também discutida a transição da fase $Y_2Cu_2O_5$ para a fase de estequiometria $YCuO_2$, bem como um estudo minucioso do comportamento destas fases em diferentes atmosferas (oxidante e redutora), e com duas formas precursoras do óxido de cobre, o CuO e o Cu_2O .

Difusão, Relaxação e Reorientação Atômica em Materiais (MAT) - 21/05/93

DIFUSÃO DE Hf E Au EM α -Ti

SANTOS, J. H. R. DOS; FICHTNER, P. F.; BEHAR, M.

Instituto de Física - Universidade Federal do Rio Grande do Sul

DYMENT, F.

Departamento de Metalurgia - Comissão Nacional de Energia Atômica, Argentina

O comportamento difusional dos elementos da coluna IVB da tabela periódica é anômalo, sendo que o gráfico de Arrhenius apresenta uma pronunciada curvatura a altas temperaturas. Exemplos desse comportamento são a autodifusão de α -Zr e de Hf em α -Zr.

Com o fim de determinar se no caso do α -Ti acontece o mesmo, decidimos investigar a difusão de Au e Hf neste metal. A dependência com a temperatura do coeficiente de difusão desses dois elementos foi estudada no intervalo de temperaturas entre 550 e 750°C. Em ambos os casos, devido aos baixos coeficientes de difusão, a técnica de RBS foi utilizada para determinar os perfis de concentração.

No caso do Hf, filmes de cerca de 150 Å foram depositados sobre Ti. O comportamento difusional obtido é, essencialmente, normal com parâmetros característicos da difusão iguais a: $Q = 2,9eV$ e $D_0 = 1,5 \times 10^{-4} m^2/s$. No caso do Au, devido à baixa solubilidade, foram feitas implantações de Au em α -Ti. Nesse caso, determinamos a solubilidade e difusividade como função da temperatura. Dentro da sensibilidade da medida, a solubilidade é constante e igual a 0.18 at%, no intervalo de temperaturas em que a experiência foi realizada. Além disso, a dependência térmica do coeficiente de difusão é normal (Arrhenius) com parâmetros característicos $Q = 2,8eV$ e $D_0 = 1,1 \times 10^{-4} m^2/s$.

Os resultados são discutidos em termos das teorias existentes.

RELAXAÇÕES ANELÁSTICAS DEVIDO A PARES O-H EM LIGAS DE Nb-Zr

GRANDINI, C. R.

UNESP - BAURU

BOTTA FILHO, W. J.; FLORÊNCIO, O.; TEJIMA, H.; JORDÃO, J. A.

UFSCar

Nos últimos trinta anos diversos estudos vem sendo feitos para entender os mecanismos de relaxação de átomos de hidrogênio presentes em metais de transição e suas ligas. Neste trabalho, nós observamos um processo de relaxação devido à reorientação induzida por

tensão de átomos de hidrogênio localizados em sítios intersticiais tetraedrais em torno de átomos de oxigênio localizados em sítios intersticiais octaedrais "congelados" próximos de átomos de nióbio da matriz metálica. Nós estudamos este processo de relaxação através de medidas da atenuação de ondas ultra-sônicas longitudinais. Estas medidas foram efetuadas em amostras policristalinas de ligas de Nb-1% Zr contendo oxigênio, com frequência de 10 e 30 MHz, puras e dopadas com 0.5 e 5.0%at de hidrogênio. Os resultados mostram uma estrutura de relaxação termicamente ativada em torno de 202 e 235 K para 10 e 30 MHz, respectivamente. Esta estrutura de relaxação aumenta com o aumento da concentração de hidrogênio. (Apoio: FAENQUIL-CMAR, CNPq, Capes e FUNDUNESP).

RELAXAÇÕES ANELÁSTICAS DEVIDO À REORIENTAÇÃO INDUZIDA POR TENSÃO DE DEFEITOS PONTUAIS EM METAIS DE TRANSIÇÃO

FERNANDES, R. M.; GRANDINI, C. R.

UNESP - BAURU

SILVA, J. R. G. DA; FLORÊNCIO, O.; TEJIMA, H.; JORDÃO, J. A. R.

UFSCar

As medidas de atrito interno constituem uma importante ferramenta para o estudo de processos de relaxação anelástica quando impurezas intersticiais estão presentes em uma matriz metálica. Um destes processos é conhecido como reorientação induzida por tensão. Este trabalho mostra o estudo efetuado em amostras monocristalinas e policristalinas de nióbio e amostras monocristalinas de tântalo, puras e dopadas com intersticiais pesados como oxigênio e nitrogênio. Os resultados experimentais foram obtidos por intermédio de medidas de atrito interno como função da temperatura. Os resultados mostram estruturas de relaxação, as quais são decompostas em picos de Debye. Para as amostras de nióbio observa-se estruturas de relaxação devido à reorientação induzida por tensão de um átomo de oxigênio em torno de átomos de nióbio (processo Nb-O), dois átomos de oxigênio em torno de átomos de nióbio (processo Nb-O-O) e um átomo de nitrogênio em torno de átomos de nióbio (processo Nb-N). Para as amostras de tântalo, observa-se estruturas de relaxação devido à reorientação induzida por tensão de um átomo de oxigênio em torno de átomos de tântalo (processo Ta-O). Estes processos de relaxação são termicamente ativados e são medidos variando-se a frequência. (Apoio: CNPq, Capes e FUNDUNESP).

SUPERPOSIÇÃO DE "THERMAL SPIKE" POR DINÂMICA MOLECULAR

SILVA, C. R. S. DA; SCHERER, C.

UFRGS

Foi realizado o estudo do efeito da superposição de eventos "thermal spike" (TS) produzidos por íons de 2,5 keV em Cu no tocante a produção de defeitos e a migração atômica. A técnica utilizada foi a simulação por dinâmica molecular de dois TS sucessivos a diversas distâncias relativas. As principais conclusões do trabalho foram: -i) O comprimento médio de migração dos átomos móveis no primeiro TS é aproximadamente igual ao parâmetro de rede e não é modificado pela ocorrência do segundo TS exceto quando este ocorre exatamente no mesmo sítio cristalino; -ii) O efeito do segundo TS sobre a região rica em intersticiais é produzir defeitos não localizados envolvendo de 3 a 5 átomos. -iii) Os átomos intersticiais não são produzidos por dissociações de um sítio normal em um par de Frankel porém nas pontas de cadeias de relocações atômicas fora da região central do TS.

DETERMINAÇÃO DA ESTRUTURA DE METAIS LÍQUIDOS ATRAVÉS DE TÉCNICAS DE DIFRAÇÃO

TRANICAPOCCHI, J. D.; LIMA, M. S. F. DE
EPUSP

É possível obter-se uma grande quantidade de informações à respeito da estrutura dos líquidos através de experimentos com difração de raios-X ou nêutrons. Diferentemente do que ocorre com os sólidos e gases, o difratograma típico de uma amostra líquida apresenta como característica principal máximos e mínimos que cobrem uma estreita faixa do espectro, de cerca de uma distância inter-atômica até, no máximo, quatro distâncias inter-atômicas. Isto pode ser interpretado como resultado de uma distribuição espacialmente randômica de átomos num arranjo densamente empacotado. Assim, é possível presumir que os líquidos possuem uma tendência a ordenação à curta distância, como consequência da alta densidade de empacotamento, em contraste com uma desordem à longa distância como consequência da agitação térmica e movimentação dos átomos no meio. O modelo das Esferas Rígidas Densamente Empacotadas num Arranjo Randômico (ERDEAR ou RDPHS, em inglês) mostrou-se como uma ferramenta de importância fundamental na descrição da estrutura de líquidos monoatômicos simples e vários sistemas binários. Hafner demonstrou que as propriedades físico-químicas de líquidos binários podem ser determinadas através de um modelo ERDEAR, provando que as interações químicas entre átomos iguais ou dois átomos diferentes são influenciadas apenas pelo diâmetro da esfera rígida, o que torna essas propriedades intimamente ligadas a composição química. Entretanto, o método falha quando existe qualquer relação de ordenação entre átomos diferentes. O trabalho a ser desenvolvido pretende dar uma contribuição ao estudo da estrutura das ligas metálicas líquidas, no sistema binário Pb-Sn, no que confere a sua

estrutura. Para tal, utilizar-se-ão técnicas de difração de raios-X (DRX) e difração de nêutrons (DN) em alta temperatura. Após obtidas as informações pertinentes a estrutura das ligas, serão, estas, correlacionadas com as propriedades de transporte, notadamente viscosidade e tensão superficial, do meio fundido.

Preparação e Caracterização de Materiais Óticos (MAT) - 21/05/93

FABRICAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE FIBRAS ÓPTICAS DE VIDROS FLUOROZIRCONADOS

MESSADDEQ, Y.; AEGERTER, M. A.
Instituto de Física e Química de São Carlos - USP
OLIVEIRA, S. M. DE; DINI, D. C.
CPqD-Telebrás, Campinas-SP

A descoberta de novos vidros de fluoretos em 1974 foi o início de inúmeras pesquisas. Estes vidros são transparentes no infravermelho longínquo além de $7\mu\text{m}$. A preparação de preformas de vidros de fluorozirconados (ZBLAN), é feita pela técnica de Tran. O puxamento da primeira fibra brasileira (comprimento 15m, diâmetro do núcleo $135\mu\text{m}$), assim como as suas características, tais como atenuação óptica, espalhamento, largura de banda, índice de refração, dispersão óptica, abertura numérica serão apresentados. As diversas aplicações futuras do uso destas fibras serão também discutidas como por exemplo as fibras dopadas com Pr^{3+} para uso em amplificadores óticos à $1,3\mu\text{m}$. Fibras apresentam uma baixa atenuação 10^{-2} dB/km à $2,5\mu\text{m}$ em comparação às fibras de sílica.

OTOMASCARAS A CENTROS DE COR PARA A TRANSPOSIÇÃO DE IMAGENS SUBMICROMÉTRICAS

NUNES, R. A.; CARMO, L. C. S. DO; MAURICIO, M. H. P.
PUC/Rio

SOMMA, F.; GENTILI, M.

Universidade de Roma "La Sapienza" e IESS

Neste trabalho demonstra-se a viabilidade da produção de fotomáscaras a centros de cor utilizando-se como exemplo o fluoreto de lítio (LiF). O processo de fabricação da máscara se faz por meio de técnicas litográficas utilizando feixe de elétrons; a transferência do padrão para o resist utiliza litografia óptica de alta resolução. Os centros de cor são produzidos de forma controlada, o padrão sendo definido pelos feixes de elétrons focalizados. No LiF, o mascaramento é decorrência do surgimento de bandas de absorção (densidade óptica 2) centradas em 248nm (centros F) e 450nm

(centros F_2), regiões espectrais que coincidem com as raiais de emissão da lâmpada de mercúrio (436 e 248nm) que hoje formam o padrão da indústria de microeletrônica para a transposição de imagens. O uso de centros de cor no processo de fabricação de fotomáscaras reduz o numero de etapas do processo convencional de fabricação, evitando a deposição e revelação do elétron resist e as subsequentes etapas de corrosão do material opaco responsáveis pelo efeito de mascaramento; a eliminação destas etapas reduz os custos de equipamento, de material e de recursos humanos, além de eliminar as principais fontes de geração de imperfeições. Uma máscara que foi produzida sobre o LiF com perfis apresentando resolução da ordem de 3 micra suportou da ordem de 1000 exposições da linha-g (436nm) e aproximadamente 50 exposições na linha DUV (250nm).

NOVAS FAMÍLIAS DE VIDROS DE FLUORETOS

MESSADDEQ, Y.; BOSCOLO, M.; AEGERTER, M. A.
Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

Recentemente uma nova família de vidros de fluoretos à base de InF_3 está aparecendo como um grupo promissor para fabricação de fibras de baixa perda óptica a $5 \mu\text{m}$ para acoplar com o laser CO. Quando dopado com terras raras (Nd, Er, Eu, Ho) permite obtenção de fibras lasers e amplificadores ópticos em $1,3 \mu\text{m}$ (Pr, PrYb) e $1,5 \mu\text{m}$ (Er). Os vidros à base de InF_3 apresentam uma janela de transmissão até $10 \mu\text{m}$ no IV médio maior que os vidros à base de ZrF_4 . O sistema de formação vítrea e as principais propriedades físicas e ópticas serão discutidas.

PROPRIEDADES ÓPTICAS DO $KZnF_3 : Cr^{3+}$ SOB PRESSÃO

FREIRE, P. DE T. C.; LEMOS, V.

Instituto de Física, UNICAMP, Campinas, SP
PILLA, O.

Dipt. di Fisica, Università degli Studi di Trento, Italia

$KZnF_3 : Cr^{3+}$ é um material promissor para laser de estado sólido em virtude da matriz ($KZnF_3$) ser transparente e o íon Cr^{3+} absorver e emitir energia na região do visível. O espectro de luminescência deste material nas condições ambientes de pressão e temperatura é caracterizado por uma banda larga, correspondente a transição eletrônica ${}^4T_{2g} \rightarrow {}^4A_{2g}$. O efeito produzido por decréscimo de temperatura ou acréscimo de pressão hidrostática é um aumento do campo cristalino. Campo cristalino alto é identificado com espectros de luminescência que exibem as linhas finas correspondentes a transições ${}^2E_g \rightarrow {}^4A_{2g}$. Neste trabalho o intuito é estudar a transição entre os estados de campos baixo e alto, induzida por pressão hidrostática aplicada externamente, utilizando técnicas de luminescência para detecção. A análise dos espectros de emissão tomados a temperatura ambiente e pressão no intervalo 0–12,5 GPa, revela o valor da pressão de cruzamento de regimes de campo em 8 GPa. A banda de emissão larga aparece nos espectros a altas pressões como consequência de população térmica do nível ${}^4T_{2g}$ por decaimento do nível 2E_g o qual é um estado de curto tempo de vida. Por abaixamento da temperatura a intensidade da banda larga decresce rapidamente, confirmando os efeitos populacionais. Experiências de fotoexcitação estão sendo efetuadas para permitir distinguir linhas no espectro provenientes de transições eletrônicas daquelas de origem vibracional, conforme proposto por Pilla e colaboradores.^a

^aO. Pilla, E. Galvanetto, M. Montagna and G. Vilianni, *Phys. Rev. B* **38**, 3477 (1988)

METAIS E MATERIAIS MAGNÉTICOS

Propriedades de Materiais Magnéticos (MMM) – 19/05/93

Magnetismo em Materiais Orgânicos

NOVAK, M. A.

IF-UFRJ

THOLENCE, J. L.

CRTBT-CNRS

Recentemente foi demonstrado que materiais puramente orgânicos, composto somente dos elementos C, H, N, e O, e baseados no radical livre Nitroxido de Nitronyl, podem apresentar interações ferromagnéticas à baixas temperaturas. A versatilidade com que estes radicais se coordenam com metais de transição e terras raras tem sido explorado recentemente com o objetivo de obter-se novos materiais ferromagnéticos, abrindo-se uma nova área de pesquisa em magnetismo. A maior parte dos compostos já conhecidos formam estruturas antiferromagnéticas de baixa dimensionalidade. São raros os casos de ferromagnetismo de longo alcance. Em particular em compostos puramente orgânicos até o ano passado conhecia-se somente um composto ferromagnético com T de Curie de 0,6K. Apresentaremos aqui um novo composto biradical puramente orgânico que apresenta uma transição ferromagnética de longo alcance a uma temperatura de 1,48K, que é a mais alta neste tipo de composto, e suas propriedades magnéticas, destacando-se a histerese extremamente estreita de acordo com o baixo valor da parte imaginária da susceptibilidade. Mostraremos também dados obtidos recentemente em complexos com metais de transição e terras raras.

RELAXAÇÃO DE ESTADOS METAESTÁVEIS EM PRESENÇA DE CAMPOS ALEATÓRIOS NO $KTaO_3 : Nb$.

LEITÃO, U. A.

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais

KLEEMANN, W.

Angewandte Physik, Universität Duisburg

A ocorrência de estados de domínios metaestáveis, gerados pelo "pinning" das flutuações térmicas na presença de campos aleatórios, parece ser um fenômeno comum à uma gama diversificada de sistemas físicos. Aplicada inicialmente à sistemas magnéticos, a teoria dinâmica de Huse e Fisher^a parece ser aplicável também à sistemas ferroelétricos com impurezas dipolares aleatórias^b. Apresentamos, neste trabalho, uma revisão sucinta das previsões teóricas e observações experimentais de fenômenos de relaxação em presença de campos aleatórios, em sistemas magnéticos e fer-

roelétricos. Em especial, a relaxação espontânea do estado de domínios quadrupolares em $KTaO_3 : Nb$ é discutida como sendo determinada pela presença de "random strain fields".

Financiamento: Rhae-CNPq, FAPEMIG e DFG.

^aD. A. Huse and D. S. Fisher, Phys. Rev. B35(1987) 6841

^bW. Kleemann, Int. J. Mod. Phys. (1993)(no prelo)

Estudos da reorientação de spin e determinação de diagramas de fase magnéticas das ligas

$(R_{1-x}R'_x)Fe_{11}Ti$, $R = Gd, Er$ e $R' = Dy, Tb$.

NAGAMINE, L. C. M. M.; RECHENBERG, H. R.

Instituto de Física da USP.

IBARRA, M. R.; ALGARABEL, P. A.

Universidade de Zaragoza - C.S.I.C, Zaragoza, Spain.

Foram realizados estudos de reorientação de spin nas seguintes séries $(R_{1-x}Dy_x)Fe_{11}Ti$, com $R = Gd, Er$ e $(Tb_xGd_{1-x})Fe_{11}Ti$, para várias concentrações x . A temperatura de reorientação de spin e o ângulo de reorientação de spin $\theta(T)$ foram determinados através de medidas de susceptibilidade e medidas de magnetização paralela e perpendicular ao campo aplicado, na faixa de 4.2 a 300 K. Para isso as amostras foram pulverizadas, orientadas magneticamente e fixadas com resina epoxy. Medindo a magnetização M_{\parallel} e M_{\perp} em função do ângulo θ com respeito ao eixo cristalográfico \vec{c} , determinados a evolução $\theta(T)$ e a temperatura de reorientação de spin. O modelo teórico empregado consiste do campo cristalino (CEF) de um íon e da aproximação do campo molecular para descrever as interações de troca.

$$\begin{aligned} H &= H_{CEF} + H_{Troca} \\ &= B_2^0 O_2^0 + B_4^0 O_4^0 + B_4^4 O_4^4 + B_6^0 O_6^0 + B_6^4 O_6^4 + \\ &\quad g_J \mu_B \vec{S} \cdot \vec{J} \end{aligned}$$

Usando os coeficientes de campo cristalino determinados por Coey, pudemos explicar os diagramas de fase magnético das séries $(Gd_{1-x}Dy_x)Fe_{11}Ti$ e $(Er_{1-x}Dy_x)Fe_{11}Ti$ e também a evolução com a temperatura de $\theta(T)$.

Existem muitas controvérsias na literatura em relação ao comportamento magnético de $TbFe_{11}Ti$. Com base nas nossas medidas determinamos o diagrama de fase $(Tb_xGd_{1-x})Fe_{11}Ti$ e tentamos elucidar estas controvérsias.

CALOR ESPECÍFICO MAGNÉTICO DE CU(ALA,L)-2 ABAIXO DE 1.5 K

RAPP, R. E.; SOUZA, E. P. DE

Instituto de Física - UFRJ

GODFRIN, H.

CRTBT - CNRS, França

CALVO, R.

INTEC, CONICET - UNL, Argentina

Realizamos medidas de calor específico em Cu(ALA,L)-2 (complexo de amino-ácido de cobre) entre 0.05 K e 1.5 K. Como no caso dos complexos Cu(BUT,L)-2 e Cu(BUT,DL)-2 os resultados concordam com as previsões do modelo de Heisenberg para uma cadeia de spins 1/2 antiferromagnética. Um ajuste sobre os cálculos de Bonner e Fisher e os cálculos de Takahashi da para a constante de troca um valor de 0.57 K. A existência de um pico no calor específico a aproximadamente 0.068 K indica uma possível transição a uma fase ordenada. As medições ao redor de 0.06 K, no limite da nossa faixa de trabalho, estão sendo refeitas para melhorar a qualidade o que permitirá uma melhor definição da forma deste pico, facilitando deste modo, a interpretação sobre sua origem.

Multicamadas, Filmes e Metais Amor- fos (MMM) - 19/05/93

DETERMINAÇÃO DA SUSCETIBILIDADE MAGNÉTICA COMPLEXA DE FERROFLUIDOS

INÁCIO, F. A.; OLIVEIRA, A. C. DE

UnB

GAMA, S.

Unicamp

Neste trabalho determinamos a suscetibilidade magnética complexa ($\chi^* = \chi' - i\chi''$) de ferrofluidos utilizando a técnica de rádio-frequência (rf). Nessa técnica a amostra em estudo é colocada dentro de uma bobina de indutância L_0 da de um circuito oscilador que, por sua vez, é mergulhada em um campo magnético uniforme (H). Pode-se mostrar que a variação de indutância $\delta L = L - L_0$ da bobina é proporcional a magnetização da amostra. Mostra-se, também, que a componente imaginária (χ''), devido a absorção de energia pela amostra, da suscetibilidade magnética χ^* está relacionada com a variação da amplitude do sinal do oscilador.

As amostras estudadas são ferrofluido a base de querosene e suas diluições nas concentrações: 1:1, 2:1, 4:1, 8:1, 15:1 e 40:1 em querosene.

MAGNETORESISTÊNCIA E ANISOTROPIA ALEATÓRIA NA LIGA FERROMAGNÉTICA AMORFA

$Fe_{70.4}Co_{4.6}Si_{15}B_{10}$

SILVA, B. L. DA; MACHADO, F. L. A.

Departamento de Física, UFPE, 50732-910 Recife, PE

A magnetoresistência MR ($= \Delta\rho(H)/\rho_i(H=0)$) da liga ferromagnética amorfa $Fe_{70.4}Co_{4.6}Si_{15}B_{10}$ apresenta dois regimes distintos [J. Appl. Phys. **73**, 1993]. Para valores do campo magnético aplicado H menores que $H_c = 2.40e$, MR aumenta com H^2 e para H maior que H_c , MR varia com H obedecendo uma lei de escala com a magnetização M do tipo $M(H)^2$: $MR = \Delta R_0 [\cos^2\theta - \alpha(M(H)/M_s)^2]$ onde $\cos\theta = HM_s/2K$ para $H \leq H_c (= 2K/M_s)$ e $\cos\theta = 1$ para $H > H_c$, M_s é a magnetização de saturação, K a constante de anisotropia da liga e $\alpha (= 0.97)$ é um parâmetro de ajuste da curva teórica aos dados experimentais. A magnetização medida em função da temperatura e campo magnético apresentou irreversibilidade típica de vidros de spins descrita por uma linha do tipo de Almeida-Thouless com expoente crítico $\phi = 4.66$, e uma transição de fase induzida por H foi também observada [J. Appl. Phys. **70**, 6169 (1991), J. Mag. Mag. Materials **104-107**, 277 (1992)]. No presente trabalho, apresentamos medidas da MR em função da frequência. Um crescimento monotônico é observado no intervalo de frequência $50 \leq f \leq 5000 Hz$. Os resultados serão discutidos dentro do modelo de anisotropia aleatória usado para explicar o comportamento da magnetização. A variação de MR com M^2 será também discutida dentro da teoria de vidros de spins.

CRISTALIZAÇÃO E MAGNETOSTRIÇÃO DE AMORFOS: PROPRIEDADES CORRELATAS?

MIRANDA, M. G. M.; BAIBICH, M. N.

UFRGS

A série de ligas amorfas CoFeSiB apresenta propriedades magnetoelásticas interessantes, como a troca de sinal da magnetostricção em torno da composição $Co_{70.4}Fe_{4.6}Si_{15}B_{10}$. Em estudos anteriores, comunicou-se resultados obtidos para a cristalização em presença de um campo magnético que mostravam uma mudança brusca nas energias de ativação, com valores elevados para composições correspondentes à magnetostricção negativa. Tal situação poderia, entretanto, originar-se do método utilizado, onde um pequeno campo magnético era aplicado para detectar as temperaturas de cristalização e, destas, as energias de ativação associadas. Os resultados preliminares que apresentamos agora foram obtidos por medidas isotérmicas e isocronicas de resistividade elétrica, e sem campo magnético

aplicado. Em linhas gerais, a tendência observada anteriormente é confirmada e, mais, parecem haver dois processos distintos para a cristalização. Estes dois processos seriam o equivalente dos estados de magnetostrição positiva e negativa sugeridos em pelo menos dois modelos teóricos para explicar a magnetostrição nula em amorfos, e corresponderiam certamente às duas configurações locais mais frequentes nestes materiais. A partir de cada uma das configurações seriam obtidos caminhos diferentes para a cristalização.

ANISOTROPIA INDUZIDA EM LIGAS AMORFAS E NANOCRISTALINAS

EMURA, M.; SEVERINO, A. M.; ALTOÉ, M. V. P.; MISSELL, F. P.

Instituto de Física - USP

Ligas amorfas à base de ferro têm sido estudadas devido às suas excelentes propriedades magnéticas, como alta magnetização de saturação e baixas perdas. Várias são suas aplicações: núcleos de transformadores, indutores e motores. Acrescentando pequenas quantidades de nióbio e cobre em ligas amorfas de Fe-Si-B, e submetendo-as a um tratamento térmico, foi desenvolvido ^a um material que possibilitou aumentar o campo de aplicações das ligas de ferro. Os valores de permeabilidade e perdas magnéticas tornaram-se comparáveis aos das ligas amorfas à base de cobalto, com propriedades magnéticas melhores em frequências altas. Aparentemente, tais propriedades têm origem na estrutura nanocristalina adquirida pelo material durante o tratamento térmico. Confeccionamos fitas amorfas de $Fe_{78}Si_{13}B_9$ e de $Fe_{73.5}Cu_1Nb_3Si_{13.5}B_9$ que foram caracterizadas através de medidas da temperatura de Curie (T_c), magnetostrição de saturação (λ_s), curvas de magnetização inicial e magnetização de saturação (M_s). Um aspecto característico das ligas amorfas é a existência do fenômeno de relaxação estrutural nas suas propriedades. Este fenômeno pode ser quantificado através do estudo de anisotropias induzidas em tratamentos térmicos. A possibilidade de ocorrência da relaxação estrutural também em ligas nanocristalinas é discutida neste trabalho. As fitas de $Fe_{78}Si_{13}B_9$ foram tratadas termicamente sob a ação de um campo magnético perpendicular ao seu eixo e no seu plano. Foi realizado um estudo cinético da indução de anisotropia nestes tratamentos utilizando a teoria micromagnética de Kronmüller, baseada no sistema de dois níveis. Aplicando a mesma metodologia de indução de anisotropia, estudamos a liga $Fe_{73.5}Cu_1Nb_3Si_{13.5}B_9$ que tratada termicamente a $540^\circ C$ durante 1 hora adquiriu a estrutura de grãos nanocristalina. Comparamos com os resultados obtidos para a liga de $Fe_{78}Si_{13}B_9$ onde pudemos observar a influência dos materiais acrescentados (Nb e Cu) no processo de indução de anisotropia. Trabalho financiado por FAPESP, FINEP e CNPq

^aY. Yoshizawa, S. Oguma and K. Yamauchi, J. Appl.

Phys. 64, 6044 (1988).

Temperatura de Debye de $Fe_{78}Si_{13}B_{13}$ amorfo: efeitos de relaxação estrutural.

RECHENBERG, H. R.; PARTITI, C. S. M.

Instituto de Física da USP

Materiais amorfos, quando submetidos a tratamentos térmicos abaixo da temperatura de cristalização, sofrem rearranjos atômicos que modificam a suas propriedades magnéticas, de transporte, etc. Estamos testando o efeito de relaxação estrutural sobre o espectro de fônons da liga amorfa $Fe_{78}Si_{13}B_{13}$ (METGLAS 2605 S-2) usando o efeito Mössbauer para determinar a temperatura característica de Debye através da variação térmica do deslocamento Doppler de segunda ordem (SODS) na faixa de 80–350 K. Os espectros Mössbauer foram ajustados com distribuições gaussianas de campo hiperfino. Numa primeira série de medidas obtivemos $\theta_D = 460(40)$ K para uma amostra virgem. Deve-se notar que, para um θ_D desta ordem, o SODS fornece uma determinação bem mais precisa que o fator $f(T)$ na faixa de temperatura considerada.

Estudo do tamanho de grão de partículas de magnetita obtidas na preparação do ferrofluido

$Fe_3O_4 + D_2O$.

RODRIGUES, K. C.; PARENTE, C. B. R.;

MAZZOCCHI, V.

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares,

IPEN-CNEN/SP

ROCCATTO, A.; GAMA, S.; CARDOSO, L.

IFGW-UNICAMP.

Amostras de ferrofluido, à base de magnetita Fe_3O_4 , que tem estrutura magnética do tipo Néel A-B, foram desenvolvidas tendo como líquido portador água pesada, visando o estudo do espalhamento magnético dessas amostras com técnicas de difração de nêutrons. A substituição de água leve por pesada, deve-se ao fato de que o hidrogênio de massa 1 tem alta seção de choque para o espalhamento incoerente de nêutrons, o que dificulta a observação do espalhamento coerente proveniente das partículas de magnetita. Entretanto, para o deutério essa seção de choque é bem mais baixa, permitindo a observação.

Durante a preparação deste ferrofluido podemos destacar três fases distintas. A primeira é a obtenção do precipitado de magnetita através de uma reação química entre cloretos férrico e ferroso sob a ação do hidróxido de amônio. A segunda é a surfactação das partículas de magnetita com o ácido dodecanóico. A terceira consiste na dispersão das partículas surfactadas em água pesada.

Técnicas diferenciadas foram utilizadas na primeira fase de preparação do ferrofluido, ou seja na obtenção dos precipitados de magnetita. A técnica usual consiste

na precipitação com a solução na temperatura ambiente. Neste trabalho, esta técnica foi modificada com a aplicação de um campo magnético (~ 1 kOe) sobre a solução e com o controle da temperatura, durante a precipitação.

Essas modificações causaram um aumento no tamanho médio dos grãos, que foi observado através da difração de raios-X, difração de nêutrons e por microscopia eletrônica.

Estudo por NMR da localização preferencial do Bi e da valência e distribuição do Pb em YIG.

CAMPOS, A. A. G.

UFMG

NOVAK, P.

Intituir of Physics - Praga - Chescoslováquia

LUETGEMEIER, H.

Institut fuer Festkoerperforschung - KFA - Juelich -

Alemanha

DOETSCH, D.

Fachbereich Physik - Universitaet Osnabrueck - Alemanha

Espectros de NMR (Spin-Eco) do ^{57}Fe em películas epitaxiais de YIG dotadas com Bi ($\text{Y}_{3-x}\text{Bi}_x\text{Fe}_5\text{O}_{12}$) ou Pb ($\text{Y}_{3-x}\text{Pb}_x\text{Fe}_{5-y}\text{O}_{12}$) foram medidos a 4,2K. No caso do Bi como substituinte, medidas da posição e intensidade das linhas satélites pertencentes ao ferro com Bi na vizinhança possibilitaram a determinação de uma localização preferencial do Bi por sítios dodecaédricos não equivalentes, o que pode ser a origem da anisotropia magnética uniaxial em YIG dotada com Bi. No caso do Pb como substituinte, comparações dos espectros NMR com aqueles de YIG dotada com Bi e In possibilitaram a identificação dos ions Pb^{2+} e Pb^{4+} assim como suas concentrações o que está intimamente relacionado com as propriedades magneto-ópticas e a absorção óptica do composto.

INFLUÊNCIA DA TEXTURA CRISTALOGRÁFICA DOS FILMES DE Cr SOBRE AS PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DOS FILMES DE Co-Cr.

WATANABE, M. M.; OPPENHEIM, I.; MISSELL, F. P.

(IFUSP)

PEREIRA, J. A. DE A. M.

(LME-EPUSP)

SCHREINER, W.; BAUNVOL, I. J. R.

(IF-UFRGS)

Filmes finos de Co-Cr-X ($X = \text{Ni}, \text{Ta}, \text{Pt}$) são utilizados em mídia de gravação magnética devido ao baixo custo de produção e alta capacidade de armazenamento de informações. As propriedades magnéticas dos filmes de Co-Cr-X podem depender da textura da superfície onde o filme é depositado. Frequentemente, um filme ("underlayer") fino (10-100 nm) de um material não magnético (por exemplo Cr) é depositado entre o sub-

trato e o filme de Co-Cr-X. Vários estudos sobre a influência da textura da "underlayer" de Cr nas propriedades do filme magnético foram realizados. Para poder contribuir para a elucidação desse problema, estudamos as condições de fabricação de filmes finos de Cr, especificamente a textura do filme em função da temperatura do substrato, do material do substrato e da espessura do filme, com o objetivo de estudar a técnica de produção de um filme com textura (200). Utilizou-se um "magnetron sputtering" (Balzers modelo BAS-450) com eletrodo RF do Laboratório de Microeletrônica da EPUSP (LME) e um canhão de elétrons do IFUSP para fabricação de filmes de Cr. Nas temperaturas entre 25° e 100° C observamos somente o pico (110), que diminui com o aumento da temperatura. Em 200° C observamos o aparecimento do pico (200). Em 350° C o pico (110) não está mais presente e só resta o pico (200). Estes resultados indicam que a textura (200) dos filmes de Cr é alcançada somente em temperaturas de substratos acima de 200° C. Apresentaremos resultados de medidas magnéticas de filmes de CoCr depositados sobre filmes de Cr com diferentes texturas cristalográficas.

Trabalho apoiado pela FAPESP, FINEP e CNPq.

INVESTIGAÇÕES DE FILMES FINOS MULTI-CAMADAS EPITAXIAIS DE FERRO POR RESSONÂNCIA FERROMAGNÉTICA

SILVA, E. C. DA

Instituto de Física - Unicamp

MECKENSTOCK, R.

Ruhr-Universität Bochum - Institut für Experimentalphysik

VI

KORDECKI, R.; PELZL, J.

Ruhr-Universität Bochum - Institut für Experimentalphysik

VI

A investigação de propriedades magnéticas de filmes finos magnéticos multi-camadas tem apresentado interesse crescente, principalmente devido à sua importância potencial em tecnologia de informação magnética e em dispositivos multi-camadas. As expressivas diferenças entre as propriedades magnéticas de filmes finos e aquelas de amostras tri-dimensionais são responsáveis pelo significado das anisotropias magnéticas que surgem. Tais anisotropias são devido à forma e às tensões mecânicas originadas por desajustes das redes cristalinas superpostas e/ou originadas por quaisquer tipos de distorções estruturais e defeitos nos filmes epitaxiais. Entre as diversas técnicas experimentais utilizadas nessas investigações a Ressonância Ferromagnética (RFM) é uma das mais expressivas. Neste trabalho utilizamos a RFM na análise magnética de uma amostra com duas camadas monocristalinas epitaxiais de ferro (10 nm e 20 nm) separadas por uma camada de prata (150 nm). Foi possível evidenciar a alta qualidade da amostra produzida e comparar o

comportamento de ambas as camadas de ferro relativamente às suas diferentes interfaces, isto é, o substrato de GaAs(100) e a camada de prata. Um modelo teórico foi construído com base em uma expressão para a densidade de energia livre do sistema e levando-se em conta as condições de ressonância e de equilíbrio do vetor magnetização. O ajuste dos dados experimentais permite a obtenção de parâmetros importantes não só para a análise das propriedades magnéticas mas também para a análise da situação mecânica da amostra como é o caso das eventuais tensões que advêm de desajustes de rede cristalina entre as camadas que compõem a amostra. Neste caso nossos resultados indicaram a presença de tensões mecânicas para a camada de ferro crescida sobre o substrato as quais não foram observadas para a camada superior, crescida sobre a camada de prata.

**MEDIDAS DE PERMEABILIDADE
MAGNÉTICA INICIAL NO
DESENVOLVIMENTO DO ESTADO
NANOCRISTALINO EM FITAS AMORFAS**
SAENGER, J. F.; KNOBEL, M.; SINNECKER, J. P.;
TURTELLI, R. S.
UNICAMP

Foram descobertos, recentemente, novos materiais nanocristalinos que apresentam excelentes propriedades magnéticas doces, com grande impacto tecnológico. A composição típica desses materiais é $Fe_{73.5}Cu_1Nb_3Si_{13.5}B_9$ e são produzidos a partir da liga metálica de mesma composição, no estado amorfo, submetida a um tratamento térmico adequado. Esses materiais têm sido alvo freqüente de estudos, porém, a explicação para tais propriedades magnéticas ainda hoje não está completamente esclarecida. Sabe-se, no entanto, que estão relacionadas à formação de uma fase nanocristalina (grãos da ordem de 10nm distribuídos aleatoriamente em uma matriz amorfa) após o tratamento térmico padrão (60 min a 540°C). Este trabalho é um estudo sobre o desenvolvimento do estado nanocristalino em fitas amorfas de mesma composição, produzidas com diferentes taxas de resfriamento (diferentes graus de desordem topológica). Foram realizadas medidas de permeabilidade magnética inicial nessas fitas no estado amorfo e após tratamentos térmicos sucessivos a 540°C por 10, 20, 30, 40, 50 e 60 min. A permeabilidade magnética inicial aumenta consideravelmente após a formação da fase nanocristalina. Os resultados indicam a influência do estado amorfo inicial no nanocristalino subsequente.

**FILMES DE $Pb_{1-x}Fe_x$ PREPARADOS POR
CONDENSAÇÃO DE VAPOR**
PASSAMANI, E. C.; BAGGIO-SAITOVITCH, E.; XIA,
S. K.

CBPF
LARICA, C.

Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, ES

Produzimos ligas desordenadas de $Pb_{1-x}Fe_x$ em ampla faixa de concentração ($x = 0.10$ a 0.70) sob a forma de filmes finos pela técnica de "Condensação de Vapor" sobre substrato de Kapton mantido nas temperaturas de 20, 200 e 300 K. Medidas dos espectros hiperfinos magnéticos e paramagnéticos por efeito Mössbauer foram realizadas IN SITU e EX SITU à várias temperaturas entre 4.2 e 350 K.

Para as amostras com baixas concentrações de ferro ($x < 0.20$), depositadas a 20 K, observamos a existência de uma componente paramagnética, singleto, superposta a uma distribuição de campos magnéticos hiperfinos com valores de IS em torno de zero. O singleto, com deslocamento isomérico $IS = 0.6$ mm/s, indica a ocorrência de uma liga homogênea diluída enquanto a distribuição de campos magnéticos hiperfinos está associada a uma distribuição de tamanhos de partículas pequenas de ferro representadas por um valor de IS próximo ao do ferro metálico. Para a amostra de $x = 0.40$ é observado apenas distribuição de campo com IS próximo de zero.

Em todas as amostras preparadas à 200 e à 300 K, as distribuições de campos magnéticos hiperfinos observadas possuem IS em torno de zero, indicam a formação de partículas pequenas de ferro metálico e a não ocorrência de liga Fe/Pb.

As amostras medidas a 300 K após a exposição ao ar, mostraram dubletos com $IS = 0.3$ mm/s e $QUA = 0.8$ mm/s, enquanto medidas a 4.2 K mostraram distribuições de campos magnéticos hiperfinos com valores de pico das distribuições em torno de 49 T, indicando a completa oxidação das amostras.

**FILMES DE Fe/Y PREPARADOS POR
CONDENSAÇÃO DE VAPOR A 20 K**

RODRÍGUEZ, V. A. P.; PASSAMANI, E.;
BAGGIO-SAITOVITCH, E.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Neste trabalho produzimos filmes de Fe/Y com baixa concentração de ferro pela condensação simultânea do vapor dos dois metais sobre um substrato mantido a temperaturas próximas à 20 K. Medidas de espectroscopia Mössbauer das amostras, no intervalo de 7 a 300 K permitem caracterizar o íon de ferro neste sistema quanto à sua simetria local e as propriedades magnéticas sensíveis ao campo hiperfino transferido. A técnica de congelamento de vapor tem contribuído para demonstrar que as propriedades do amorfo podem ser altamente sensíveis às condições e métodos de preparação, refletindo a formação de diferentes estruturas locais. Estas informações serão comparadas com estudos de implantação iônica α de ^{57}Fe em Y, uma vez que estes dois metais não apresentam miscibilidade no diagrama

de equilíbrio de fase. Por causa da instabilidade do sistema às condições ambientais, térmicas e químicas, todas as medidas foram feitas "in situ".

*D. Riegel a ser publicado.

CURVAS DE HISTERESE TMOKE NA DIFRAÇÃO DE BRAGG EM REDES BIDIMENSIONAIS

GEOFFROY, O.; GIVORD, D.; OTANI, Y.; SCHLENKER, M.; SOUCHE, Y.

Laboratoire Louis Néel, CNRS, Grenoble, França
PANNETIER, B.

C.R. Très Basses Temperatures, CNRS, Grenoble, França
SANTOS, A. D. DOS

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasil

Redes microscópicas periódicas de partículas ferromagnéticas são utilizadas no estudo de questões fundamentais, como a interação dipolar entre partículas. Quando este tipo de estrutura é iluminada por um feixe luminoso coerente, observamos uma figura de difração de Bragg. As direções dos máximos de difração são determinadas pela geometria da rede, enquanto suas intensidades variam com o campo magnético aplicado. Medimos para vários ordens de difração n , a variação da intensidade luminosa $\Delta I_n(H)$ em função do campo magnético aplicado. Essas curvas de histerese foram medidas usando-se um magnetômetro à "Transverse Magneto-optical Kerr Effect" (TMOKE). As curvas de histerese assim obtidas apresentam comportamentos atípicos, como inversões no sentido do ciclo de histerese, os quais são consequência da interferência entre as difrações de caráter geométrico e magnético. A análise conjunta de vários ordens de difração nos fornecem uma nova maneira de obter informações sobre a estrutura de domínios submicroscópica presente nas partículas magnéticas. Apresentaremos os resultados das simulações realizadas, bem o modelo teórico desenvolvido. Trabalho parcialmente financiado pela FAPESP e Projeto USP/BID.

Magnetic Properties of Metal Amino Acid Compounds.¹

CALVO, R.

INTEC (CONICET) and Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas (UNL), Santa Fe, Argentina

We review studies on the magnetic interactions and properties of a wide group of metal-amino acid complexes. This line of research is motivated by the value of these compounds as model systems for exchange interactions in metalloproteins, and by the intrinsic interest on their magnetic behavior. We will discuss mainly properties of Cu(II) complexes and describe comparatively results obtained by electron paramagnetic resonance (EPR) and in measurements of the specific heat

$[C_m]$, the magnetization $[M]$, the magnetic susceptibility $[\chi]$ and in structural determinations with X-rays. We have studied complexes with structures of the molecular type, where the Cu(II) ions form molecules type $Cu(aa)_2$, with two amino acids (aa), and in complexes of the polymeric type, with chains Cu-aa-Cu-aa-Cu-aa-Cu. EPR in the paramagnetic phase of single crystal samples allows to study the spin dynamics. The variation with magnetic field direction of single crystal EPR spectra can be related to the magnitude of the exchange interactions within copper spins and the changes of the dimensionality of their dynamics. By this method the exchange coupling between coppers connected by superexchange bridges of up to five diamagnetic atoms have been obtained from EPR data at room temperature. Measurements of the dependence with temperature (T) and field (H) of $M(H,T)$, and with T of $\chi(T)$ and $C_m(T)$ at very low temperatures allowed us to model the magnetic behavior of several compounds. Short range magnetic order at T about 1K has been observed in compounds with copper ions in chains, with $\chi(T)$ and $C_m(T)$ following a characteristic behavior. Transitions to phases with long range magnetic order have been observed. We will analyze the magnetic behavior of the compounds and discuss the correlations observed between the magnitudes of the exchange interactions and their molecular structures. The usefulness of this information for the magnetic characterization of proteins will be discussed.

1. Work supported by CONICET and by Fundación Antorchas of Argentina.

Evidência de Tunelamento Quântico da Magnetização em Multicamadas de Fe/Ag.

NOVAK, M. A.

IF-URFJ e CRTBT-CNRS

SAMPAIO, L. C.; WEGROWE, J. E.; BARBARA, B.

Lab. Louis Néel - CNRS

THOLENCE, J. L.

CRTBT-CNRS

Medidas de relaxação magnética foram utilizadas para determinar a natureza do decaimento da magnetização em multicamadas de Fe/Ag após uma variação de campo magnético aplicado. A altas temperaturas a relaxação é termicamente ativada e dependente da temperatura. A baixas temperaturas, há uma mudança de regime abaixo de uma temperatura de crossover da ordem de 5 K onde observa-se que a viscosidade magnética passa a ser independente da temperatura o que evidencia que a relaxação se processa por tunelamento quântico das paredes de Bloch. Observou-se igualmente uma mudança de comportamento na magnetização remanente extrapolada a $t=0s$, abaixo da mesma temperatura de crossover. Resultados análogos em bicamadas magnéticas orientadas de Co/CoCu/Co tamb'em serão apresentados.

FORMAÇÃO DE FASES INTERMETÁLICAS POR DIFUSÃO EM ESTADO SÓLIDO

GARCIA, V. H.

Depto. de Física/UDESC

SCHERER, C.

Instituto de Física/UFRGS

Em uma bicamada de elementos metálicos A e B que se misturam por um processo puramente difusivo, ap/ós um tempo suficientemente longo, podem aparecer regiões da amostra com concentrações constantes de A e B, cujos valores dependem do perfil inicial da composição assim como das afinidades químicas dos elementos. Estas regiões são interpretadas como fases intermetálicas de estequiometrias bem definidas. A formação destas fases deve-se à competição entre uma "força química" e a "força difusiva". Esta "força química" pode ser representada pelo gradiente de uma certa função da concentração, que podemos identificar com o potencial químico. Construímos uma equação de difusão modificada que descreve a dinâmica do processo de formação de fases por difusão. Os resultados numéricos apresentam, para potenciais químicos convenientes, regiões de fases surpreendentemente bem definidas, com separação muito nítida entre as mesmas. As fases encontradas não são totalmente estacionárias na versão unidimensional do modelo, mas admitem soluções estacionárias no caso tridimensional.

INVESTIGATION OF TEMPERATURE-CURRENT FILAMENTS IN METALS AT HIGH MAGNETIC FIELD

MORGOON, V.

USP, Instituto de Física, DMFT, São Paulo

KADIGROBOV, A. M.

Institute for Low Temperature Physics and Engineering, Ukraine. Academy of Science, Kharkov 310164, Ukraine

In present work temperature-current filaments were experimentally detected and theoretically investigated in metals (Sn, Cd, Pb) in high transverse magnetic fields at helium temperature in conditions of Joule self-heating of samples by direct current. The possibility of observation in metals domains and filaments was predicted by one of the authors of this article [A.M.Kadigrobov, A.I.Slutskin Zh.Eks. Teor.Fiz. 87, N4, 1314 (1984)] S-image amper-volt characteristics are observed in all investigated samples, in particular for Sn in [V.A.Bondar et al. Metallofizika 13(11), 49 (1991)]. Generation fixed in time and space of filaments is observed in the samples with width more then thermal length. The connections of transport properties of metals and filament characteristics were found. The conditions for filament movement are discussed in the report.

LEI DE ESCALA NA MAGNETORESISTÊNCIA DE LIGAS

QUASECRISTALINAS $Al : Mn$

MARTINS, C. S.; MACHADO, F. L. A.

Departamento de Física, UFPE, 50732-910 Recife, PE

A condutividade elétrica é ainda uma das propriedades das ligas quasicristalinas que não apresentam uma explicação satisfatória. Ao contrário de outras propriedades magnéticas investigadas anteriormente [Solid State Commun. 79, 469 (1991)] onde um comportamento de vidro de spins é observado, a magnetoresistência nos quasicristais na faixa de campos magnéticos e temperaturas medidos ([Phys. Rev. B 38, 8088 (1988)] não pode ser explicada com a dependência típica de vidros de spins canônicos ($\Delta\rho/\rho \propto M^2$) [Phys. rev. B 28, 2750 (1983)]. Neste trabalho investigamos a lei de escala para a magnetoresistência com a magnetização. Nas faixas de temperatura e campo magnético investigadas, observamos um comportamento $\Delta\rho/\rho \propto M^3$. Essa dependência pode ser explicada considerando termos de mais alta ordem na dependência de $\Delta\rho$ com M . Os parâmetros de ajuste obtidos são comparados aos medidos por outras técnicas.

Microestrutura e Propriedades Magnéticas de ligas R_2Fe_{17} R = "Mischmetal"

ARAÚJO, R. C. DE; OLIVEIRA, J. DE; CABRAL, F.

A. O.

UFRN

Os compostos binários R_2Fe_{17} (R = Elemento Terra Rara) apresentam duas desvantagens. Primeiro, suas temperaturas de Curie são muito baixas e segundo, esses compostos não apresentam anisotropia uniaxial a temperatura ambiente. Conseqüentemente, eles não servem para aplicações como ímãs permanentes. Recentemente, Coey e Sun descobriram que os compostos R_2Fe_{17} absorvem grandes quantidades de Nitrogênio e formam nitretos do tipo $R_2Fe_{17}N_x$. Os átomos de nitrogênio crescem drasticamente a temperatura de Curie e a magnetização de saturação do composto, e modificam a anisotropia magnetocristalina. O efeito mais significativo acontece para o composto $Sm_2Fe_{17}N_x$. No presente estudo ligas R_2Fe_{17} (R = "Mischmetal") foram preparadas por fusão a arco a partir de $Fe99,99\%$ de pureza e de um "Mischmetal" rico em Ce , para uma posterior nitrogenação. A relevância deste trabalho reside no fato de se substituir o elemento puro Sm , por uma matéria prima nacional (o "Mischmetal" de Terra Rara) na tentativa de se obter um material barato para aplicação como ímã permanente. Essas ligas, com pequenas adições de Sm e Nd podem ser representadas como $[(Sm, Nd)_{1-x}R_x]_2Fe_{17}$. Resultados preliminares mostram que na condição de como fundidas elas apresentam uma microestrutura que consiste de Fe primário e do composto R_2Fe_{17} . Medidas de susceptibilidade AC mostram que a temperatura de Curie cresce de $120^\circ C$ para $x = 0,68$ a $870^\circ C$

para $x = 0,16$. O efeito do tratamento térmico na microestrutura e nas propriedades magnéticas será aqui discutido.

^oJ.M.D Coey and H. Sun, J. Magn. Magn. Mater. 87, L251 (1990).

**ESTUDO DAS PROPRIEDADES
MAGNÉTICAS EM FUNÇÃO DA
INTERDIFUSÃO NAS INTERFACES DE
MULTICAMADAS DE Co/Pd
IMPLANTADAS COM ÍONS DE Ar.**

SCHHELP, L. F.; VASCONCELLOS, M. Z.; SCHMIDT, J. E.

Instituto de Física-UFRGS

A largura da região interdifundida nas interfaces de multicamadas de Co/Pd submetidas a implantação iônica é determinada pelo modelamento das multicamadas e simulação de seus difratogramas de RX. Este modelo contempla propriedades estruturais como tamanho de grão, flutuações na largura das camadas e interdifusão nas regiões de interface. Ele é aplicado para descrever a evolução das interfaces de Co/Pd bombardeadas com doses inferiores a 1×10^{15} íons/cm². Propriedades magnéticas como magnetização de saturação, remanência, campo coercivo e anisotropia foram medidas para multicamadas de Co/Pd [(Co 10 A+Pd 40 A)x20] previamente submetidas a implantação iônica. A magnetização de saturação, ao contrário do que ocorre com outras multicamadas metálicas, aumenta a medida que aumenta a região de interdifusão na interface. Um modelo simples que explica o comportamento da magnetização de saturação é apresentado.

**Metal Fatigue Evaluation by Thermally
Stimulated Exoelectron Emission**

CHUBACI, J. F. D.; WATANABE, S.

*Laboratório de Dosimetria, Departamento de Física
Nuclear, Instituto de Física, Universidade de São Paulo*

KATAGIRI, K.

Faculty of Engineering, Iwate University, Japan.

YAMAMOTO, T.

*Institute of Scientific and Industrial Research, Osaka
University, Osaka, Japan.*

Thermally stimulated exoelectron emission (TSEE) has been used to evaluate fatigue cycled damage to aluminum rods and to stainless steel test-piece coated with Al₂O₃ thin films. The fatigue process produces micro cracks in the sample's surface increasing the actual metal surface area. Annealing the aluminum samples may cause a crystallization of the amorphous film of the oxidized surface layer from where the exoelectron emission may have its origin. For the stainless steel samples a thin film coating was done by plasma-CVD (chemical vapor deposition) prior to the fatigue process, being an

indirect method for the fatigue damage evaluation. Positron lifetime study also was used to evaluate the fatigue damage to the stainless steel samples. Both TSEE and positron lifetime measurements have their origin from surface layers of the material. TSEE experiments were done in a high vacuum system (10^{-6}) at a linear heating rate up to 550°C. The samples were fatigue cycled at 1800 cycles/min. The fatigue cycled aluminum samples were thermally annealed at 560°C during one hour and then X-ray irradiated for the TSEE measurement. Positron lifetime measurement was done for as-fatigued stainless steel samples and for TSEE these samples were X-ray irradiated before experiment. For the aluminum samples the results showed that the TSEE response increased with the number of fatigue cycles. For the stainless steel the results also showed that the TSEE response increased with the number of fatigue cycles and indicated a close correlation between both methods applied. Further experiments are under development to establish a reliable and practical method for fatigue damage evaluation.// (JFDC partially supported by CNPQ).

Sistemas Eletrônicos Fortemente Correlacionados (MMM) - 20/05/93

**SUSCEPTIBILIDADE DE DUAS
IMPUREZAS MAGNÉTICAS EM MEIO
METÁLICO**

OLIVEIRA, W. C. DE; MELLO, J. L. N. DE;
OLIVEIRA, L. DE

Instituto de Física e Química de São Carlos-USP

Na última década, no limite de alta diluição, o problema das ligas magnéticas diluídas foi praticamente resolvido por cálculos essencialmente exatos das propriedades físicas de uma impureza magnética em meio metálico^a. O interesse na área atualmente gravita em torno de sistemas estendidos ou de aglomerados de impurezas. Um elemento importante destes, um ingrediente ausente em modelos de uma impureza, é a competição entre a interação RKKY e a tendência de cada impureza de se acoplar com os elétrons ao seu redor. Este trabalho se propõe a calcular uma propriedade física sensível a tal competição, a susceptibilidade magnética de duas impurezas em um metal, com base na diagonalização de um Hamiltoniano de Falicov-Kimball-Ramirez. No modelo, cada impureza se representa por um orbital com energia independente da ocupação que se acopla à banda metálica e interage eletrostaticamente com ela por um potencial localizado cujo sinal depende da ocupação. Embora seus elétrons não tenham spin, o modelo equivale matemati-

camente ao de Kondo para duas impurezas magnéticas em metal. Em especial, a ocupação de cada orbital no modelo de Falicov-Kimball-Ramirez equivale à componente z do spin de cada impureza no modelo Kondo, e uma transição de carga no primeiro, a uma colisão com inversão de spins no segundo. A diagonalização do Hamiltoniano pelo método do grupo de renormalização numérico^b e a equivalência entre os dois modelos serão discutidas e resultados numéricos preliminares para a susceptibilidade em função da temperatura serão apresentados.

^aP. Schlottman, Phys. Rep. 181, 1 (1989)

^bK. G. Wilson, Rev. Mod. Phys. 47, 773 (1975); L. N. Oliveira, Braz. J. Phys. 22, 155 (1992)

Metal-Insulator Transition in the Extended Hubbard Model

LAGOS, R. E.

Departamento de Física, IGCE - UNESP, Rio Claro

LARA, G. A.

Departamento de Física, PUC-RJ

CABRERA, G. G.

IFGW-UNICAMP

The Extended Hubbard Model (including the dynamical term known as correlated hopping) is studied within a Cluster Effective Medium Approach, yielding an effective non-local Self-energy Function. We compare the several Hubbard's solutions to his model with particular solutions of our model. This comparison illustrates in a clear and intuitive fashion the several approximations involved (therefore their limitations) and allow us to quantify the degree of accuracy involved in the several Effective Medium Approaches to the Model (essentially replacing dynamical by quenched averages schemes). A first order Metal-Insulator Transition is found for the zero temperature, paramagnetic phase, half-filled band case. This novel theoretical result (in agreement with Mott's conjecture and experimental evidence) is due to both the method used and the correlated hopping term^a.

^aR. E. Lagos, G. A. Lara and G. G. Cabrera, accepted in Phys. Rev. B.

MOMENTUM DISTRIBUTION FUNCTION OF THE TWO-DIMENSIONAL HUBBARD MODEL

BOERNER, W.; KELLER, J.

University of Regensburg - Germany

LEAL, C. E.

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE

We have studied the application of the formalism of Cumulants on strongly correlated systems. Starting from a high temperature cumulant expansion, we have calculated the K-space distribution function for the case of

two dimensional Hubbard system. We have also investigated the two limiting cases, namely the weak coupling case ($U=0$) and the infinite- U limit as function of the chemical potential. In the case of vanishing Coulomb repulsion the exact result is reproduced for all temperatures; whereas for infinite Coulomb repulsion reliable results have so far been obtained only for high temperatures. The numerical results are compared with recent results in the literature.

Effective Vertex Function for an Electron-Hole Pair at Very Low Energy Scale

FERRAZ, A.

Centro Internacional de Física da Matéria Condensada (CIFMC) Universidade de Brasília

OHMURA, Y.

Tokyo Institute of Technology

In a previous work (1) we showed that the irreducible electron-hole scattering K is singular for sufficiently large Coulomb interactions. We did this summing up a special series of skeleton diagrams to infinite order. In the long wavelength limit, at low energy scales, the K function has a purely damped excitation mode. This, we argued, reflects the instability of electronic ground state and is indicative of the fact that quasiparticle are no longer well defined quantum states. In the present paper we show explicitly that the leading term for K in second order approximation is indeed the corresponding inverted ladder diagram considered earlier in our series expansion. This diagram becomes dominant in the presence of very low energy electron-hole pair excitations. Our results clearly illustrates the key role played by a low energy scale parameter in the onset of instability in the strongly correlated electronic ground state.

(1)- A Ferraz and Y Ohmura - Mod Phys Lett B6 1063 (1992)

Sistemas Fortemente Correlacionados (MMM) - 20/05/93

RENORMALIZED LINKED-CLUSTER EXPANSION FOR STRONGLY CORRELATED FERMION SYSTEMS

BARTKOWIAK, M.

ICCMF, University of Brasília

CHAO, K. A.; HALVORSEN, E.

Division of Physics, The University of Trondheim (NTH), Norway

We demonstrate that the linked-cluster expansion (LCE) can be constructed and used in practice to study systems of strongly correlated fermions, just as for the case of lattice spin models. Based on the LCE, and

using the Wick theorem for Hubbard operators we generate high-temperature series expansion for the Hubbard model up to the fourth order and clarify existing in the literature discrepancies. Next, we show that a mean-field-type symmetry-breaking approximation for correlated fermions can be constructed by performing vertex renormalization (VR) already in the second order of the LCE. Finally, in the limit of infinite spatial dimensions d we sum up exactly the renormalized diagrams for the grand-canonical potential of the Hubbard model and, using the diagrammatic technique for Hubbard operators, we construct explicitly an approximate VR. We present solutions for the case of half-filled energy band. They are valid for arbitrary temperatures and become exact when $d \rightarrow \infty$ for both large U limit and for $U = 0$.

SCALING APPROACH TO HEAVY FERMIONS: PRESSURE EFFECTS IN $CeAl_3$

CONTINENTINO, M. A.; JAPIASSÚ, G. M.

UFF

TROPER, A.

CBPF

We discuss experimental results on $CeAl_3$ under external pressure, using a recently proposed scaling theory of heavy fermions systems^a. In this theory, we make use of the properties of the zero temperature fixed point and show unambiguously the existence of a new temperature scale T_c , in the noncritical region of the phase diagram $((J/W)_c, (J/W)_c)$, which is lower than the single-impurity Kondo temperature T_K and is characteristic of the lattice. We have identified this crossover temperature T_c with the coherence temperature which marks the crossover from a paramagnetic state with local moments to a Fermi liquid regime with decreasing temperature. We obtained an expression for T_c in terms of the Kondo lattice parameters and a crossover exponent $\phi_t = \nu z$. In this article, specific heat, resistivity, and electron spin resonance (ESR) data at different pressures are examined to obtain relations between the critical exponents characterizing the quantum behavior of this system^b. We observe that the critical exponents governing the behavior of $CeAl_3$ belong to the same class of universality of those obtained for $CeRu_2Si_2$ ^c.

^aM.A.Continentino, G.M.Japiassú, and A.Troper, Phys. Rev. B39, 9734 (1989).

^bM.A.Continentino, G.M.Japiassú, and A.Troper, to be published in J. Appl. Phys. 73 (10), 15 May (1993).

^cM.A.Continentino, J. Phys. II, 693 (1991).

Approximate Solution of the Heisenberg Antiferromagnet in a Triangular Lattice

MONTENEGRO, M.; GOTTLIEB, D.

Universidad de Chile

The anisotropic antiferromagnetic Heisenberg model in a triangular lattice is solved approximately using the paired non magnetic excitation theory (PNME) which was generalized in order to apply to non bipartite lattices. The ground state energy E_g , eigenfunction and excitations energies are obtained for arbitrary spin and anisotropy. In particular, for the isotropic case and spin 1/2, $E_g = -0.172$. This value corresponds to a 6% error when compared with the exact value obtained numerically from small cluster calculations and compares successfully with energies obtained by other methods. A parametric phase transition for ordered-disordered ground state is obtained as function of the spin and anisotropy.

CORREÇÕES QUÂNTICAS PARA A MASSA DO MÁGNON EM UM ANTIFERROMAGNETO DE PLANO FÁCIL UNIDIMENSIONAL.

GARRIDO, M. O.; PIRES, A. S. T.

UFMG

Um sistema antiferromagnético, unidimensional e anisotrópico, na presença de um campo magnético externo perpendicular à direção da cadeia pode ser descrito pelo Hamiltoniano

$$H = \sum_n (\vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1} + D(S_n^z)^2 - g\mu_B h S_n^z)$$

Desenvolvemos o Hamiltoniano em potências de $(S_n^z)/S$ e Ψ_n , escrevendo os operadores de spin S_n^z e S_n^y na representação de Villain. Levando esses operadores no Hamiltoniano acima, obtemos:

$$H = E_0 + H_0 + H_1 + H_2 + \dots$$

onde E_0 é a energia do estado fundamental, H_0 tem termos de dois operadores, H_1 três operadores, H_2 quatro operadores, etc. Em nosso trabalho consideramos apenas os termos H_0 e H_2 , pois eles são os mais importantes para a renormalização da massa do mágnon, isto é, tomamos

$$H = H_0 + H_2$$

Tomamos a transformada de Fourier do Hamiltoniano e escrevemos os operadores Ψ_q e S_q^z em termos dos operadores criação e aniquilação de mágnons e, em seguida, aplicamos o operador ordenamento normal. Assim, escrevemos o Hamiltoniano efetivo que inclui todas as correções de primeira ordem. Calculamos as frequências renormalizadas $\omega(q)$. O valor de $\omega(q = 0)$ nos dá a massa do mágnon. O efeito das correções quânticas renormalizando a massa do mágnon, pode ser considerado como uma renormalização do parametro de anisotropia D . Comparamos nossos resultados com cálculos feitos usando técnicas mais elaboradas, e com dados experimentais.

**CORREÇÕES QUÂNTICAS PARA O
ESTADO LIGADO DE UM
ANTIFERROMAGNETO
UNIDIMENSIONAL.**

RODRIGUES, S. G.; PIRES, A. S. T.
UFMG

Um antiferromagneto unidimensional com duas anisotropias descrito pelo Hamiltoniano

$$H = \sum_n (\vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1} + b(S_n^x)^2 + \delta(S_n^z)^2)$$

apresenta dois tipos de excitações importantes: ondas de spin (magnons) e sólitons. No estudo de magnons escrevemos S_n^α em termos de operadores destruição e criação, levamos no Hamiltoniano e desenvolvemos em termos destes operadores escrevendo: $H = H_0 + H_1 + \dots$. O termo H_0 é um termo do tipo oscilador harmônico descrevendo as excitações de ondas de spin. Os outros termos podem ser tratados como perturbações, usando a técnica dos diagramas de Feynman. No estudo de sólitons tratamos H na aproximação clássica, obtemos equações de movimento em termos de ângulos polares θ e ϕ , na forma $\phi = \phi_s + \xi$ onde ϕ descreve a solução do tipo sóliton e ξ a solução de ondas de spin; levando nas equações de movimento clássicas, obtemos além dos estados de magnons discutidos anteriormente, um estado de magnon ligado, com energia não nula. Este estado contribui para o cálculo das funções termodinâmicas e em princípio pode ser detectado experimentalmente. O objetivo deste trabalho foi o de estudar correções quânticas para este magnon ligado. Para isto escrevemos a função ξ dada acima como $\xi = \xi_b + \xi_s$, onde ξ_b representa o estado ligado e ξ_s os outros estados. Tratamos apenas de ξ_b , $\xi_b = f(z)(b + b^\dagger)$, onde $f(z)$ depende da estrutura do sóliton. Estudamos a função de Green para ξ_b usando a técnica de diagramas de Feynman, considerando apenas o primeiro termo no desenvolvimento (diagramas de um loop). O pólo da função de Green assim calculada nos forneceu a energia renormalizada do estado ξ_b .

Cálculo da Densidade Espectral do Modelo de Anderson de Duas Impurezas usando uma nova abordagem do Método de Grupo de Renormalização.

SILVA, J. B. DA; OLIVEIRA, L. N. DE
Universidade de São Paulo

O método de Grupo de Renormalização numérica introduzido por K. G. Wilson se baseia na discretização logarítmica da banda de condução através do parâmetro Λ^{-n} . Cálculos recentes mostram que os resultados obtidos para Λ grande produzem um erro proporcional a $\exp(-\pi/\ln\Lambda)$. Neste método o tempo computacional cresce com $1/\ln\Lambda$, havendo um compromisso entre a precisão e tempo computacional. Neste trabalho traba-

lho consideramos o parâmetro de discretização dependente do momentum associado ao orbital da impureza localizada num sítio da rede. Utilizamos este método para calcular com maior precisão a densidade espectral do modelo de Anderson com duas impurezas. Neste caso o Hamiltoniano sem correlação pode ser separado em duas partes (par e ímpar), o parâmetro de discretização será diferente para cada parte. Este método permite trabalhar com valores grandes de Λ , reduzindo o tempo computacional, e com erros menores que os obtidos anteriormente.

**ESTRUTURA ELETRÔNICA DO MODELO
DE HUBBARD DE TRÊS BANDAS NA
APROXIMAÇÃO HUBBARD-I**

BEATRICI, A.; GUSMÃO, M. A. C.
UFRGS

O modelo de Hubbard estendido considera, de uma forma simples, as principais interações eletrônicas de rede $Cu - O_2$ existentes nos supercondutores de alta temperatura crítica. Este modelo descreve tais redes através de três bandas *tight-binding*, correspondentes ao orbital $d_{x^2-y^2}$ do Cobre e aos orbitais p_x e p_y dos Oxigênios, com hibridizações (*hoppings*) $d - p_x$ e $d - p_y$. O modelo inclui ainda a repulsão coulombiana local para todos os sítios da rede e também entre vizinhos. Tratando exatamente a parte local e perturbativamente o *hopping* e a interação coulombiana entre sítios vizinhos, calculamos a densidade de estados de uma partícula na aproximação que considera apenas diagramas do tipo *cadeia* para as funções de Green, utilizando uma autoconsistência tipo Hubbard I. Estudamos o efeito das interações (locais e entre vizinhos), bem como o da variação do número de partículas (*doping*) na estrutura de bandas, investigando a existência e natureza de uma transição metal-isolante. São avaliados os casos de uma rede $Cu - O_2$ paramagnética e antiferromagnética, esta última com momentos magnéticos localizados nos sítios de Cobre. Os resultados são comparáveis com os obtidos na diagonalização de *clusters* pequenos ou por teoria de *bosons escravos*.

**ESTUDO DE DUAS IMPUREZAS NO
HAMILTONIANO DE ANDERSON.**

SIMÕES, A. S. DA R.; IGLESIAS, J. R.
UFRGS

ARISPE, J.; COUBLIN, B.
Université Paris-Sud, França

Em compostos de Ce ou ligas concentradas, há uma grande competição entre a interação RKKY e o efeito Kondo, resultando ou num estado fundamental não magnético, como no caso de uma simples impureza Kondo, ou num estado magneticamente ordenado a baixas temperaturas. Muitos compostos de Ce tem sido encontrados experimentalmente como magneticamente

ordenados ($CeAl_2$, CeB_6 ...) ou como tendo um comportamento não magnético ($CeAl_3$, $CeCu_2Si_2$...) ou ainda num estado supercondutor como no $CeCu_2Si_2$ e ainda em sistemas de Urânio. Porém, experimentos recentes de difração de neutrons evidenciaram a existência de correlações magnéticas de curto alcance num composto de Ce o qual não apresentam nenhuma ordem de longo alcance (J.M.Mignot et al, Physica B 163, 611 (1990) e referências). O estudo de duas impurezas Kondo no modelo de Anderson tem sido ainda estudado em detalhes, primeiro porque é um passo em direção ao problema de rede, ainda não resolvido, e segundo porque nos permite o estudo das correlações magnéticas de curto alcance. Dentro deste prisma, apresentamos um estudo do problema de duas impurezas dentro de um modelo atômico de dois átomos, descrito pelo Hamiltoniano de Anderson. Apresentamos os resultados analisando a susceptibilidade magnética e a função de correlação obtidos em função de diferentes parâmetros do problema.

INTERAÇÃO ANISOTRÓPICA MEDIADA POR HIBRIDIZAÇÃO EM COMPOSTOS DE CÉRIO.

LÍBERO, V. L.

IFQSC-USP

Cox, D. L.

Ohio State University - USA

É bem conhecido que certos compostos a base de cério mostram comportamento magnético não usual, tais como forte anisotropia magnética favorecendo a direção $\langle 100 \rangle$ e transições de fase para ordenamento tipo-I na temperatura de Neel ou para tipo-IA em temperaturas mais baixas, como é o caso de $CeBi$. Cooper e Siemann^a tem sugerido que a interação anisotrópica entre pares de íons de cério mediada pela hibridização com elétrons da banda de condução desempenha papel fundamental. Contudo, o formalismo de Cooper é válido apenas no limite assintótico da separação entre os íons o que implica que apenas as componentes $\pm 1/2$ do momento angular total $J = 5/2$ dos íons de cério contribuem. Nós generalizamos o formalismo de Cooper e Siemann para incluir todas as componentes do momento angular total, calculando exatamente as integrais de RKKY para qualquer separação entre os íons. Nossa conclusão é que em função da separação iônica as componentes $\pm 3/2$ ou $\pm 5/2$ podem ser até mais importantes para a interação do que as $\pm 1/2$ consideradas por Cooper. Nós mostramos também que dentro desse formalismo efeitos de superexchange devem ser incluídos para se prever as estruturas magnéticas observadas.

COMPLETICIDADE NO MODELO DE ANDERSON PERIÓDICO.

FIGUEIRA, M. S.

UFF

FOGLIO, M. E.

UNICAMP

As rêdes de terras-raras anômalas são estudadas no contexto do Hamiltoniano de Anderson Periódico [1],[2]. As funções de Green à temperatura finita, são obtidas através de uma expansão perturbativa cumulante na hibridização. A partir desta expansão é construída uma aproximação para os propagadores, que incorpora cumulantes de no máximo quarta ordem (Aproximação do laço). Como esta aproximação não satisfaz a relação de completude dos elétrons localizados, é incluída uma renormalização *ad hoc* nos números de ocupação destes elétrons.

São apresentados resultados para os números de ocupação e para a energia livre de Helmholtz no limite de banda nula. Para testar a validade da renormalização, estes resultados são comparados com a solução exata do Hamiltoniano de Anderson neste limite. //

[1] G. Martinez, Tese de Doutorado, UNICAMP, (1962).

[2] M. S. Figueira e M. E. Foglio - XIII ENFMC - 157, (1990), XIV ENFMC - 242, (1991), XV ENFMC - 236, (1992). //

Trabalho financiado pelo CNPQ e PICD-CAPEES.

The Peierls-Hubbard Model: A Dynamical Effective Field Approach

STEIN-BARANA, A. C. M.; LAGOS, R. E.

Departamento de Física, IGCE - UNESP, Rio Claro

LARA, G. A.

Departamento de Física, PUC-RJ

An Effective Medium Approach is developed for the Peierls-Hubbard Model. Effective self-consistent fields are introduced to mimic both the electron and phonon many body contributions, and consider the zero temperature case. We solve for the simplest case, namely for a diagonal electron-phonon coupling to an intramolecular mode. In a preliminary stage we solve in a coupled fashion the electronic correlation via a Hubbard-I scheme (non-selfconsistent) and the electron-phonon coupling via a Dynamical Coherent Potential Approximation. We develop the general formalism, compute several observables (densities of states, spin and charge correlation functions, bipolaron formation) and compare our results to other approximations such as the adiabatic limit and the small polaron transformation. Furthermore we move to a complete selfconsistent stage by introducing a Hubbard-III scheme for the electronic correlations.

^aR. Siemann B. R. Cooper, Phys. Rev. Lett. 44, 1015 (1979).

THERMODYNAMIC PROPERTIES OF THE NEW INSULATING HEAVY FERMIONS

JAPIASSÚ, G. M.; CONTINENTINO, M. A.

UFF

TROPER, A.

CBPF

Recently, a new family of heavy fermion systems has been discovered, which exhibits semiconducting-like properties with very small gaps, as the temperature is lowered^a. A typical representative of these new materials is $Ce_3Bi_4Pt_3$ (Ce343), with resistance rising some two orders of magnitude on cooling from 300K to 4K. Using a two-band hamiltonian, treating the electronic correlations between f-electrons beyond the mean field approximation, and using equation of motion method, we present a calculation of the thermodynamic properties of this model. The results obtained for the magnetic susceptibility as function of temperature are in good agreement with experimental data, thus supporting our model as giving a good description of the physics of these new materials.

^aG.Aeppli and Z.Fisk, *Comments Cond. Mat. Phys.* 16, 155 (1992).

Spin and Charge Phases in Finite Peierls-Hubbard Systems

WEINKETZ, S.

IFGW-UNICAMP

LAGOS, R. E.

Departamento de Física, IGCE - UNESP, Rio Claro

An exact solution for Finite Peierls-Hubbard Systems is presented, via a continued matrix scheme, for the case of electron coupling to a single phonon mode. Approximations are developed when more than a single mode is present. Computational advantages of our method is discussed when compared to other methods and novel results are presented, such as the symmetry breaking fields used to calculate generalized susceptibilities, and from the latter compute phase diagrams in the parameter space. Some systems unmanageable by previous methods turn out to be amenable to our method and we illustrate by solving for the well known dimer case. Even for the latter, our method yields hitherto uncalculated observables. We include both diagonal and off-diagonal electron-phonon interactions, compare with existing results and approximations (the small polaron transformation and the adiabatic limit) and compute the Spin/Charge phase diagram.

Soluções numéricas e dinâmica molecular de um sistema magnético bidimensional de Heisenberg com intera/c c/ oes competitivas.

COSTA, J. E. R.; COSTA, B. V. DA

Dpto. Física, Universidade Federal de Minas Gerais

No estudo do sistema magnético bidimensional de Heisenberg descrito pelo Hamiltoniano

$$H = - \sum_{N(I,J)} J_N^{(1)} \vec{S}_{I,J} (\vec{S}_{I+N,J} + \vec{S}_{i-n,j}) \quad (1)$$

$$- \sum_{m(i,j)} J_m^{(2)} \vec{S}_{I,J} (\vec{S}_{I,J+M} + \vec{S}_{I,J-M}) \quad (2)$$

encontramos as equações de movimento clássicas através de uma parametrização em coordenadas esféricas. Sendo estas equações muito complicadas para serem resolvidas, procuramos então as soluções nas quais os spins estão restritos ao plano. Obtivemos imediatamente uma solução com ângulos de giro constantes nas direções x e y (solução tipo Estrutura-modulada-estrutura-modulada). Através de uma aproximação contínua, encontramos soluções com regiões de chiralidades opostas, onde a ligação dessas regiões é feita por um kink. Obtivemos então soluções denominadas estrutura-modulada-kink e kink-kink. Calculamos a densidade de energia para as três configurações encontradas, observando que as soluções com Paredes de Domínio (kinks) possuem maior energia. Fizemos também um estudo da estabilidade da solução do tipo estrutura-modulada-kink, usando técnicas de dinâmica molecular, o que nos levar a acreditar na estabilidade desta solução.

RESPOSTA DINAMICA DE ANTIFERROMAGNETOS À TEMPERATURA FINITA

ALMEIDA, N. S.

Departamento de Física, UFRN Campus Universário - Natal - RN

Usando o modelo de duas sub redes para descrever antiferromagnetos uniaxiais, é calculada a resposta dinâmica destes materiais à temperaturas finitas. É mostrado que a frequência de ressonância é fortemente dependente da temperatura, especialmente quando T aproxima-se de T_c . Como uma das consequências deste fato, o valor da temperatura para a qual a susceptibilidade é máxima varia com a frequência. Modificação mais dramática acontece quando o material se encontra em presença de um campo magnético externo dc. Neste caso a forma geral da frequência de ressonância tem uma expressão bem diferente daquela à T=0 e a resposta dinâmica tem uma dependência singular na temperatura e no campo externo. O resultado final mostra também que, nas condições descritas acima, a susceptibilidade pode ser vista como a soma de dois termos onde um deles tem caráter antiferromagnético enquanto o outro tem características ferromagnéticas, tendo este último contribuição mais significativa para temperaturas T tais que $T_{ca} < T < T_{cb}$, sendo T_{ca} e T_{cb} as temperaturas críticas das sub redes alinhadas paralela e antiparalela ao campo aplicado, respectivamente. Resultados numéricos são obtidos para o FeF_2 .

EM BUSCA DE UMA TRANSIÇÃO METAL-ISOLANTE A PARTIR DO LIMITE ATÔMICO NO MODELO DE HUBBARD

CRACO, L.; GUSMÃO, M. A. C.
UFRGS

Mediante a utilização de uma técnica diagramática que considera o *hopping* entre os sítios da rede como uma perturbação ao limite atômico (cuja solução exata é conhecida) obtemos a função de Green de uma partícula a temperatura finita para o modelo de Hubbard. Esta função de Green é calculada em duas aproximações: zero *loops* (cadeia) que corresponde à aproximação Hubbard I e um *loop* (com e sem autoconsistência). De posse destas funções de Green estudamos o comportamento de $\text{Im}(\Sigma(i\omega_n)) \times \omega_n$, $\text{Im}(G^{-1}(i\omega_n)) \times \omega_n$ e $n \times \mu$; onde n é a ocupação, μ , o potencial químico, $\omega_n = (2n + 1)\pi/\beta$, a frequência de Matsubara e $\Sigma(i\omega_n) = i\omega_n - 1/\tilde{g}$, a auto-energia. Formalmente, \tilde{g} corresponde a uma função de Green atômica renormalizada que contém todos os diagramas irreduzíveis pelo corte de uma linha de *hopping* obtidos na expansão perturbativa. A fase isolante persiste em todas as aproximações acima citadas, os nossos resultados indicam, contudo, uma forte tendência ao aparecimento de uma fase metálica quando um número maior de diagramas irreduzíveis são incluídos em \tilde{g} .

CORREÇÕES RELATIVÍSTICAS À HAMILTONIANA DE HUBBARD.

WESTFAHL JR, H.; CALDEIRA, A. O.
Instituto de Física "Gleb Wataghin" - UNICAMP

O principal objetivo deste trabalho é estudar a eventual interação atrativa que pode surgir quando se leva em conta algumas correções relativísticas em um sistema de muitos elétrons. Em particular, estudamos uma forma simplificada da hamiltoniana de Breit^a que envolve o acoplamento entre os momentos lineares dos elétrons. Tendo em vista aplicações específicas em sistemas de banda estreita e de baixa dimensionalidade, utilizamos o formalismo de segunda quantização e a aproximação "tight-binding" para obter correções proporcionais a t^2U à hamiltoniana de Hubbard, onde t é o parâmetro de "hopping" e U a repulsão Coulombiana intra-atômica. Mostramos que, dependendo do processo considerado na interação eletrônica, esta correção torna-se atrativa. Baseados nestes fatos, investigamos ainda a possibilidade de formação de pares entre elétrons.

^aP. Jordan und O. Klein, *Zeits. f. Physik*, **45**, 751 (1927)

SOLUÇÕES EXATAS PARA A CADEIA DE HEISENBERG ANISOTRÓPICA NA PRESENÇA DE UM CAMPO MAGNÉTICO

CABRERA, G.; WEINKETZ, S.

Instituto de Física 'Gleb Wataghin', Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)

MEDEIROS, D.

Departamento de Física Geral e Aplicada, Universidade São Francisco

A cadeia de Heisenberg antiferromagnética, com anisotropia axial e campo magnético aplicado paralelo ao eixo, é resolvida de uma forma exata usando o *Ansatz* de Bethe, resultando em uma equação integral que é resolvida numericamente como uma integração auto-consistente. Grandezas físicas importantes, tais como a energia, a magnetização e campos críticos, são calculadas em função da anisotropia. Nossos resultados são complementados com dados numéricos exatos, obtidos com o método de Lanczos para sistemas com tamanhos até $N = 24$ spins. No caso de anisotropia uniaxial (regime Heisenberg-Ising), o campo crítico está determinado pelo *gap* das ondas de spin com $S_z = 1$. Através de extrapolações numéricas para $N \rightarrow \infty$, determinamos este *gap* de energia das excitações de onda de spin da cadeia infinita e conseqüentemente, o campo crítico.

ELECTRON-PHONON INTERACTION IN HUBBARD SYSTEMS

LEAL, C. E.

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE

KELLER, J.

University of Regensburg - Germany

The electron - phonon interaction in a two - dimensional Hubbard system is investigated using a slave - boson mean - field approximation. The electron - phonon interaction is introduced in the Hubbard system by assuming that the local electronic energies as well as the fluctuation on the hopping term depend on the lattice deformation. We find that the polarization function is renormalized due to the change of molecular fields induced by the lattice deformations. The results, which depend sensitively on the doping are used to calculate the phonon self - energy and gives informations on the compressibility in a 2D Hubbard system near the half - filling.

Spin Fluctuations in $(U_{1-x}M_x)(Al_{1-x}Co_y)_2$ compounds

OLIVEIRA, N. A. DE; GOMES, A. A. G.; TROPER, A.

CBPF

Experimental results involving the substitution of U atoms by M=Gd, Dy, La or Al by Co in the spin fluctuation system UAl_2 are studied in terms of a model calculation of the 5f-electron susceptibility. In the case of rare earth impurities, besides the intraband f-f Coulomb interaction, the model includes the Zener coupling between localized 4f spins and itinerant 5f states. The

effective f-f interaction in the case of rare earth impurities or the one-electron impurity induced effects in the case of Y and La increases the proximity to a magnetic instability. Substitutional Co impurities introduce only small effects almost unaffected the magnetic properties of the compound.

UM PROBLEMA DE TRANSPORTE TRATADO PELO MÉTODO DE PERTURBAÇÃO NO "HOPPING"

DIEHL, A.; GUSMÃO, M. A. C.
UFRGS

O método de perturbação no *hopping* tem sido utilizado para estudar diversos aspectos relacionados a propriedades eletrônicas e magnéticas de sistemas fortemente correlacionados, como o modelo de Hubbard e a rede de Anderson (ver, p. ex., L. G. Brunet, M. A. Gusmão, and J. R. Iglesias, Phys. Rev. B 46, 4520 (1992) e referências lá citadas). Partindo da solução exata do limite atômico, esse método tende a ser conveniente para o estudo de propriedades com forte dependência nas interações locais. Com o intuito de testá-lo no limite oposto, estudando sua aplicabilidade para a análise de propriedades de transporte, escolhemos um modelo simplificado, inspirado no problema real da difusão quântica de muons em metais a baixas temperaturas. Calculamos a condutividade dos muons utilizando a fórmula de Kubo, obtendo então a constante de difusão através da relação de Einstein entre essas duas quantidades. À luz de resultados qualitativamente comparáveis a dados experimentais, fazemos uma apreciação crítica das potencialidades do método para a abordagem desse tipo de problemas, discutindo as dificuldades técnicas envolvidas.

*Sistemas Fortemente Correlacionados,
Multicamadas e Metais (MMM) -
20/05/93*

LINHA CRÍTICA NO ANTIFERROMAGNETO DILUÍDO

$Mn_{0.35}Zn_{0.65}F_2$

MONTENEGRO, F. C.; JESUS, J. C. O. DE;
MACHADO, F. L. DE A.; MONTARROYOS, E.;
REZENDE, S. M.

Departamento de Física - UFPE

RIVERA, A. R.

Departamento de Física - Universidad Nacional de
Colombia. A.A. 127 Manizales - Colombia

O composto $Mn_xZn_{1-x}F_2$ para $x > 0.4$ a campo nulo, possui o comportamento crítico de um modelo de Ising

com interações de troca aleatórias (REIM). Sob ação de um campo externo, ocorre um cruzamento para o comportamento de um modelo de Ising com campo aleatório (RFIM), o qual obedece a lei de escala para a temperatura crítica: $T_c(H) = T_c(0) - bH^2 - cH^{2/\phi}$, onde b e c são constantes e $\phi = 1.4$ é o expoente universal do cruzamento REIM-RFIM^a. Neste trabalho apresentamos medidas de magnetização estática em uma amostra com $x = 0.35$, sob campos entre $0 \leq H \leq 5K0e$, aplicados na direção paralela ao eixo [001], para temperaturas entre $4.2 \leq T \leq 20K$. Nossos resultados indicam que a lei acima é verificada, porém com o expoente $\phi = 3.4$, idêntico ao da linha de Almeida-Thouless em vidros de spin.

^a F.C. Montenegro, J.C.O. de Jesus, F.L.A. Machado, E. Montarroyos and S.M. Rezende, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 104-107 (1992) 277.

ESTUDO DO MAGNETISMO E DAS PROPRIEDADES DE TRANSPORTE NO SISTEMA FÉRMION PESADO

$Ce(Ru_{1-x}Au_x)_2Ge_2$

FONTES⁺, M. B.; PASSOS, M. E. A.
CBPF

O composto $CeRu_2Ge_2$ é um férmion pesado ferromagnético, com $T_c = 7,5K$, enquanto que o $CeAu_2Ge_2$ é um antiferromagneto comum com $T_c = 15K$. O objetivo deste trabalho é investigar as propriedades magnéticas e de transporte do sistema $Ce(Ru_{1-x}Au_x)_2Ge_2$. Foram feitas medidas de resistividade na amostra pura e com $x = 0,05$. O raio X destas amostras mostra que a estrutura cristalina de ambas é aquela esperada do $ThCr_2Si_2$. As medidas de resistividade da amostra pura estão de bom acordo com a literatura, enquanto que a de 5% apresenta um aumento da resistividade residual devido à presença dos átomos de impurezas de Au. O comportamento geral das curvas de resistividade das duas amostras é semelhante, indicando que a estrutura eletrônica não variou muito com a presença dos átomos de Au.

⁺bolsa de doutorado CNPq

⁺⁺bolsa RHAE/MCT

IDENTIFICATION OF ANTIFERROMAGNETIC ORDERING BY RAMAN SCATTERING IN $SrTi_{1-x}Ru_xO_3$.

MASSA, N. E.

Programa QUINOR-Depto. de Química y Depto. de
Física, Univ. Nac. de La Plata, C.C. 962, 1900 La Plata,
Argentina.

CUFFINI, S. L.; CARBONIO, R.

Depto. de Fisicoquímica, Univ. Nac. de Córdoba, Suc. 16,
C.C. 61, 5016 Córdoba, Argentina.

An optical dipole transition followed by an exchange interaction between the excited electron and another electron from the nearest neighbor ion contributing to the antiferromagnetic ordering, followed by a second dipole transition, is by now a known Raman mechanism for superconductors with high critical temperature.^{1a} It signals two opposite spin flips of the hole pair in the CuO_2 plane and yields a broad asymmetric Raman band. Here we report the detection of such two magnon Raman scattering process in ceramics $SrTi_{1-x}Ru_xO_3$ ($0x \leq 1$) using the 5145 Å and 4880 Å lines of a cw Ar^+ laser. Inelastic light scattering by ceramics with those concentration suggests a predominant two magnon process that implies antiferromagnetic ordering. These samples, that are semiconductor ($x \leq 0.40$) or metallic ($x \geq 0.50$) up to 4 K, have one mode behavior with no substructure in the broad two magnon band. Its peak frequency, for spectra excited with the 5145 Å green line, is about 2100 cm^{-1} . Thus, assuming a two dimensional antiferromagnet Heisenberg spin system, $\omega_{max} \approx 2.7 * J_{exch}$ yields a superexchange interaction of $J_{exch} \approx 778\text{ cm}^{-1}$.

^a1. C. Thomsen and M. Cardona in "Physical properties of High-Temperature Superconductors", ed. D. M. Ginsberg (World Scientific, Singapore) 1989.

MAGNETIC ORDER AND HEAVY FERMION BEHAVIOR IN Ce_7Ni_3

TROVARELLI^a, O.; SERENI, J. G.

Centro Atómico Bariloche - CNEA, (8400) Argentina

KAPPLER, J. P.; SCHMERBER, G.

IPCMS-GEMM, Inst. de Physique, 67084 Strasbourg, France

Low temperature specific heat (C_P), ac and dc magnetic susceptibility (χ) and magnetization measurements on Ce_7Ni_3 and $Y_3Ce_4Ni_3$ are presented. The ac susceptibility and specific heat of Ce_7Ni_3 show an antiferromagnetic transition with a Néel temperature of $T_N = 1.8\text{ K}$. At high temperature ($T > 10\text{ K}$) the electronic contribution to $C_P(T)$ can be described by a linear term with a coefficient $\gamma_{HT} = 1\text{ J/molK}^2$. For $T < 10\text{ K}$ C_P/T shows an upturn, which keeps increasing below T_N . From the $\chi^{-1}(T)$ dependence a Curie-Weiss temperature of $\Theta_P = -30\text{ K}$ is extrapolated from the $T > 70\text{ K}$ range. From crystallographic information it is known that the Ce atoms are placed in three different sublattices (I, II, III, with 1, 3 and 3 Ce atoms respectively) with different local environments. The small crystalline available volume of the atoms in the sublattice III suggests them to be close to an Intermediate Valence behavior, with a characteristic temperature $T_0 = \pi R/3(\gamma_{HT}/3)^{-1} = 26\text{ K}$, close to the observed $|\Theta_P|$ value. The entropy gain after the phonon and the $\gamma_{HT}T$ term subtraction to the total electronic specific heat ($\delta C_P = C_P - \gamma_{HT}T - \beta T^3$) is about $4R \ln 2$ at $T = 10\text{ K}$, in agreement with the number of atoms involved.

$\delta C_P(T)$ can be described for $T < 10\text{ K}$ by two contributions: one due to 3 atoms behaving as Heavy Fermions (with a T_0 of about 5 K) and the other related to the magnetic ordering of the Ce atom of lattice I. A further anomaly was observed at 0.5 K which nature and the sublattice involved is still unknown. As a reference system, the $Y_3Ce_4Ni_3$ pseudoternary isotypic compound was also studied, observing a short range order with a C_P maximum at 1.1 K. The magnetic entropy indicates that 2 Ce atoms are involved in that order and the other 2 Ce atoms contribute with a high temperature $\gamma_{HT}T$ term of $\gamma_{HT}T = 0.4\text{ J/molK}^2$.

Work supported by CONICET PID 300390088, Fundación Antorchas Project 12215/1. One of us (OT) thanks CONICET for a graduate student fellowship.

^a CONICET fellowship

O MODELO ESTENDIDO DE HUBBARD PARA UM DÍMERO.

OLIVEIRA, F. F. DE; CABRERA, G. O.

Instituto de Física "Gleb Wataghin" - UNICAMP

Encontramos uma solução exata de um modelo de Hubbard estendido para a molécula homopolar de dois elétrons ^a. O modelo proposto anteriormente ^b estava interessado em verificar a validade das aproximações do tipo Charge-Density Wave e Spin-Density Wave. Demonstramos que o termo de Hopping correlacionado não altera muito os autovalores do sistema, enquanto o termo de troca direta desempenha um papel importante nas propriedades do sistema. Nosso modelo permite uma transição Singleto-Tripleto na configuração do Estado Fundamental. De forma a estudar as propriedades estruturais de spin e de carga do sistema, algumas funções de correlação são calculadas. O modelo permite estudar algumas características qualitativas do comportamento metálico do sistema, sendo estudado uma possível transição Metal-Isolante no limite de baixas correlações do sistema.

^aVeja qualquer livro texto em Física Quântica Molecular, e.g., J.C. Slater, *Quantum Theory of Matter*, (MacGraw-Hill Book Co., New York, 1951), chap. 8.

^bL.M.Falicov *et al.*, J. Chem. Phys., 51, 3153-3158, (1969)

INCLUSÃO DOS TERMOS DE TROCA DIRETA E HOPPING CORRELACIONADO NA MOLÉCULA HOMOPOLAR DE DOIS ELÉTRONS.

OLIVEIRA, F. F. DE; CABRERA, G. O.

Instituto de Física "Gleb Wataghin" - UNICAMP

Encontramos uma solução exata de um modelo de Hubbard extendido para a molécula homopolar de dois elétrons ^a. O modelo proposto anteriormente ^b estava interessado em verificar a validade das aproximações do tipo Charge-Density Wave e Spin-Density Wave. Demonstramos que o termo de Hopping correlacionado não altera muito os autovalores do sistema, enquanto o termo de troca direta desempenha um papel importante nas propriedades do sistema. Nosso modelo permite uma transição Singleto-Tripleto na configuração do Estado Fundamental. De forma a estudar as propriedades estruturais de spin e de carga do sistema, algumas funções de correlação são calculadas. O modelo permite estudar algumas características qualitativas do comportamento metálico do sistema, sendo estudado uma possível transição Metal-Isolante no limite de baixas correlações do sistema.

^aVeja qualquer livro texto em Física Quântica Molecular, e.g., J.C. Slater, *Quantum Theory of Matter*, (MacGraw-Hill Book Co., New York, 1951), chap. 8.

^bL.M.Falicov *et al.*, *J. Chem. Phys.*, 51, 3153-3158, (1969)

Constante de rigidez de ondas de spin em monocamadas de Ni com orientação (100), (110) e (111)

COSTA, M. V. T.; CASTRO, J. A. E
UFF

A energia necessária para se excitar ondas de spin de grande comprimento de onda se propagando com vetor de onda (\vec{k}) é dada por $\hbar\omega(\vec{q}) = D(\hat{q})q^2$, onde D é a constante de rigidez de ondas de spin. D(\hat{q}) foi calculado para monocamadas isoladas de Ni FCC nas orientações cristalinas (100), (110) e (111) para diferentes direções de \hat{q} . O modelo adotado é o de ligações fortes multi-orbital e D é calculado na aproximação de fases aleatórias. Comparando os valores de D para as diferentes orientações cristalinas, podemos inferir que a magnitude do acoplamento de troca entre primeiros vizinhos, que reproduz o comportamento da magnetização no regime de baixas temperaturas, deve diferir de uma monocamada para outra. É mostrado que D é altamente anisotrópico para a orientação (110) essa anisotropia está intimamente relacionada à estrutura cristalina dessa direção.

Difusão de impurezas próximo a superfícies e interfaces metálicas

BARBOSA, A. C. DE C.; COSTA, M. V. T.; CASTRO, J. A. E
UFF

A existência de interfaces abruptas em sistemas de multicamadas metálicas está intimamente relacionada com o problema de interdifusão entre diferentes materiais metálicos. O conhecimento do mecanismo microscópico do processo de interdifusão é importante

para o controle da qualidade de interface, o que se reflete sobre as propriedades físicas desses sistemas, como por exemplo, a ocorrência do fenômeno de magnetoresistência gigante em multicamadas magnéticas metálicas. Recentemente¹, com base em um modelo simplificado, verificamos que a variação de energia eletrônica total devido à introdução de uma impureza substitucional próxima à superfície de um metal ou à interface de dois metais oscila em função da distância à superfície ou interface. Demonstramos que o fenômeno está diretamente relacionado a interferência entre as ondas eletrônicas incidentes e espalhadas na superfície ou interface. No presente trabalho, estamos desenvolvendo cálculos para a superfície de metais como níquel e ferro, empregando um modelo mais realista, baseado no Hamiltoniano de ligações fortes multi-orbital.

Referência:

(1) A. C. de Castro Barbosa, J. d'Albuquerque e Castro, *J. of Magn. and Magn. Mater.* 121-122 (1993) in press.

Estrutura Eletrônica de Interfaces Metálicas

JR, A. T. DA C.; MUNIZ, R. B.
UFF

A estrutura eletrônica de interfaces entre metais magnéticos e não magnéticos é calculada com base num modelo de ligações fortes multi-orbital com parametrização de bandas canônicas. Os sistemas estudados consistem de sanduíches compostos por n planos de metais magnéticos de transição entre metais semi-infinitos não magnéticos. Um novo modelo de camadas adicionadas é utilizado para calcular de maneira exata os propagadores monoelétrônicos nesses sistemas. O estado fundamental Hartree-Fock é calculado de forma autoconsistente. Foram efetuados cálculos numéricos para interfaces de *Fe/Cu*, *Co/Cu* e *Ni/Cu*, para a rede FCC direção (100), entre outros sistemas. As densidades de estados para ambas as direções de spin (majoritária e minoritária) para os planos da interface são apresentadas. O objetivo destes cálculos é tentar correlacionar a eventual assimetria na densidade de estados no nível de Fermi com a magnetoresistência gigante observada em algumas multicamadas metálicas.

TRANSIÇÕES DE FASE EM MULTICAMADAS ANTIFERROMAGNÉTICAS

CARRIÇO, A. S.; ALMEIDA, N. S.

Departamento de Física, UFRN Campus Universitário - Natal - RN

Um método autoconsistente que permite a análise de sistemas de dimensão finita é aplicado ao estudo de transições de fase em filmes antiferromagnéticos de espessuras arbitrárias e multicamadas. O método se ba-

seja no uso de campo efetivo e permite que sejam levados em conta os perfis do valor médio do spin, bem como do angulo de canting, induzidos pela proximidade de superfícies e/ou interfaces. Valores arbitrários de temperatura e campo externo são considerados e o cálculo é aplicado a sistemas compostos de FeF_2 , MnF_2 , CoF_2 e multicamadas, para analisar resultados experimentais de expansão térmica em super redes e efeito de tamanho e anisotropia nos diagramas de fase de filmes de FeF_2 e MnF_2 .

Ondas de spin em sobrecamadas metálicas magnéticas

BARBOSA, L. H. M.; MUNIZ, R. B.

UFF

MATHON, J.

City University-London

A relação de dispersão e o tempo de vida de excitações da onda de spin em um sistema composto de uma monocamada magnética disposta sobre um substrato não magnético são calculados. O modelo adotado é o de ligações fortes com um orbital por sítio. Diferentes orientações cristalinas em uma rede cúbica simples são consideradas.

A presença do substrato não magnético reduz o tempo de vida das excitações de ondas de spin, e essa redução está ligada à possibilidade de tunelamento de buracos para a banda de spin majoritária da sobrecamada. Diferentes orientações cristalinas alteram a relação de dispersão de ondas de spin devido a mudanças na estrutura eletrônica do material.

COMPUTAÇÃO ALGÉBRICA APLICADA AO ESTUDO DO CAMPO CRISTALINO EM INTERMETÁLICOS DE TERRAS RARAS.

SOBRAL⁺, R. R.; GUIMARÃES, A. P.; SILVA, X. A.

DA

CBPF/CNPq

Em compostos intermetálicos de terras raras o campo cristalino tem efeitos que se refletem nas propriedades magnéticas, no calor específico, etc; também é importante na interpretação do espalhamento inelástico de nêutrons. Os autovalores do Hamiltoniano de campo cristalino são obtidos normalmente a partir da diagonalização numérica (ex. Lea, Leask e Wolf, J. Phys. Chem. Sol. 1381-1405, 23 (1962) para o caso de simetria cúbica). No presente trabalho são apresentadas pela primeira vez expressões analíticas para os autovalores do campo cristalino. Os resultados são obtidos por procedimentos de computação algébrica, que permitem fatorar o polinômio característico associado ao Hamiltoniano de campo cristalino. ⁺bolsa de Recém-Doutor do CNPq.

COMPUTAÇÃO ALGÉBRICA APLICADA AO MAGNETISMO DE INTERMETÁLICOS CONTENDO ÍONS COM $J = 4$: RESULTADOS ANALÍTICOS

SOBRAL⁺, R. R.; GUIMARÃES, A. P.; SILVA, X. A.

DA

CBPF/CNPq

Com um Hamiltoniano modelo que contém o termo de campo cristalino (com simetria cúbica) e a interação de troca na aproximação de campo molecular, estudamos o autovalor, o momento magnético do estado fundamental e a temperatura de Curie de intermetálicos contendo íons de $J = 4$. Usando procedimentos de computação algébrica, escrevemos explicitamente o polinômio característico associado aos autovalores do Hamiltoniano modelo; diversas propriedades associadas ao estado fundamental são estudadas analiticamente. Obtemos um diagrama de fase magnético no espaço dos parâmetros (parâmetros de campo cristalino e de troca). As respostas ferro- e paramagnética são também discutidas. O caso do composto intermetálico $PrAl_2$, estudado exaustivamente na literatura (ex. H.G. Purwins e A. Leson, Adv. Phys. 309-405, 39 (1991)), é comentado. ⁺bolsa de Recém-Doutor do CNPq.

PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE SISTEMAS FINITOS

MELLO, D. F. DE

Depto. de Física - Fac. de Ciências - Unesp - Campus de Bauru

CABRERA, G. G.

IFGW - Unicamp

A Densidade de Estados Eletrônicos (DOS) para um sistema puro bi-dimensional (rede quadrada) foi obtida através do cálculo da DOS de sistemas quase-unidimensionais de largura finita. Este método resolve faixas infinitas mediante a convolução de DOS de cadeias lineares com a distribuição discreta de autovalores de uma cadeia linear finita. (O resultado obtido concorda com cálculos exatos existentes na literatura.) Estamos generalizando este método para sistemas desordenados. Em particular estudamos o caso de uma liga binária desordenada, onde usamos técnicas características de sistemas unidimensionais, como por exemplo a Técnica da Dizimação (uma Técnica do Grupo de Renormalização), ou cálculos unidimensionais exatos (Monte Carlo).

DINÂMICA DE REDE DE MAGNÉSIO PELA INTERAÇÃO DE TRÊS CORPOS

COELHO, A. DE A.

UNICAMP

SHUKLA, M. M.

UNESP

Um modelo fenomenológico para dinâmica de rede de metais HCP é proposto considerando as interações interatômicas dividida em duas partes, interação íon-íon e interação elétron-íon. A interação íon-íon foi descrita por um potencial de dois corpos, e a interação elétron-íon é tomada do modelo de Sarkar et al para potencial de três corpos. Nós consideramos as interações íon-íon e elétron-íon até a terceira camada de vizinhos, também foi introduzido a condição de equilíbrio do cristal à pressão zero. Nós temos 5 parâmetros nesse modelo que foram determinados pelos valores experimentais de constantes elástica e fonons. Calculamos as curvas de dispersão em três direções de simetria $[0001]$, $[01-10]$ e $[11-21]$ e comparamos com resultados experimentais.

Dinâmica de Rede de liga de $Pd_{.95}Ru_{.05}$

IMAIZUMI, M.; SHUKLA, M. M.

Depto de Física - Unesp-Bauru

Calculou-se as relações de dispersão de fônons nas três direções principais $[\xi, 0, 0]$, $[\xi, \xi, 0]$ e $[\xi, \xi, \xi]$ de uma liga $Pd_{.95}Ru_{.05}$ usando o modelo de cristal virtual e o modelo de Krebs adaptado as ligas^a. Os resultados obtidos mostraram-se razoáveis quando comparados aos resultados experimentais medidos nestas três direções de simetria para todos vetores de onda da primeira zona de Brillouin.

^a M.Imaizumi, B.Laks and M.M. Shukla, *Solid State Comm.* 68, 837, (1988); B.Laks, M.Imaizumi and M.M. Shukla, "Phonon-89", *Proceedings of the Third International Conference on Phonon Physics and the Sixth International Conference on Phonon Scattering in Condensed Matter*. Edited by Huperlingerta-World Scientific, Singapore-vol 1, p.199, 1990; M. Imaizumi, B.Laks and M.M. Shukla, *Brazilian Journal of Physics* 23, N-2 (1993).

INVESTIGATION OF ELECTRON-PHONON PEIRLS' EXPONENT IN NORMAL METALS AT LOW TEMPERATURE

MORGOON, V. N.

* USP, Instituto de Física, DMFT, São Paulo

KOPELIOVICH, A. I.

Institute for Low Temperature Physics and Engineering, Ukrain. Academy of Science, Kharkov 310164, Ukraine

We present method for determination of the value of gaps between the sheets of Fermi-surface of metals using extracting of electron-phonon Peirls' exponent. The method is based at the effect of enhancing inter-sheet transfer processes in electromagnetic kinetics of pure metals in high magnetic fields [R.N.Gurzhi, A.I.Kopeliovich *Usp.Fiz.Nauk* 133,33 (1981)]. At certain orientation of magnetic field it is possible to avoid the competition of diffusion with transfer times of relaxation and this make it easier to watch Peirls' exponent. The method was realised when measurements on transverse magnetoresistance of

Al [N.N.Morgoon, N.N.Chebotaev *Fiz.Niz.Temp* 18(2), 96(1992)] single crystals Sn and Nernst-Ettinshausen coefficient Al and In were taking. We have found the split values for these metals which are in good accordance with the results of zone calculations.

INFLUÊNCIA DA ADIÇÃO DE In NA THERMOPOWER E RESISTIVIDADE DA $\alpha - Ce_3Al$

AZECHI, L. S.; MEDINA NETO, A.; GANDRA, F. G.
UNICAMP - Instituto de Física

Foram realizadas medidas de resistividade elétrica e thermopower (TEP) em compostos de $\alpha - Ce_3(Al_{1-x}In_x)$ para $x = 0, 1, 2, 5$ e 10% , em função da temperatura, com o objetivo de estudar a influência da adição de In nas propriedades de $\alpha - Ce_3Al$. Ao redor de $100K$, resistividade e TEP apresentam um máximo associado à transição de fase de primeira ordem de Ce_3Al , o qual vai se atenuando e alargando com o aumento de x , chegando até a desaparecer na resistividade, para $x = 10\%$. As duas técnicas mostram ainda um mínimo em torno de $25 K$, o que caracteriza o sistema como uma rede de Kondo. Novamente, o mínimo se atenua com o aumento de concentração e tende a se deslocar para temperaturas mais altas. O valor de S_{min} passa inclusive de negativo para positivo para concentrações acima de 2% . A TEP apresenta ainda um máximo em $5K$ que coincide com a temperatura na qual se observa uma queda abrupta na resistividade para $x = 5$ e 10% . Este pico na resistividade é associado a uma transição antiferro que se desloca de $2.8K$ para temperaturas mais altas com a adição de In. A existência de dois picos na TEP e do seu alto valor absoluto, mostram que o sistema, mesmo com 10% de In, continua sendo descrito como uma rede de Kondo, embora a resistividade só apresente a queda característica da transição antiferro. Além disso, a queda no valor da resistividade mostra que a adição de In provoca a transição de fase $\alpha - \beta$.

MEDIDAS DA SUSCEPTIBILIDADE MAGNÉTICA DAS FERRITAS DO TIPO $Ca_2Fe_{2-x}Nb_xO_{5+x}$ UTILIZANDO UM SUSCEPTÔMETRO AC.

SOUZA, R. R. DE; MAGON, C. J.

Departamento de Física e Ciências dos Materiais - IFQSC-USP

Foi desenvolvida uma ponte de indutâncias mútuas, auto-balanceada, para medidas automáticas e simultâneas das partes real (χ') e imaginária (χ'') da susceptibilidade magnética AC, na faixa de frequências de $20 Hz$ a $1 KHz$ e temperaturas de $2 K$ a $300 K$. O sistema é balanceado em um elo de realimentação digital que assegura os sinais em fase e quadratura, continuamente nulos. A amplificação é feita por um amplificador "lock-in" de duas fases, cujas saídas são ligadas a dois

integradores digitais que comandam dois DAC multiplicadores, gerando o sinal composto que é usado para balancear a ponte. O valor absoluto da susceptibilidade magnética é medido movendo as bobinas primária e secundárias de tal forma que a amostra fique posicionada ora em um dos secundários, ora em outro. Serão apresentadas as melhorias realizadas (após o último encontro) na eletrônica e no conjunto de bobinas de medida, assim como a calibração feita com amostras de Sulfato de Cobre penta-hidratado ($CuSO_4 \cdot 5H_2O$) e Sulfato de Manganês mono-hidratado ($MnSO_4 \cdot H_2O$). Foi feito, utilizando este equipamento, um estudo da variação da temperatura de Neel (temperatura de transição de fase Antiferromagnética-Paramagnética) com a concentração de Nióbio em ferritas bi-cálcicas ($Ca_2Fe_2O_5$). As ferritas bi-cálcicas ($x = 0$) têm uma temperatura de Neel de 725 K. Esta temperatura de transição decresce a medida que aumentamos a concentração de Nióbio, chegando a ficar (para $x = 1$) em torno de 40 K. Este estudo foi feito também por RPE (Ressonância Paramagnética Eletrônica) e será apresentado neste encontro.

Partículas ultrafinas de Fe - Ni produzidas pela técnica de evaporação de gás e coalescência

SCORZELLI, R. B.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

SILVA, E. G. DA

Universidade Federal de Minas Gerais, Dep. Física

KAITO, C.; SAITO, Y.

Dep. Physics, Kyoto Technical University

MCELFRESH, M.

Purdue University, Physics Dep.

Experiências anteriores em amostras preparadas por métodos não convencionais tais como, amostras irradiadas por elétrons ou meteoritos, mostram que ligas ferro-níquel na região de composição Invar (35% a 50% Ni) têm a tendência a separar em duas fases FCC com composições diferentes. Usando a técnica de evaporação de gás e coalescência, grãos ultrafinos de Fe-Ni foram produzidos pelo processo de crescimento coalescente da junção de uma nuvem de partículas finas evaporadas de Fe e Ni numa atmosfera inerte. Neste trabalho reportamos os resultados obtidos por análise de microsonda, difração de raio-X e medidas de magnetização e espectroscopia Mössbauer. Os resultados Mössbauer mostram claramente a forma/cc ao de duas fases do sistema Fe-Ni com composições diferentes, cujas propriedades magnéticas foram estudadas por magnetização em presença de campo e a diferentes temperaturas.

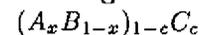
Tetratenita em grãos metálicos do condrito Antártico Allan Hills 769

SCORZELLI, R. B.; AZEVEDO, I. DE S.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

O condrito L6 Allan Hills 769 (ALH-769) foi encontrado em janeiro de 1977, em Allan Hills, South Victoria Land, Antártica. Investigamos a presença da fase ordenada Fe - Ni 50 - 50 (tetratenita) nos grãos metálicos deste condrito, utilizando frações magneticamente separadas, após eliminação da troilita (FeS) e dos silicatos de ferro por tratamento químico. A tetratenita (fase γ'' Fe₅₀Ni₅₀) é um mineral metálico singular em meteoritos. Como já foi reportado, os meteoritos de ferro (1,2), assim como os condritos (3), cujos componentes metálicos são ricos em Ni, frequentemente contêm esta fase. O tamanho de grãos de tetratenita em condritos é, geralmente, muito pequeno, exibindo uma alta anisotropia cristalina devido à sua estrutura tetragonal. Um problema relativo a estes grãos metálicos muito finos é a compreensão do seu mecanismo de formação nas condições ambientais da nébula solar. (1) J. F. Albertesen, G. B. Jensen, J. M. Knudsen, *Nature* 273,453(1978) (2) J. Danon, R. B. Scorzelli, I. Souza Azevedo, W. Curvello, J. F. Albertesen e J. M. Knudsen, *Nature* 277,283(1979) (3) J. Danon, R. B. Scorzelli, I. Souza Azevedo, M. Christophe Michel-Lévy, *Nature* 281,469(1979).

Magnetização em Ligas Ternárias do Tipo



MENEZES, J. V. DE; LOPES, L. C.

Instituto de Física/UFRJ

CASTRO, J. A. E

Instituto de Física/UFF

Usando a técnica da Aproximação do Potencial Coerente (CPA), estudamos a magnetização de uma liga ternária do tipo $(A_x B_{1-x})_{1-c} C_c$, onde A e B são metais de transição e C é um Actínídeo, à temperatura nula, para um pequeno valor de c, e à concentração, x, variável compreendida entre zero e um. Pretende-se determinar a magnetização em função de x e identificar o tipo da transição magnética associada aos elétrons de caráter f do elemento C. É considerada uma hibridização entre os elétrons f e os elétrons de condução de tipo d inerentes aos elementos de transição A e B. Considera-se também um regime de forte correlação entre os elétrons f caracterizado por uma repulsão Coulombiana U maior do que a largura da banda de condução. O cálculo é auto-consistente e inclui os efeitos da transferência de carga entre os diversos elementos da liga.

*Workshop: Multicamadas Magnéticas
e Filmes Finos (MMM, SUF) -
21/05/93*

Introdução

MAGNETORRESISTENCIA GIGANTE DE Co/Ag ENTRE A MULTICAMADA E O REGIME GRANULAR.

BAIBICH, M. N.; TOSIN, G.; SCHELP, L. F.; CARARA, M.; SCHMIDT, J. E.
Universidade Federal do Rio Grande do Sul

A magnetorresistencia, magnetização, anisotropia, resistividade elétrica e espectroscopia de raios-X mostraram que, no caso das multicamadas Co/Ag por nós produzidas também há correlação entre a rugosidade das interfaces e o acoplamento/magnetorresistencia. Para estas amostras crescidas por deposição com feixe de elétrons, e portanto de grande rugosidade para as composições utilizadas, o tratamento térmico permite que haja retro-difusão e aumento da magnetorresistencia gigante. O que tem sido nosso interesse agora, uma vez razoavelmente entendida a multicamada, é o processo de destruição das mesmas, via tratamentos térmicos, estudando a passagem da situação de interação entre planos para interação entre grãos progressivamente menores. A redução dos tamanhos de grão é acompanhada de redução na magnetorresistencia e propriedades correlatas, mas ainda apresentando o fenômeno da magnetorresistencia gigante.

RESSONÂNCIA FERROMAGNÉTICA EM FILMES ACOPLADOS

REZENDE, S. M.; MOURA, J. A. S.; AGUIAR, F. M. DE
Departamento de Física, UFPE, 50732-970 Recife, PE
SCHREINER, W. R.; SANTOS, C. A. DOS
Instituto de Física, UFRGS, 91500 Porto Alegre, RS

A técnica de ressonância ferromagnética (FMR) é uma poderosa ferramenta para se medir quantitativamente o acoplamento entre filmes ferromagnéticos separados por uma camada não magnética. Entretanto, para que ela seja aplicada corretamente é preciso conhecer a configuração de equilíbrio das magnetizações nos filmes. Esta configuração pode ser inferida pela variação das frequências de ressonância com o campo magnético aplicado $\omega(H)$, desde que o espectrômetro de FMR tenha frequência variável. Neste trabalho apresentaremos as expressões de $\omega(H)$ para acoplamento ferro- e antiferromagnético obtidas por Wigen e Zhang^a. Elas são utilizadas para discutir resultados em sandwiches de $Fe/Cr/Fe^b$ e $Ni/Ag/Ni^c$. No caso de $Ni/Ag/Ni$ obtivemos o resultado surpreendente de que o acoplamento é antiferromagnético quando o campo aplicado é paralelo ao filme e ferromagnético quando o campo é perpendicular.

^aP.E. Wigen and Z. Zhang, *Braz. J. Phys.* **22**, 267 (1992)

^bJ.J. Krebs, P. Lubitz, A. Chaiken, and G.A. Prinz, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1645 (1989)

^cS.M. Rezende, J.A.S. Moura, F.M. de Aguiar, C.A. dos Santos, M.R. Schreiner, and S.R. Teixeira, *J. Appl. Phys.*, to appear

Acoplamento de Troca e Magnetoresistência de Multicamadas Magnéticas Metálicas

BECHARA MUNIZ, R.
INSTITUTO DE FÍSICA, UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE

Recentemente foi descoberto que diversas multicamadas metálicas magnéticas exibem magnetoresistência muito elevada, e que o acoplamento entre as camadas magnéticas oscila com a espessura do metal separador, podendo ser ferro- ou antiferromagnético dependendo dessa espessura. Os períodos de oscilação e a amplitude do acoplamento, assim como a magnetoresistência observada, dependem dos materiais justapostos, e também da direção de crescimento dessas multicamadas.

O mecanismo físico relevante para a ocorrência de magnetoresistência elevada observada nesses sistemas é a assimetria no espalhamento de elétrons com spins distintos.

O confinamento, na direção perpendicular as camadas, de elétrons do metal separador pelo campo de troca nos ferromagnetos causa essas oscilações no acoplamento de troca. As teorias existentes chegam a conclusão de que o período de oscilação é essencialmente uma característica do metal separador, enquanto que a amplitude e fase das oscilações depende do casamento entre os ferromagnetos e o metal separador.

Multicamadas Magnéticas e Filmes Finos (MMM, SUF) - 21/05/93

Acoplamento de troca em multicamadas magnéticas metálicas

FERREIRA, M. S.; MUNIZ, R. B.; CASTRO, J. A. E
UFF

Foi observado que a interação de troca entre camadas magnéticas metálicas separadas por metais não magnéticos (em vários sistemas) oscila em função da espessura do material separador. Tanto o período de oscilação como a amplitude da interação dependem dos materiais justapostos. Trabalhos recentes propuseram explicações para esse fenômeno baseadas ou no confinamento dos elétrons de condução no metal separador ou na interação RKKY entre as camadas ferromagnéticas através da polarização dos portadores dentro do espaçador. Neste trabalho, uma teoria unificadora é apresentada para o acoplamento de troca em multicamadas metálicas. A abordagem baseia-se no cálculo da variação da energia eletrônica total devido a rotação da magnetização em uma das camadas ferromagnéticas por um ângulo arbitrário. Expressões analíticas são obtidas para o acoplamento J entre camadas, interação biquadrática e torque devido à rotação.

PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DE MULTI-CAMADAS AMORFAS Y-Co/Gd-Co/Y-Co

GIVORD, D.; SOUCHE, Y.; VOIRON, J.; WÜCHNER, S.

Laboratoire Louis Néel, CNRS, Grenoble, França

SANTOS, A. D. DOS

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasil

Multi-camadas do tipo RM/R'M/RM, baseadas em ligas de terra rara(R)-metal de transição exibem propriedades magnéticas bastante originais. Este tipo de sistema adapta-se muito bem ao estudo do acoplamento magnético entre camadas. É bem conhecido que em ligas R-M, o acoplamento magnético entre os spins de R e M é sempre anti-paralelo. Isto leva para um acoplamento anti-ferromagnético entre o Gd e o Co, com a magnetização do Gd maior que a do Co na camada amorfa Gd₃₃Co₆₇. Consequentemente na multicamada Y-Co/Gd-Co/Y-Co, devido a forte interação de "exchange" entre os momentos do Co, a direção da magnetização alterna de uma camada a outra, produzindo

um arranjo ferrimagnético macroscópico na ausência de campo magnético aplicado. Quando um campo magnético é aplicado no plano das camadas, temos uma transição a um arranjo ferromagnético macroscópico, a qual ocorre a um campo de transição H_t característico do acoplamento entre as camadas individuais. Consequentemente duas paredes de domínios são criadas às interfaces para minimizar a interação de "exchange" entre os átomos de Co. Apresentaremos resultados de efeito Kerr longitudinal e transversal, demonstrando a existência dessas paredes de domínios paralelas ao plano da amostra, bem como uma modelização de suas características. Trabalho parcialmente financiado pela FAPESP e Projeto USP/BID.

THE STRUCTURES AND MAGNETIC PROPERTIES OF Fe/Cr AND Fe/Mn THIN FILMS

XIA, S. K.; BAGGIO-SAITOVITICH, E.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

LARICA, C.

Depto. Física e Química, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória

Cr-Fe and Mn-Fe systems are considered to be difficult to form amorphous alloys by melting-spining technique because the constituents in these binary alloys have the similar atomic size. This is due to a limitation on diffusion kinetics in the liquid. However, if a proper kinetics condition for solidification could be controlled, an amorphous structure may be obtained in some systems which have the favorable thermodynamic condition but are not satisfied the size requirement.

In this work, Cr-Fe and Mn-Fe thin films (= 300nm) have been prepared at room temperature (RT) by two source thermal evaporation technique. The effects of composition and preparation condition on the structural and magnetic properties of the films have been studied by means of X-ray diffraction and Mössbauer spectroscopy, respectively. The results indicate that amorphous phases can be formed by very slow deposit rates and the Fe moment in the amorphous films is much smaller compared with crystalline bulk samples with the same compositions. The results are discussed based on the thermodynamics and kinetics.

EVIDÊNCIA DE ORDENAMENTO A CURTO E LONGO ALCANCE NO COMPOSTO FeTa₂O₆.

ZAWISLAK, L. I.; CUNHA, J. B. M. DA; SANTOS, C. A. DOS
 UFRGS

No composto título, denominado tapiolita, o átomo de Fe tem a mesma simetria apresentada pelo Ni no anti-ferromagneto bidimensional NiK_2F_4 . Por causa dessa semelhança alguns estudos foram desenvolvidos com o objetivo de investigar evidências de comportamento magnético bidimensional na tapiolita. Medidas de susceptibilidade magnética sugerem que o composto é antiferromagnético, com temperatura de Néel de aproximadamente 15 K. Por outro lado, medidas de calor específico apresentam uma nítida transição por volta de 8 K, sugerindo ordenamento de curto alcance na primeira transição (15 K), e ordenamento de longo alcance, tridimensional, na segunda transição. Na presente comunicação são apresentados resultados obtidos com espectroscopia Mössbauer suportando a hipótese de baixa dimensionalidade. O composto é paramagnético até 15 K, a partir daí as linhas do espectro alargam-se progressivamente, até que por volta de 12 K o espectro é composto de uma componente paramagnética e de um sexteto magnético. Finalmente, por volta de 8 K, 95% do espectro corresponde ao sexteto magnético, e 5 % corresponde a uma componente paramagnética, provavelmente associada a impurezas de F^{+3} . Os parâmetros hiperfinos a 300 K e a 4.2 K são comparáveis àqueles obtidos por outros autores. No intervalo entre 15 K e 4.2 K não existem resultados Mössbauer publicados, de modo que não temos como fazer comparações. No entanto, a curva de H (campo hiperfino) versus T é tipicamente uma curva de Brillouin, cujo ajuste para obtenção dos parâmetros críticos encontra-se em andamento. A simples forma da curva sugere a consistência dos nossos resultados.

Metais e Ligas (MMM) - 21/05/93

Estudo das interações hiperfinas em ligas do sistema pseudo-binário $Ce(Fe_{1-x}Al_x)_2$ por espectroscopia Mössbauer de ^{57}Fe .

PÉREZ, C. A. S.

IF-UFRJ

BAGGIO-SAITOVITCH, E.; CUNHA, S. F. DA

CBPF

A espectroscopia Mössbauer de ^{57}Fe está sendo utilizada na caracterização das propriedades magnéticas de ligas do composto pseudo-binário $Ce(Fe_{1-x}Al_x)_2$ em toda a faixa de concentração onde se forma a estrutura cúbica de Laves tipo $MgCu_2$. Estudos de difração de raios-X e magnetometria em função da temperatura e do campo aplicado tinham sido previamente realizados

nas amostras. A temperatura ambiente as amostras ricas em Fe ($x \leq 0.15$) apresenta um espectro Mössbauer típico de uma interação paramagnética com valores do desdobramento quadrupolar que diminui conforme se acrescenta Al ao sistema. Nas amostras ricas em Al ($x \geq 0.6$) os espectros são pouco resolvidos o que dificulta sua análise. A baixas temperaturas as amostras ricas em Fe apresentam espectros típicos de interações magnéticas hiperfinas. As amostras ricas em Al só apresentam evidências de interações magnéticas a 4.2 K. Todos os parâmetros Mössbauer são analisados em função da concentração e temperatura.

ESTUDO DO CAMPO MAGNÉTICO HIPERFINO NO SISTEMA ISING

$Fe_xZn_{1-x}F_2$.

ARAÚJO, J. H. DE

UFRN

CUNHA, J. B. M. DA; VASQUEZ, A.

UFRGS

MONTENEGRO, F. C.; REZENDE, S. M.; COUTINHO

FILHO, M. D.

UFPE

O efeito da temperatura no campo magnético hiperfino dos antiferromagnetos diluídos $Fe_xZn_{1-x}F_2$, é estudado por espectroscopia Mössbauer do ^{57}Fe , em concentrações acima e abaixo do ponto de percolação ($x_p = 0,24$). Em altas concentrações ($x > 0,4$) este sistema é considerado uma excelente realização experimental do modelo de Ising com interação de troca aleatória. Por outro lado, ao aproximar-se do ponto de percolação, o sistema apresenta várias características de um vidro de spin tridimensional. Os espectros Mössbauer apresentam um padrão magnético de oito linhas cujas intensidades e larguras evoluem com a diluição de Zn. Tais efeitos são interpretados como uma distribuição de campos hiperfinos causada pela desordem substitucional. Na região próxima da transição magnética, o sistema apresenta um comportamento dinâmico diferente para concentração.

IMPUREZAS DE Fe EM Mo e Nb

PETRILLI, H. M.; FROTA-PESSÔA, S.

USP

Recentemente desenvolvemos um método (RS-LMTO-ASA) implementado no espaço direto que permite o cálculo da estrutura eletrônica na ausência de periodicidade(1,2). O RS-LMTO-ASA é baseado no formalismo LMTO-ASA e no método de recorrência. Neste trabalho utilizamos o método e uma base mínima constituída por orbitais s,p e d para obter a estrutura eletrônica em torno de uma impureza substitucional de Fe em matrizes de Mo e de Nb na estrutura bcc. Nossos cálculos indicam que a impureza de Fe apresenta momento magnético na matriz de Mo e é não magnética

no Nb. Esse comportamento é observado experimentalmente. Apresentamos também valores para o deslocamento isomérico e campo hiperfino no Fe e comparamos com valores experimentais quando existentes. É interessante notar que, ao contrário do caso de impurezas 3d em Cu, nossos resultados não estão em concordância com os obtidos utilizando o KKR-GF com uma base s,p e d, que apresentam momento considerável para o Fe em ambos Mo e Nb. No entanto os resultados concordam bem com os obtidos pelo grupo de Jülich, quando uma base s,p,d e f é utilizada no cálculo KKR-GF(3). Nossos resultados demonstram que, como era de se esperar, a inclusão de elétrons f não é essencial para uma boa descrição do magnetismo. (1) P.R. Peduto, S. Frota-Pessôa, M. Methfessel, Phys. Rev. B44 13283 (1991) (2) S. Frota-Pessôa, Phys. Rev. B46, 14570 (1992) (3) P. Lang, B. Dittler, R. Zeller and P.H. Dederichs, J. Phys. Condens. Matter 4 ,911 (1992)

Campo hiperfino magnético nas ligas de Heusler Co_2YZ ($Y = V, Nb, Ta, Cr$; $Z = Al, Ga$).

PENDL JÚNIOR, W.; CARBONARI, A. W.; ATTILI, R. N.; SAXENA, R. N.

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

OLZON-DIONYSIO, M.; SOUZA, S. D. DE
Departamento de Física, UFSCar, São Carlos

Um aspecto interessante sobre campos hiperfinos magnéticos (CHM) atuando nos sítios não magnéticos das ligas de Heusler do tipo Co_2YZ foi observado recentemente: os valores dos campos reduzidos tanto no sítio Z medidos no Sn como no sítio Y medidos no Ta dependem apenas da natureza química do elemento de transição não magnético Y. Além disto os campos reduzidos $H_{Ta}/\mu C_0$ e $H_{Sn}/\mu C_0$ seguem a tendência já observada de aumento do campo com o número de elétrons de condução. Os campos reduzidos aumentam quando o elemento de transição no sítio Y pertencente ao grupo IIIB (Sc) é substituído por outro elemento do grupo IVB (Ti, Zr) com um número maior de elétrons d. O comportamento para as ligas contendo V e Nb é anômalo, pois os campos reduzidos diminuem quando um elemento do grupo IVB é substituído pelo elemento do grupo VB (V, Nb) com um número ainda maior de elétrons d. Com o objetivo de investigar mais o comportamento do CHM no sítio Y em função da natureza química do elemento de transição não magnético foram realizadas as medidas de CHM no Ta nos sítios atômicos de V, Nb, Ta e Cr nas ligas de Heusler Co_2VGa , Co_2NbGa , Co_2TaAl e Co_2CrAl .

As medidas de CHM foram realizadas pela técnica de correlação angular gama-gama perturbada, utilizando a cascata gama 133-482 keV do ^{181}Ta no decaimento β^- do ^{181}Hf . Um espectrometro gama com detectores de BaF_2 foi utilizado para estas medidas. As ligas foram confeccionadas pela fusão em forno de arco dos

componentes metálicos com $\approx 0.1\%$ dos átomos de V, Nb, Ta e Cr substituídos pelo ^{181}Hf radioativo. Os resultados de CHM no ^{181}Ta no sítio Y das ligas Co_2VGa , Co_2NbGa , Co_2TaAl e Co_2CrAl são, respectivamente -218 kOe, -193 kOe, (-)48 kOe e -123 kOe. Tais resultados são comparados e discutidos em termos da sistemática do CHM nas ligas de Heusler baseadas no cobalto.

Estudo de Fosfatos da Série Hureaulita

MOREIRA, L. DE F.; DOMINGUES, P. H.;
MATTIEVITCH, E.

IF/UFRJ

Estão sendo estudadas várias amostras da série isoestrutural hureaulita, $Fe_xMn_{5-x}(PO_4H)_2(PO_4)_2 \cdot H_2O$, $0 \leq x \leq 5$. Esta série tem estrutura cristalina monoclinica onde os íons magnéticos que possuem coordenação octaédrica são distribuídos em pentâmeros ligados por arestas, sendo que cada pentâmero é ligado aos outros pelos vértices dos octaédros externos. Em cada pentâmero existem três sítios de Fe^{2+}/Mn^{2+} cristalográficamente diferentes na proporção 1:2:2. Para $x=5$, os íons ferro se acoplam ferromagneticamente dentro de cada pentâmero e estes antiferromagneticamente entre si. Verificou-se que ao longo da série o acoplamento magnético varia de antiferromagnético para $x=5$, passando a um ordenamento antiferromagnético com canting (ferromagnetismo fraco) para concentrações intermediárias e terminando com ordenamento ferromagnético para $x=0$. A transição de fase ocorre para temperaturas em torno de 7K.

Estudo do $Li_xFe_3O_4$

DOMINGUES, P. H.; NETO, J. M.

IF/UFRJ

O lítio quando inserido intersticialmente na magnetita provoca alterações no equilíbrio de cargas do sistema, gerando uma fase $LiFe_3O_4$ paramagnética à temperatura ambiente, originária da redução e consequente deslocamento de Fe^{3+} em sítios tetraédricos para sítios octaédricos vizinhos. Este deslocamento afeta o mecanismo de transferência de cargas (electron hopping) entre os íons de ferro nos sítios octaédricos da magnetita para $x \geq 0.27$, sendo previsto tanto pela espectroscopia Mössbauer como por difração de raios-x que para $x=1$ deve existir somente a fase $LiFe_3O_4$ que é um composto novo. São apresentados os resultados de medidas de susceptibilidade magnética e magnetização nestes materiais para $x \leq 1$ que confirmam estas previsões.

Estudo sistemático do campo hiperfino magnético nas ligas de Heusler Co_2YZ .

CARBONARI, A. W.; SAXENA, R. N.; PENDL JÚNIOR, W.; ATTILI, R. N.

*Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares,
IPEN-CNEN/SP.*

Os modelos teóricos que descrevem o comportamento do campo hiperfino magnético (CHM) nos sítios não magnético em ligas de Heusler foram elaborados para explicar a sistemática nas ligas do tipo X_2MnZ . Nestes modelos o átomo Z é representado por um poço de potencial quadrado e o formalismo da teoria de espalhamento é usado para obter a polarização dos elétrons de condução tipo s (sCEP) da matriz. Estes modelos supõem basicamente que a sCEP é perturbada fortemente pelo excesso de elétrons sp da impureza.

No presente trabalho é utilizado o modelo de Blandin e Campbell^a para calcular os valores de CHM reduzido no sítio Y em um grande número de ligas de Heusler do tipo Co_2YZ , que são comparados com os valores experimentais obtidos pela técnica de correlação angular gama-gama perturbada usando o ^{181}Ta como núcleo de prova no sítio Y. O modelo supõe que as ligas de Heusler são constituídas por uma matriz não magnética com impurezas magnéticas e não magnéticas. A interação de troca entre os spins dos elétrons da banda de condução da matriz e os elétrons do íon magnético induz uma oscilação na densidade de elétrons de condução, que por sua vez é espalhada pelo potencial da impureza não magnética criando uma densidade de spins no núcleo do sítio não magnético.

Os cálculos conseguem reproduzir bem a sistemática já observada^b de aumento do campo com o número de elétrons de condução: os campos reduzidos aumentam quando o elemento de transição no sítio Y pertencente ao grupo IIIB (Sc) é substituído por outro elemento do grupo IVB (Ti,Zr) com um número maior de elétrons d; e a descontinuidade desta tendência para as ligas contendo V, Nb, Ta e Cr, pois os campos reduzidos diminuem quando um elemento do grupo IVB é substituído pelo elemento do grupo VB (V,Nb) ou VIB (Cr) com um número ainda maior de elétrons d.

^aA. Blandin and J.A. Campbell, Phys. Rev. Lett 31,51(1974)

^bA.W. Carbonari, W. Pendl Jr., R.N. Attili and R.N. Saxena, Hyperfine Interact. a ser publicado

**SIMULAÇÕES DO RUÍDO BARKHAUSEN
EM FERROMAGNETOS: UMA
FERRAMENTA PARA A
INTERPRETAÇÃO DOS EXPERIMENTOS?**

SOMMER, R. L.

Departamento de Física UFSM

GOMES, A. A.

CBPF-CNPq

O ruído Barkhausen é constituído dos impulsos de tensão que aparecem em uma bobina sensora que envolve uma amostra de material ferromagnético. Os impulsos são produzidos por variações rápidas de fluxo resultantes do processo de bloqueio/ desbloqueio das

paredes de domínios. Este bloqueio ocorre devido às interações das paredes com os defeitos metalúrgicos do material ou por instabilidades na configuração de domínios. A histerese, as perdas de potência e o campo coercivo são características dos ferromagnetos intimamente ligadas ao ruído Barkhausen e daí o interesse em seu estudo. Neste trabalho, um conjunto de simulações do ruído Barkhausen é apresentado. A proposta do trabalho é sugerir uma maneira de entender as medidas dos espectros de potência realizadas em ferromagnetos. Em particular, influência do modelo específico e do método de integração é discutida.

**RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR
NOS COMPOSTOS $Gd_2Fe_{17}N_x$**

SARTHOUR⁺, R.

CBPF

GAMA, S.; COLUCCI, C. C.

UNICAMP

RIEDI, P. C.

Univ. St. Andrews, Reino Unido

GUIMARÃES, A. P.

CBPF

A série de compostos intermetálicos nitrogenados $R_2Fe_{17}N_x$ apresenta grande interesse como matéria prima para a fabricação de ímãs permanentes. No presente trabalho apresentamos medidas de RMN do ^{155}Gd , ^{157}Gd e ^{57}Fe a 4,2 K em amostras dos compostos $Gd_2Fe_{17}N_x$, com $x=0, 0,5, 1,0, 1,5, 2,0, 2,14$ e $3,0$. Os espectros são complexos, devido à presença das ressonâncias do Gd e do Fe, e pelo fato de serem comparáveis as magnitudes das interações hiperfinas magnéticas e elétricas no caso do Gd. À medida que aumenta a concentração de nitrogênio, a intensidade do sinal de RMN cai, o que está correlacionado com o aumento da coercividade. As linhas associadas ao nitrato surgem apenas nas amostras mais concentradas.

⁺Bolsista do CNPq

**Magnetic effects of a stress-strain field in
 $Pr_2Fe_{17}N_x$ alloys**

PERSIANO, A. I. C.; CAMPOS, A. A.; ALÍPIO
MANSUR, R. A.; BATISTA, F. A.; ARDISSON, J. D.;

ROGERIO BERTOLONI, M. R.

Departamento de Física-UFMG

GAMA, S.; COLUCCI, C. C.

Instituto de Física "Gleb Wataghin"-UNICAMP

The effects of different nitrogen contents in powdered $Pr_2Fe_{17}N_x$ alloys nitrated in the range 400-600 C are studied by metallography, TMA and Mössbauer spectroscopy carried out at room temperature. The results indicate the presence of three magnetically distinct structures: a paramagnetic phase, a fully magnetic phase and a partially magnetized structure corresponding to the original 2:17 compound, a N-saturated

phase and the effects of a stress-strain field produced by the expansion of the N-saturated phase in contact with the 2:17 matrix respectively. A particle-model involving the geometrical relationship of the three structures is successfully employed to account for the transformations observed in the Mössbauer spectra as well as to explain the early saturation of the hyperfine field observed for nitrogen contents as low as 1.5 atoms nitrogen per formula unit.

IRRADIAÇÃO DE POLIOLEFINAS COM FEIXE DE ELÉTRONS- ESTUDO DA RETICULAÇÃO DE POLIETILENO CLOROSULFONADO VIA RADICAIS LIVRES.

ANDRADE, L. D.; AMARAL, L. Q. DO
Instituto de Física- USP
 AKCELRUD, L.
Escola de Química- UFRJ

O efeito da irradiação com feixe de elétrons sobre polietileno clorosulfonado continuou a ser estudado com vistas a avaliação das modificações provocadas agora com doses de até 50 Mrad. Foram utilizadas as técnicas de extração em solvente, fluorescência de raios-X e calorimetria diferencial de varredura (DSC) em função da dose de radiação. Na extração em solvente determinamos o grau de reticulação. Na fluorescência determinamos a concentração de cloro presente no polímero, uma vez que no processo de reticulação química se supõe a formação do retículo via eliminação de Cl. No DSC observou-se a variação temperatura de fusão do polietileno clorosulfonado. Verificou-se haver uma predominância do processo de reticulação sobre a degradação. Os resultados permitiram uma identificação dos possíveis sítios de reticulação.

INFLUÊNCIA DA PRATA NAS CARACTERÍSTICAS DE UMA LIGA $Cu - Al - Ag$ (83% Cu - 12% Al -5% Ag)

ADORNO, A. T.; BEATRICE, C. R. S.; SIGOLI, F. A.
Instituto de Química de Araraquara - UNESP

A liga $Cu - Al - Ag$ apresenta algumas características interessantes, como a ausência de fases ternárias em uma larga faixa de composições e, na região rica em cobre, as mesmas fases presentes na liga binária $Cu - Al$. Neste trabalho, as fases presentes na liga $Cu - Al - Ag$ (83% Cu - 12% Al -5% Ag) até em torno de 900° C, foram identificadas e caracterizadas por difração de raios-X, metalografia e microscopia eletrônica de varredura. Os dados obtidos indicam que até em torno de 830° C a liga estudada apresenta-se bifásica, com as fases α (solução sólida de Al e Ag no cobre) e γ (Al_4Cu_9). Acima dessa temperatura, existe apenas a fase β (Cu_3Al), formada a partir da combinação das duas fases anteriores. O

limite do campo de existência da fase β , na liga considerada, fica bastante alterado em relação àquele verificado para a liga binária $Cu - Al$. Resultados obtidos por microscopia eletrônica de varredura (elétrons retro-dispersados) indicam que a prata presente na liga distribui-se preferencialmente sobre a fase γ e vai sendo dissolvida à medida que a temperatura aumenta, não sendo possível detectar a prata quando a liga torna-se monofásica. Medidas de microdureza mostram que a fase γ apresenta um valor inicial bastante elevado, que vai diminuindo com o aumento da temperatura. Os resultados obtidos parecem indicar que as alterações no campo de estabilidade da fase β e na dureza da liga devem ser devidos à presença da prata.

FOCALIZAÇÃO DE FEIXE ELETRÔNICO EM FORNO DE FUSÃO POR ZONA FLUTUANTE: SIMULAÇÃO NUMÉRICA

MENDONÇA, C.
DF-UFSCar

Um forno para crescimento de cristais metálicos pelo método de fusão por zona flutuante foi construído no Departamento de Física da Universidade Federal de São Carlos. Elétrons emitidos por catodo são acelerados em direção à amostra, fundindo-a localmente. O catodo é envolto por armadura metálica que modela o campo eletrostático de modo a focalizar o feixe eletrônico na amostra. A configuração do campo e o movimento dos elétrons foi calculado pelo método das diferenças finitas para diferentes desenhos da armadura. O sistema de equações lineares foi resolvido pelo método de Gauss-Seidel com sobre relaxação, e os valores de contorno na fronteira aberta eram corrigidos ao fim de cada iteração. Os resultados permitiram a fabricação da célula de fusão nas proporções que combinaram a melhor focalização com o menor tempo de voo, a fim de evitar efeitos de carga espacial.

Estudo Mössbauer de Ligas do Sistema

$Fe_2(Co_xNb_{1-x})$
 RAPOSOS, M. T.

Fundção de Ensino Superior de S. J. Del-Rei - FUNREI
 ARDISSON, J. D.; PERSIANO, A. I. C.; MANSUR, R. A.

Depto de Física - Universidade Federal de Minas Gerais,
Cx. Postal 702-30161 - Belo Horizonte - MG. - Brasil.

Usando Espectroscopia Mössbauer e Difractometria de Raios X como técnica auxiliar, estão sendo estudadas ligas do sistema $FeCoNb$ na composição $Fe_2Co_xNb_{1-x}$, para determinação das fases e estruturas magnéticas. Foram preparadas amostras com $x=5, 10, 20, 30, 40, 60, e 80$ at.%, através de fusão em forno a arco, em atmosfera de argônio puro. Seguiu-se um tratamento térmico das mencionadas amostras a 110C/240h. Resultados preliminares permitem supor a existência das

fases nióbio solução sólida, (Nbss), $Fe_{21}Nb_{19}$, Fe_2Nb com estrutura C14 e FeCo, bcc, com dois diferentes sítios para o átomo de ferro, ambas com campo magnético hiperfino. Os espectros Mosbauer das ligas $Fe_2(Co_xNb_{100-x})$, com $40 \leq x \leq 80$ ainda em estudo, mostram um terceiro sexteto devido, provavelmente, a presença de Nb na rede FeCo.

Estrutura eletrônica de intermetálicos pseudobinários de Laves

SILVA, C. M. DA

UFSM - Santa Maria-RS

GOMES, A. G.

CBPF/CNPq - Rio de Janeiro-RJ

As Fases de Laves podem ser descritas como sendo formadas por duas sub-redes. Uma das estruturas em que podem ser encontradas é a cúbica de face centrada, onde em cada um dos quatro sítios são colocados dois átomos do tipo A e quatro do tipo B. Devido a relação determinada entre os raios dos átomos que ocupam as sub-redes A e B é possível a substituição seletiva de átomos em apenas uma das sub-redes, formando compostos pseudobinários com desordem em apenas uma das sub-redes. Mostramos que a matriz que descreve a estrutura destes compostos pode ser substituída por uma matriz estrutura efetiva dependente da energia. Esta contempla, além do caminho na sub-rede desordenada, aqueles possibilitados pela existência da outra. Apresentamos um cálculo da densidade de estados para o intermetálico pseudobinário $Zr(Fe, Co)_2$ pelo método da aproximação do potencial coerente (CPA) de primeiros princípios. Os parâmetros de potencial (centro, largura e distorção das bandas), necessários para a aplicação do método CPA, foram calculados para os compostos ordenados $ZrFe_2$ e $ZrCo_2$ pelo método LMTO-ASA.

ESTUDO DE ORDEM DE CURTO ALCANCE NA LIGA NIQUEL-COBALTO

BEATRICE, C. R. S.; CILENSE, M.

Instituto de Química de Araraquara - UNESP

GARLLIP, W.

Departamento de Materiais - EESC - USP - São Carlos

A literatura revelou por diferentes métodos que o sistema Ni_3Co deveria apresentar o fenômeno de ordem de curto alcance, porém todos os estudos foram conduzidos em temperaturas elevadas. Procuramos no presente trabalho, estudar o fenômeno de ordem de curto-alcance no referido sistema em temperaturas moderadas, utilizando o método de medidas de resistividade elétrica associado ao tratamento isocrônico. A liga foi preparada com elementos de alta pureza, e reduzida a fios com 0,08 cm de diâmetro, em seguida enrolada em espiral e soldada no porta-amostra por meio de arco voltaico. Utilizando o método de 4 pontos, obtivemos

as medidas de resistividade elétrica, cuja resolução foi de 10^{-10} ohm.cm. Após têmpera de $800^\circ C$, a amostra foi submetida ao tratamento isocrônico com intervalos de tempo de 20 minutos e degraus de $30^\circ C$, a partir da temperatura ambiente até $700^\circ C$ e voltando a $300^\circ C$. Todas as medidas foram realizadas na temperatura do nitrogênio líquido. Dos resultados obtidos pudemos concluir que: a) O máximo de ordenação de ordem de curto-alcance é a $465^\circ C$; b) A decomposição da ordem de curto alcance estabiliza após $700^\circ C$, mostrando que a têmpera a partir de $800^\circ C$ está correta para o desordenamento atômico; c) O desvio relativo entre as curvas de aumento e diminuição da temperatura é possivelmente explicado por um incompleto desordenamento; d) A ordem de decomposição na temperatura de $465^\circ C$ é homogênea.

ESTUDO COMPARATIVO DO GCE EM SISTEMAS HEXAGONAIS

MELLO, L. A. D.; PETRILLI, H. M.

IFUSP

FROTA-PESSÔA, S.

IFUSP, MAX PLANCK INSTITUT

STUTGARD-GERMANY

Pode-se mostrar ^a que a ordem de grandeza do GCE no núcleo para sítios em sistemas metálicos é em geral dada pelas integrais radiais I_{pp} (no caso de contribuição de elétrons p) e I_{dd} (devido a elétrons d). Essas quantidades, no caso de sistemas densamente empacotados, são basicamente determinadas pelo tipo de átomo no sítio, dependendo fracamente do resto do cristal. Neste trabalho calculamos os valores de I_{pp} e I_{dd} para elementos 3d e 4d em metais empacotados, incluindo efeitos relativísticos dentro da aproximação escalar relativística. Um estudo comparativo do GCE para elementos 3d e 4d com estrutura hexagonal é feito neste contexto. Finalmente apresentamos cálculos para os GCE para sistemas 4d hexagonais, La, Hf, Re e Os. Comparamos essas quantidades com cálculos para sistemas hexagonais 3d ^b e analisamos os resultados em termos das integrais radiais obtidas anteriormente.

^aBLAHA P, SCHWARTZ K AND DEDERICHS P. 1988, PHYS. REV.B 37, 2792.

^b(1)M.METHFESSEL AND S. FROTA-PESSÔA, J.PHYS; CONDENS.MATTER 2(1990) 149-158. (2)H.M.PETRILLI AND S.FROTA-PESSÔA, J.PHYS; CONDES.MATTER 2(1990) 135-147.

CÁLCULOS DE CAMPOS HIPERFINOS NOS SÍTIOS DE Y SUBSTITUÍDOS POR TERRAS RARAS EM YFe_2 E YNi_2

GUENZBURGER, D.; SOBRAL, R. R.; GUIMARÃES,

A. P.

CBPF

Os compostos intermetálicos formados por elementos de transição com terras raras (TR) apresentam propriedades magnéticas muito interessantes. A substituição de um átomo de Y nos compostos YFe_2 e YNi_2 por átomos de diferentes TR's permite avaliar a influência das impurezas no campo magnético hiperfino do Y mais próximo. Existem resultados experimentais obtidos por RMN^a, mas falta compreender melhor as origens e os mecanismos responsáveis pelos efeitos observados. Neste trabalho descrevemos os resultados de cálculos de primeiros princípios com a teoria de densidade de spin local para aglomerados imersos em sólidos, representando as ligas $Y_{1-x}R_xFe_2$ e $Y_{1-x}R_xNi_2$. Na construção dos aglomerados, foram simuladas situações de baixa e alta concentração de TR. Foi utilizado o método DVM (Variacional Discreto), que tem sido empregado com sucesso no estudo do magnetismo de metais e ligas^b. Foram obtidos os campos hiperfinos de contato e dipolar no núcleo de Y. Verifica-se que o campo dipolar é somente 5-10% do campo de Fermi, e que este último, para um mesmo número de átomos TR próximos, aumenta com o spin da terra rara. Obtiveram-se também os momentos magnéticos locais nos diferentes átomos.

[†]Bolsista do CNPq

^aK.M.B. Alves e A.P. Guimarães, J. Appl. Phys. 70 7632 (1991).

^bD. Guenzburger e D.E. Ellis, Phys. Rev. B 45 285 (1992).

APARECIMENTO DE MOMENTOS MAGNÉTICOS LOCALIZADOS EM LIGAS ANTIFERROMAGNÉTICAS DE CROMO-VANÁDIO

OLIVEIRA, A. J. A. DE; ORTIZ, W. A.

Grupo de Supercondutividade e Magnetismo - DF UFSCar
CAMARGO, P. C. DE
Departamento de Física - UFPR

O Cromo é um antiferromagneto itinerante com temperatura de Néel, $T_N = 311K$, com magnetismo descrito por ondas de densidade de "spins" (SDW). A adição de pequenas quantidades de Vanádio (até 3,4%) em Cromo alteram fortemente T_N . Há dois anos observamos que a suscetibilidade magnética a.c. para Cr-0,2%V e Cr-0,4%V exibem um salto abrupto em T_N não verificado para concentrações mais altas. Os resultados indicam um comportamento $\chi(T)$ proporcional a $1/T$ na fase paramagnética, sugerindo a presença de momentos magnéticos localizados. Estes estariam associados aos íons de Vanádio na rede, que formariam "SDW localizadas". Para ligas de Cromo com elementos ferromagnéticos como Cr-2,22%Fe; Cr-3,35%Fe; Cr-2,79%Co e Cr-1,9%Co encontramos resultados semelhantes. Para elementos não-magnéticos, com exceção do Vanádio, não há, na literatura, resultados equivalentes. Atualmente, estamos verificando se o salto na suscetibilidade magnética a.c. permanece para concentrações maiores que 0,4% de Vanádio

em Cromo. Resultados preliminares indicam a não ocorrência do salto para concentrações de 0,67%; 1,0%; 1,2% e 1,5% de Vanádio em Cromo. Temos também evidências de uma possível mudança da ordem da transição para essas concentrações e estamos investigando se essa mudança de ordem está relacionada com o aparecimento de momentos magnéticos localizados.

ATENUACIÓN ULTRASÓNICA DEBIDA A LAS DISLOCACIONES Y DEFECTO DE MÓDULO ASOCIADO, EN CRISTALES DE COBRE DE ALTA PUREZA

GOBBI, A. O. M.

Depto. de Física - Facultad de Ciencias - URUGUAY.

EIRAS, J. A.

Depto. de Física - Universidade Federal de São Carlos.

Es bien conocido que la atenuación ultrasónica y el defecto de módulo en cristales de cobre puro se deben principalmente a las dislocaciones en el cristal. Las medidas de atenuación ultrasónica y defecto de módulo en el rango del MHz, en cobre deformado, muestran que se deben a la contribución de dos mecanismos: resonancia de dislocaciones (cadena de "Kinks") y relajación debida a las dislocaciones (relajación de Bordoni). En este trabajo se presentan criterios para separar la contribución de cada mecanismo. Los resultados obtenidos en cristales de cobre deformados en las direcciones $\langle 110 \rangle$ y $\langle 111 \rangle$ revelan: a) la atenuación debida a la resonancia depende de la frecuencia y del grado de deformación; b) el ancho del pico de Bordoni es aproximadamente doble de largo que un pico de Debye.

Transição primeira-segunda ordem no sistema intermetaloico (Er.Tb)Co₂

TAKEUCHI, A. Y.; LIMA, L. C. S. DE; CUNHA, S. F.
DA
CBPF

Estudos realizados em compostos RCO_2 (R = terra rara pesada) indicam que $DyCo_2$, $HoCo_2$ e $ErCo_2$ apresentam uma transição magnética tipo primeira ordem, enquanto $TbCo_2$ e $NdCo_2$ apresentam uma transição tipo segunda ordem. A transição de primeira ordem nestes compostos, segundo alguns autores, é devido a mudança na forma da superfície de Fermi que pode provocar um salto no campo magnético interno. Outros autores atribuem este comportamento a alteração na zona de Brillouin refletindo numa distorção da cela unitária. Neste trabalho estudamos o sistema $(Er.Tb)Co_2$ com o objetivo de acompanhar a passagem da transição de primeira para a segunda ordem com a substituição de Er por Tb através de medidas de resistividade elétrica e de magnetização. Trabalhos anteriores realizados no composto $ErCo_2$ indicam que a resistividade elétrica apresenta um aumento de 600% em alguns décimos de grau, tornando a técnica de medidas de resistividade

elétrica bastante sensível a caracterização destas propriedades.

Resultados de resistividade elétrica em função da temperatura (1.5 a 300K) realizados no sistema (Er.Tb)CO₂ indicam que com a substituição de 20% de Tb em ErCo₂, a transição de primeira ordem continua mas, a T_c aumenta de 32K para 62K, e o comportamento logo acima da transição se assemelha a de segunda ordem. Por outro lado, a substituição de 20% de Er no TrCo₂ provoca uma diminuição da T_c de 230K para 200K mas com características de transição de segunda ordem.

**ESTRUTURA ELETRÔNICA PARA
IMPUREZAS INTERSTICIAIS EM
SISTEMAS METÁLICOS : APLICAÇÃO
PARA IMPUREZA DE Fe EM Zr
HEXAGONAL**

FROTA-PESSÔA, S.

USP

Neste trabalho obtemos a estrutura eletrônica e propriedades correlatas em torno de impurezas de Fe em Zr hexagonal. Resultados para o caso substitucional e para o caso intersticial são apresentados. No caso intersticial a impureza de Fe é colocada no centro do interstício octaédrico da rede hcp e seus 6 primeiros vizinhos de Zr são relaxados radialmente em 10% do

parâmetro de rede. Em ambos os casos, para obter a estrutura eletrônica, usamos o RS-LMTO-ASA (1,2) um método autoconsistente implementado no espaço direto, que utiliza a aproximação local para os potenciais de correlação e troca. Para evitar efeitos de superfície, os cálculos são feitos utilizando aglomerados de mais de 1000 átomos. No caso intersticial a impureza de Fe e três camadas de Zr, num total de 19 átomos são incluídos de forma autoconsistente. O potencial dos demais átomos é mantido nos valores de "bulk". Para o caso substitucional 4 camadas de Zr em torno da impureza são incluídas na autoconsistência. Pelo que sabemos este é o primeiro cálculo descrevendo o entorno de uma impureza intersticial, uma vez que os métodos baseados em função de Green como o KKR-GF tem dificuldades em abordar o problema. Os cálculos indicam que a impureza substitucional apresenta comportamento magnético enquanto que o sítio intersticial é não magnético. Esse fato, bem como os valores do deslocamento isomérico e campo hiperfino de contato na impureza de Fe concordam bastante bem com os resultados experimentais obtidos pelos grupos dos profs. Dr. D. Riegel e do Dr. R. Sielemann (Hahn - Meitner Institut, Berlin, Alemanha). (1) P.R.Peduto, S.Frota-Pessôa, M.Methfessel, Phys.Rev.B44 13283 (1991) (2) S.Frota-Pessôa, Phys. Rev. B46,14570(1992)

ÓTICA

Guias de Ondas e Formação de Imagens (OTI, INS) – 19/05/93

PLANAR CHANNEL LiNbO₃ Ti DIFFUSED WAVEGUIDES THEORETICAL MODELING AND EXPERIMENTAL RESULTS

NUNES, F. D.

*Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará
CELASCHI, S.; JESUS, J. T. DE; MONTEIRO, H. S.
CPqD-Telebrás Campinas - São Paulo - Brasil*

Optical waveguides on planar substrate are of key importance for many integrated optical devices. The problem of modeling optical waveguides, in both planar and buried structures, has been extensively studied by many authors, using different refractive index profiles as well mathematical methods. In the case of buried structures, analytical solutions are not possible for the majority of practical cases. This occurs because those refractive index profiles have coupled dependence on spatial variables and no convenient symmetry for the usual coordinate systems may be employed. Therefore, approximative solutions are required such as WKB. In this work a new contribution is given for modeling optical asymmetrical three dimensional (channel) waveguides, using an approximative method called effective refractive index (ERI). The channel waveguide is modeled using an asymmetric refractive index profile, along the diffusion depth (x) direction, coupled to a symmetrical one, along the parallel (y) direction to the substrate surface. The asymmetrical profile is that used by Epstein for modeling ionosphere waveguiding and the symmetrical part is a "bell shaped" (sech^2) one. The ERI method, used for modeling semiconductor laser waveguides, is suitable whenever the profile along one direction (x in our case) is strong enough to mainly determine the properties of the channel waveguide modes. According to the approximative method cited above the channel waveguide problem is reduced to a two planar waveguides along x and y directions. Using the ERI method, the waveguide is solved and mode dispersion, modal cut-off, field distribution, among others, can be fast and easily calculated with a personal computer. Channel waveguides were made by diffusion of Ti in-diffusion in LiNbO₃, showing that Epstein channel model is a good approximation. Preliminary measurements of their characteristic parameters indicate that the theoretical results are in good agreement with them.

Dobra de Frequência em Fibras Especiais

CARVALHO, I. C. S.; MARGULIS, W.; LACERDA, M. M.

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

A geração de segundo harmônico (SH) em fibras óticas é obtida injetando-se radiação infra-vermelha intensa durante algumas horas. Este processo pode ser induzido mais rapidamente acoplando-se o fundamental e o segundo harmônico simultaneamente à fibra e, uma vez preparada, ela passa a gerar instantaneamente o segundo harmônico quando exposta a radiação infra-vermelha. Foi observado não ser possível preparar fibras com núcleo de sílica pura, mostrando a importância dos dopantes para a ocorrência do processo. Fibras de alta qualidade dopadas com terras raras foram recentemente desenvolvidas para aplicações em telecomunicações. Elas também são empregadas em conversão ascendente de frequências com alta eficiência. Na busca de maior eficiência de conversão de SH, estas fibras tem sido estudadas e os resultados se mostram muito promissores.

Neste trabalho, descreve-se estudos do processo de geração de segundo harmônico em fibras dopadas com íons de terras raras. Em particular investigou-se a dobra de frequência em fibras com diferentes concentrações de Er³⁺. O tempo de preparação observado para uma fibra com alta concentração de Er³⁺ foi de poucos minutos, e altas eficiências foram obtidas. Estudos realizados com a técnica de varredura de calor (*HeatScan*) indicam que a dobra de frequência ocorre principalmente a $\sim 30\text{cm}$ da entrada da fibra.

OPTICAL FEEDBACK IN DYNAMIC SINGLEMODE DFB 1.54 μm LASERS COUPLED TO SINGLEMODE FIBERS

BARBOSA, F. R.; BORIN, F.; REGO, A. C. B.; CORAL, C.

CPqD-Telebrás, Campinas

Optical fiber communication systems designed for long haul and high- data rates require use of singlemode lasers. Dynamic singlemode DFB lasers have been successfully applied to these systems. It is required however, that DFB lasers retain their single longitudinal mode characteristic after optical coupling with fibers. In this work we demonstrate 1.54 μm InGaAsP/InP DFB lasers efficiently coupled to singlemode fibers, with coupling coefficients as high as 50%, and small feedback. Coupled powers of 1mW have been attained by using fibers with aspheric hyperbolic microlenses fabricated by arc fusion directly on the fiber tip. We observe, within experimental precision of 10GHz, no influence of the -13dB optical feedback signal on DFB singlemode spectrum, for various temperature and current conditions. Modelling of Gaussian beam laser-fiber coupling, design of aspheric microlens, and analysis of spatial feedback intensity ripple, are included and compared with

experimental results.

FILTROS ESPECTRAIS ENTRE 1 E 100 nm EM FIBRAS ÓPTICAS

CELASCHI, S.; JESUS, J. T. DE; JURIOLLO, A.;
ARRADI, R.
CPqD - TELEBRÁS

Filtros espectrais em fibra óptica monomodo para operação na região entre 1.3 e 1.5 μm foram desenvolvidos utilizando-se a técnica de afunilamento adiabático em fibras com perfil de índice fabricadas especialmente para esse fim. Foram obtidos dispositivos com "Free Spectral Range" (FSR) entre 1 e 150 nm, razões de extinção acima de 15 dB, perdas por inserção inferiores a 0.5 dB. Estes filtros apresentam alta diretividade (> 60 dB) sendo independentes da polarização do sinal de entrada. Os dispositivos são compactamente encapsulados em estruturas que permitem, caso desejado, fácil sintonia de seus espectros de transmissão, preservando contudo uma alta estabilidade mecânica.

O princípio de operação destes filtros está baseado no batimento óptico coaxial, criado ao longo da região afunilada, dos dois primeiros supermodos gerados pelo acoplamento coaxial. Estes dispositivos serão empregados na redução do ruído gerado pela emissão espontânea em amplificadores à fibra, bem como na sintonia de lasers à fibra, entre outras aplicações.

INTERFERÔMETRO EM TEMPO REAL AUTO-ESTABILIZADO

BARBOSA, E.; FREJLICH, J.
UNICAMP

PROKOFIEF, V. V.; GALLO, H.; ANDREETA, J. P.
USP São Carlos

Relatamos o uso de cristais fotorrefrativos $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ em um arranjo holográfico auto-estabilizado para a aviação de microvibrações mesmo em ambientes sensivelmente perturbados. O cristal é utilizado na configuração eletroóptica transversa [1], que faz com que os feixes difratado e transmitido tenham polarização ortogonal à saída do cristal. Elimina-se assim o feixe transmitido através de um polarizador, de modo que o feixe difratado, menos intenso, possa ser observado. O polarizador por onde passa o outro feixe que sai do cristal é ajustado de modo a acoplar as ondas transmitida e difratada para a operação de um loop de "feed-back" negativo opto-eletrônico para a estabilização do sistema durante o processo de gravação [2]. O holograma gravado no cristal é usado como referência para a operação do sistema. Qualquer perturbação no interferômetro altera a defasagem entre o holograma e o padrão de interferência no cristal. Assim, o acoplamento de ondas se altera, provocando uma variação total do feixe, que é então detectada. Este sinal detectado alimenta um

piezoelétrico acoplado a um espelho colocado em um dos feixes do interferômetro. O espelho altera a fase do padrão de interferência, compensando a perturbação original até que o sinal volte a se anular. Demonstramos a possibilidade do uso deste arranjo para obtenção do holograma de um objeto de metal, visando posteriormente a aplicação da técnica em interferometria holográfica em "time-average"

LINE WHITE LIGHT SOURCE FOR IMAGING THROUGH A DIFFRACTIVE LENS

LUNAZZI, J. J.
UNICAMP

A 2D monochromatic transparency is projected onto a diffractive screen by just using a white-light common filament lamp. An image whose enlargement factor is 5 was obtained. In a previous work [1] we described the way to project a 2D monochromatic transparency onto a common diffraction grating used as screen. We demonstrate now that the same procedure allows for the enlarging of the image if the grating is substituted for a Gabor zone plate (GZP). We consider the definition of a GZP to be valid even for the case of the off-axis hologram of a point source when used as a diffractive lens. This kind of element can be used as a lens because it collects light from one point source to be focused into an image region. It is not usually employed for imaging purposes, and is always used under monochromatic light.

References

1) "Lensless slide projection: A demonstrative experience", J.J.Lunazzi, Proc. of the V Simp. Est. de Laser e Aplicações, São Paulo-SP, 26-28, October 1992, pp.335-6.

Acknowledgements: CNPq / FAEP- UNICAMP

Optica Não Linear (OTI) - 19/05/93

INVESTIGAÇÃO DE NÃO-LINEARIDADES ÓPTICAS EM ABSORVEDORES SATURÁVEIS COM A TÉCNICA DE "Z-SCAN"

OLIVEIRA, L. C.; FREIRE, H. J. P.; GUEDES, I.;
ZILIO, S. C.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

A varredura z, técnica precisa e sensível recentemente desenvolvida, tem sido utilizada para medir a refração e a absorção não-lineares. Baseada no efeito da distorção do feixe num meio não-linear e possuindo uma configuração óptica bastante simples, a técnica permite

a determinação do sinal e da magnitude do índice de refração do meio quando no experimento uma abertura é colocada numa posição longínqua do mesmo e a luz transmitida através da abertura é monitorada durante o movimento do meio ao longo do eixo óptico do feixe, passando pelo plano focal. Até o presente a literatura existente acerca do emprego desta técnica relata experimentos com lasers pulsados. Objetivando investigar como a técnica em apreço se aplica a absorvedores saturáveis quando bombeados com lasers c.w., usamos lasers de argônio nas linhas 514 e 488 nm e de corante nas linhas 599, 589, 579 e 569 nm, irradiando amostras de rubi ($\text{Al}_2\text{O}_3:\text{Cr}^{3+}$), alexandrita ($\text{BeAl}_2\text{O}_4:\text{Cr}^{3+}$) e aluminato de gadolínio dopado com cromo ($\text{GdAlO}_3:\text{Cr}^{3+}$). Observamos uma discrepância entre a formulação matemática proposta para a técnica [1] e nossos resultados e que o índice de refração não linear exibe um valor mais alto que o já determinado pela técnica da mistura não-degenerada de duas ondas [2] além de apresentar um efeito de saturação com a intensidade da radiação incidente.

[1] Mansoor Sheik-Bahae et al, IEEE J. Quant. Elect. **26**, 4, 760 (1990). //

[2] J.C. Penaforte et al, Opt. Lett. **16**, 7, 452 (1991).

MEDIÇÃO DE PULSOS CURTOS DE LASER SEMICONDUTOR BASEADA NA GERAÇÃO INTERNA DE SEGUNDO HARMÔNICO

LANG, A.; PERELMUTER, G.; CARVALHO, M. C. R.; MARGULIS, W.
PUC-RIO

Neste trabalho descreve-se uma técnica de medição indireta que permite estimar a duração de pulsos óticos curtos de lasers semicondutores. Ela é baseada na emissão de segundo harmônico (SH) gerada internamente no laser. A potência de SH é proporcional ao quadrado da potência de pico da radiação fundamental. Desta forma, um aumento do segundo harmônico é indicativo de uma redução na duração dos pulsos gerados. Como esta técnica é independente de movimentos mecânicos foi possível automatizá-la, através de um software que permite a leitura on-line na tela do computador da duração do pulso. Uma vez calibrado o sistema dispõe-se de uma técnica simples e de boa resolução temporal. Apresentam-se resultados experimentais da medição dos pulsos óticos gerados por chaveamento de ganho de um laser de InGaAsP ($1.3\mu\text{m}$). O comportamento observado é similar aquele obtido utilizando-se o sistema osciloscópio de amostragem e fotodetector, apesar da resolução temporal ser neste caso limitada a 50ps.

EFEITO STARK AC EM VIDROS DOPADOS COM SEMICONDUTORES

TSUDA, S.; CRUZ, C. H. B.
IFGW - UNICAMP

Neste trabalho demonstramos a ocorrência do efeito Stark óptico em vidros dopados com microcristalitos semicondutores excitados por pulsos óticos intensos. Os vidros dopados usados contêm microcristalitos de $\text{CdS}_x\text{Se}_{1-x}$ e são filtros óticos do tipo Corning CS-2.62. Os pulsos lasers têm duração de 60 fs e intensidade de até 800 GW/cm^2 . A medida é feita usando a técnica de excitação-e-prova com pulsos de prova com duração de 15 fs. Os dados obtidos mostram que ocorre um deslocamento para o azul da banda de absorção cujo tempo de resposta é instantâneo na resolução do experimento (20 fs).

A dependência medida do deslocamento da banda com a intensidade do pulso de excitação mostra que o experimento pode ser modelado como no caso de um sistema de dois níveis excitado por um campo óptico intenso e tratado dentro do modelo do "átomo vestido".

LINEAR AND NONLINEAR OPTICAL CHARACTERISTICS OF POROUS SILICON

GHINER, A. V.; SURDUTOVICH, G. I.
Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

Method of integral equations (MIE) in nonlinear optics is applied for solving of fundamental problem of connection of Lorentz microscopic and Maxwell macroscopic equations as well as for calculation of a macroscopic susceptibility of a medium in dependence from its microstructure. This method was successfully applied to linear and nonlinear three-dimensional media [1,2]. Due to stretched form of the pores porous silicon (PS) films in a good approximation may be considered as two-dimensional systems. Since properties of such systems may strikingly differ from those of three-dimensional isotropic media this problem requires a separate consideration. A peculiarity of PS samples consists in a fact that characteristic size (diameter) of pores is much larger of interatomic distance and much less than wavelength. Our approach to MIE allowed to solve a problem of connection micro and macro-fields for a general case of anisotropic and nonlinear medium [3]. Here we applied this approach to PS films. Secondly, we advanced an idea of use of "macroscopic large" dielectric sphere (cylinder) as an ideal dipole (elementary) radiator and rewrote all approach of MIE for two-dimensional case. As a result we obtain formulas for dielectric permittivity of composite systems with arbitrary density of dielectric columns (spheres) when local field corrections are taken into account. Discussion of Maxwell-Garnett and Bruggeman formulas is given.

1. M. Born, E. Wolf, Principles of Optics, Pergamon Press, Oxford, 1964.

2. N. Bloembergen, P.S. Pershan, Phys. Rev. **128**, 606, 1962.

3. A.G. Ghiner, G.I. Surdutovich, submitted to Phys. Rev. A.

Ótica Quântica e Propriedades Óticas da Matéria Condensada (OTI) - 19/05/93

VALIDADE DA EQUAÇÃO MESTRA PARA MICROMASERS COM BOMBEAMENTO NÃO POISSONIANO

KHOURY, A. Z.; DAVIDOVICH, L.

Departamento de Física, PUC-Rio

ZHU, S.; SU, C.

Center for Advanced Studies, University of New Mexico

A possibilidade de se obter luz laser sub-Poissoniana controlando-se a estatística de bombeamento dos átomos ativos tem despertado grande interesse nos últimos tempos, tanto do ponto de vista teórico como experimental. Este problema pode ser tratado utilizando-se as equações de Langevin ou através de uma equação mestra obtida pelo tratamento da matriz densidade. O primeiro método envolve uma linearização em torno da solução estacionária, logo é válido desde que as flutuações do campo e das variáveis atômicas sejam muito menores que os respectivos valores estacionários. Este tratamento é obviamente válido no regime muito acima do limiar falhando na região de baixa intensidade. Já o tratamento com a equação mestra não envolve nenhuma linearização sendo portanto de validade mais geral. Para campos intensos ambos os métodos levam aos mesmos resultados e prevêem para o bombeamento regular dos átomos uma redução de 50% no ruído do número de fótons com relação ao bombeamento usual (Poissoniano). Para baixas intensidades, entretanto, e especialmente no caso de micromasers, os dois tratamentos podem levar a conclusões bastante diferentes. Uma vez que os micromasers podem operar com poucos fótons na cavidade, tendo ao mesmo tempo grande dispersão no número de fótons, as condições para a linearização das equações de Langevin são claramente violadas. Por outro lado, estabelecemos as condições de validade da equação mestra para micromasers com bombeamento não Poissoniano.

THE QUADRATIC TIME-DEPENDENT HAMILTONIAN: EVOLUTION OPERATOR, SQUEEZING REGIONS IN PHASE SPACE AND TRAJECTORIES.

MIZRAHI, S. S.

UFSCar

MOUSSA, M. H. Y.

IFQSC-DFCM-USP

BASEIA, B.

UFPPB

We consider the most general Time-Dependent (TD) quadratic hamiltonian written in terms of the bosonic operators a and a^\dagger , which may represent either a charged particle subjected to a harmonic motion, immersed in a TD uniform magnetic field, or a single mode photon field going through a squeezing medium. We solve the TD Schrödinger equation by a method that uses, sequentially, a TD unitary transformation and the diagonalization of a TD invariant, and we verify that the exact solution is a complete set of TD states. We also obtain the evolution operator which is essential to express operators in the Heisenberg picture. The variances of the quadratures are calculated and a phase space of parameters is introduced, in which we identify *squeezing regions*. The results for some special cases are presented and as an illustrative example the *parametric oscillator* is revisited and the trajectories in phase space are drawn.

ESTADOS COMPRIMIDOS DE FASE EM CAVIDADES

DAVIDOVICH, L.

Depto. de Física da PUC/RJ

Recentemente, mostrou-se que, através de medidas não-demolidoras, é possível preparar estados com número de fótons bem definido (estados de Fock) em uma cavidade.^a Utilizando um esquema experimental semelhante, propomos um método para preparar em uma cavidade um estado com fase melhor definida que a de um estado coerente. A incerteza final obtida para a fase do campo depende do fator de qualidade da cavidade e da dispersão de velocidades do feixe atômico. Para cavidades de baixa dissipação, e feixes suficientemente monocinéticos, é possível atingir um alto grau de compressão de ruído de fase, aproximando-se assim os auto-estados de fase definidos por Pegg e Barnett.

^a M. Brune, S. Haroche, V. Lefèvre, J. M. Raimond e N. Zagury, Phys. Rev. Lett. **65**, 976 (1990); M. Brune, S. Haroche, J. M. Raimond, L. Davidovich e N. Zagury, Phys. Rev. A **45**, 5193 (1992).

^b D. T. Pegg e S. M. Barnett, Europhysics Letters **6**, 483 (1988); Phys. Rev. A **39**, 1665 (1989).

Teoria de Não-linearidades Óticas em Pocos Quânticos

PEREIRA JR, M. F.

PUC-RJ

BINDER, R.; KOCH, S.

University of Arizona

A interação da radiação com poços quânticos semicondutores pode ser tratada de forma realística através de equações de Bloch óticas generalizadas. As tais equações incluem o caráter quasi-bidimensional do potencial de confinamento quântico, os efeitos devidos a strain interno e ao acoplamento das bandas de valência, além dos efeitos de muitos corpos, que dão origem a forte não-linearidade dos materiais semicondutores. O espectro de absorção é obtido através da solução numérica da equação de Bloch para a polarização (Equação de Bethe-Salpeter). A medida que a densidade de portadores no sistema é aumentada, os picos excitônicos característicos do regime de absorção linear são saturados até desaparecerem completamente em função dos efeitos de muitos corpos. No limite de alta densidade de portadores, encontramos absorção negativa (ganho) e os efeitos de muitos corpos se manifestam através da renormalização do gap, preenchimento do espaço de fase e blindagem do potencial Coulombiano. A teoria é aplicada para situações de quasi-equilíbrio, tanto para poços de GaAs-AlGaAs (mesmo parâmetro de rede) quanto para InGaAs-GaAs (poços sobre strain de compressão). Nesses últimos, a maior curvatura efetiva das bandas de valência é responsável por uma inversão de população mais eficiente. Como consequência, esses materiais apresentam maior não-linearidade, que pode ser medida através da redução da intensidade de saturação e da corrente limiar de operação laser. A teoria pode ser usada diretamente para interpretação de espectros óticos e como ponto de partida para simulação realística de dispositivos óticos e optoeletrônicos.

^aM.F. Pereira Jr., W.W. Chow, and S.W. Koch, to appear in JOSA B

REDUÇÃO DE RUIDO NUM OSCILADOR LINEAR ACOPLADO A UM OSCILADOR NÃO-LINEAR.

BASEIA, B.; SILVA, A. DE S.; BONATO, C. A.
UFPB

Investigamos algumas circunstâncias em que um oscilador linear (OL) acoplado a um oscilador não-linear (ON) é contagiado pelo efeito "squeezing" que emerge neste último oscilador. O método utiliza o modelo de Gordon, Walker e Louisell para osciladores acoplados e sucessivas transformações de rotação e escala, para diagonalizar equações de movimento, de Heisenberg. Da solução do sistema diagonalizado, obtém-se a solução original pela transformação inversa, fornecendo as variações nos operadores de quadratura e fase. Foi mostrado que para determinados valores dos parâmetros que afetam a Hamiltoniana do Sistema (como constante de acoplamento, constantes de força e massas) o squeezing gerado no ON pode ser "transmitido" ou não ao OL. Para pequenos valores da constante de acoplamento o squeezing afeta apenas uma das quadraturas do ON contagiando as duas componentes de quadraturas

do OL, alternando-se o efeito entre elas. Para altos valores da constante de acoplamento os osciladores trocam de papéis, o efeito "squeezing" alternando-se nas quadraturas do ON permanecendo numa das quadraturas do OL.

INTERAÇÃO DE LUZ COMPRIMIDA COM ÁTOMOS DE DOIS NÍVEIS

DANTAS, C. M. A.; BAGNATO, V. S.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

BASEIA, B.

Departamento de Física - UFPB

Vamos investigar algumas características da interação de luz comprimido com átomos de dois níveis, com ênfase em estatística de fótons e "collapses" e "revival" da inversão atômica quando o campo é considerado inicialmente em um estado de número comprimido e em um estado de número deslocado. Nós encontramos para alguns casos "revivals" secundários relativo às oscilações na distribuição de número de fótons, para estados de número deslocado e "colapso" sem "revival" para estados de número comprimido e discutimos em detalhes a diferença entre estes vários resultados, observando que os efeitos de "colapso" e "revival" são respostas quânticas que se obtêm se o estado inicial do campo é clássico.

PROCESSOS DE PERDA POR COLISÃO EM ARMADILHAS MAGNETO-ÓPTICAS

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

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

WANG, Y.; TSAO, C.; WEINER, J.

University of Maryland, College Park, USA

JULIENNE, P.

*National Institute of Standards and Technology,
Gaithersburg, USA*

Neste trabalho usamos uma armadilha Magneto-Óptica (MOT) para átomos de sódio com o objetivo de estudar efeitos colisionais que contribuem para taxa de perda de átomos. Nosso método é semelhante ao recentemente empregado por Hoffmann e colegas⁽¹⁾. Durante o processo de carga da armadilha a evolução temporal do número de átomos (N) obedece uma equação aproximadamente dado por $\frac{dN}{dt} = L - (\gamma + \beta \frac{N}{V})N$, sendo L a taxa de carga, γ a taxa de colisão com gás de fundo e β o coeficiente de perda de átomos devido às colisões entre átomos aprisionados. Devido a efeitos de múltiplos espalhamentos de fótons na armadilha $\frac{N}{V} = n_c$ permanece constante durante o processo de acúmulo de átomos. Desta forma, $N(t)$ obedece uma lei exponencial simples permitindo a medida direta de $(\gamma + \beta n_c)$. Cada contribuição pode ser separada trabalhando-se em transições eletrônicas diferentes. Medimos β para várias intensidades de luz e comparamos com modelos teóricos baseados em colisões envolvendo mudança de estrutura hiper-

fina e escape radiativo. Os valores medidos permitem obter informações sobre limites de densidade impostos por processos colisionais. (FAPESP/NSF). // ((1) D. Hoffmann et al, Phys. Rev. Lett. 69m 753 (1992).

ARMADILHA MAGNETO-ÓPTICA DE ÁTOMOS DE CÉSIO UTILIZANDO LASER DE DIODO

CHEVROLLIER, M.; TUBOY, A. M.; LEZAMA, A.; BAGNATO, V. S.; ORIÁ, M.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

Utilizamos uma armadilha do tipo Magneto-Óptica para aprisionar átomos neutros de Cs por pressão de radiação. O bombeamento ótico dessa armadilha é feita com diodos lasers estabilizados cuja largura de linha é uma fração de MHz. Um segundo laser é usado para o rebombeio dos átomos que fazem transições erradas por bombeamento ótico. Com feixes de diâmetros de 2 mm conseguimos aprisionar até 10^5 átomos. Apresentamos nesse trabalho resultados de medidas de tempo de carga e a observação de estruturas espaciais devido a presença de uma força extra no mecanismo da armadilha devido a um desalinhamento dos quatro feixes de luz do plano ortogonal ao eixo das bobinas do campo magnético. Nossos resultados são interpretados em termos de forças de vórtice, que aparecem devido ao perfil gaussiano dos feixes e as suas disposições espaciais.

METHOD OF DETERMINATION OF OPTICAL ANISOTROPY IN PRESENCE OF A STRONG SCATTERING

BAGNATO, V. S.; BASMAJI, P.; GRIVICKAS, V.; SURDUTOVICII, G. I.; VITLINA, R.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

A method to determine optical anisotropy of a film through the measurement of Brewster angle and s/p-polarization reflectivity is described. The technique was tested with samples of isotropic crystalline Si and calcite. Once prove the validity of the method we applied it to samples of porous silicon (PS) grown on crystalline silicon substrate. Problems of surface scattering were solved with the appropriate use of geometrical optics. Since a scattering cancels positive anisotropy of a bulk PS material then an experimentally measured positive anisotropy of a sample is, in fact, a lower limit of the PS sample anisotropy. Investigations of the same samples with and without substrate demonstrate disappearance of the Brewster angle in samples with substrate and appearance of a minimum in angular dependence of p-polarized wave reflectivity. The magnitude of a shift of this minimum relative to the Brewster angle permits to define an anisotropy of the sample. The connection between anisotropy and porosity for different models of PS micromorphology is presented. The experiment

confirms the existence of two PS layers with smaller and larger densities. For samples without substrate the difference between Brewster's angles of different sides of a sample reaches up to 6° , what means 20% difference of refractive indices of the layers.

Construção e Automatização de uma Aparelhagem para Medidas Magneto-Ópticas

BELO, L. C. M.; RIGHI, A.; LEITÃO, U. A.

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais

Descrevemos neste trabalho a construção e automatização de um a aparelhagem para medidas magneto-ópticas. Em sua configuração básica, o equipamento permite a medida de birrefringência linear pelo método de Sénarmont, aliado à técnica de modulador elasto-óptico, com detecção via Lock-In. O equipamento é munido de um microscópio que permite a visualização da amostra, com resolução de aproximadamente $50 \times 50 \mu m^2$. Pequenas alterações nos elementos ópticos permitem uma rápida adaptação da aparelhagem para realização de medidas de rotação de Faraday e dicroísmo linear e circular. O processo de compensação e aquisição de dados é realizado automaticamente através de um microcomputador. A parte eletrônica é composta por uma interface que permite ao microcomputador controlar um motor de passo.

Financiamento: FAPEMIG, CNPq e FINEP.

DETEÇÃO SIMULTÂNEA DE EFEITOS MAGNETO-ÓPTICOS

RIGHI, A.; LEITÃO, U. A.

Departamento Física, Universidade Federal de Minas Gerais

A superposição de efeitos magneto-ópticos é um fenômeno comum à cristais magnéticos de baixa simetria. Frequentemente, a coexistência de efeito de simetria concorrentes dão origem a novos efeitos magneto-ópticos^a, interferindo de forma incontrollável na determinação dos parâmetros ópticos do material pelos métodos tradicionais. O objetivo do presente trabalho é descrever um novo método experimental, que possibilita a medida simultânea da birrefringência linear e dicroísmo circular. O método proposto é uma generalização do Método de Sénarmont, e consiste na análise da intensidade do primeiro harmônico em função do ângulo do analisador. Além disto, serão discutidas as possibilidades de extensão do método para situações em que há coexistência de outros efeitos magneto-ópticos.

Financiamento: FAPEMIG, CNPq e FINEP.

^aU. A. Leitão, a ser publicado

PAPEL DA ESTATÍSTICA DE BOMBEAMENTO E DA DINÂMICA DA POLARIZAÇÃO ATÔMICA NAS FLUTUAÇÕES QUÂNTICAS DE LASERS COM ALARGAMENTO INOMOGÊNEO

KHOURY, A. Z.; DAVIDOVICH, L.

Departamento de Física, PUC-Rio

A redução do ruído quântico em lasers vem despertando grande interesse nos últimos anos e tem sido objeto de investigação tanto teórica quanto experimental. A produção de luz com baixo ruído é de interesse tanto da Física Básica (detecção de ondas gravitacionais e testes de fundamentos da Mecânica Quântica) como da Física Aplicada (telecomunicações). Um estudo teórico recente sobre o papel da dinâmica da polarização atômica em lasers mostrou ser possível a redução do ruído na quadratura de amplitude em até 50% abaixo do shot-noise, no regime em que a polarização mas não as populações pode ser eliminada adiabaticamente. A redução máxima das flutuações é obtida quando o nível inferior decai muito mais rapidamente que o nível superior. As condições para a eliminação adiabática da polarização atômica são encontradas, por exemplo, em lasers de He-Ne, rubi, YAG, CO₂ e semicondutor. Neste trabalho obtemos as condições para que a almejada redução de ruído sobreviva à introdução do alargamento inhomogêneo nos cálculos, tornando o tratamento mais realístico.

EFEITO RAMAN PRÉ-RESSONANTE ASSOCIADO AO ION CrO₄²⁻ NUM VIDRO DE METASILICATO

ZIEMATH, E. C.

Departamento de Física, IGCE-UNESP, 13500-230 - Rio Claro - SP

AEGERTER, M. A.

Departamento de Física e Ciência dos Materiais, IFQSC-USP, 13560-970 - São Carlos - SP

MELO, F. E. DE A.

Departamento de Física, UFCe, 60000 - Fortaleza - CE

MOREIRA, J. E. DE C.; MENDES FILHO, J.

Depto de Física, UFCe - CE

A ocorrência do efeito Raman pré-ressonante devido ao ion CrO₄²⁻ foi observado em vidros contendo inicialmente 1% em peso de Cr₂O₃. O vidro estudado tem composição 2Na₂.1CaO.3SiO₂. O elevado teor de modificadores alcalinos e o efeito da atmosfera ambiente durante a fusão do vidro (1350°C) favorecem a oxidação do Cr³⁺ para Cr⁶⁺. O espectro de absorç ao ótica apresenta uma banda em torno de 650 nm devido as transições eletrônicas do nível ⁴A₂ para o nível ⁴T₂ do ion Cr³⁺. Duas outras bandas ocorrem em torno de 370 e 250 nm, associadas ao ion CrO₄²⁻. Para amostras com caminho ótico superior a 1 mm, a absorção associada á banda em 370 nm aumenta acentuadamente para comprimentos de onda abaixo de 530 nm, onde estão

as principais linhas do laser de argônio. O espectro Raman do vidro apresenta uma banda intensa e estreita em 850 cm⁻¹ e um ombro em 890 cm⁻¹, atribuídas ás vibrações de estiramento simétrico e assimétrico, respectivamente, dos ions CrO₄²⁻. Diminuindo o comprimento de onda da radiação incidente no vidro, aumentam as intensidades das bandas Raman mencionadas, indicando a ocorrência do efeito pré-ressonante. A intensidade relativa da banda em 850 cm⁻¹ em função do comprimento de onda de excitação é proporcional ao fator adimensional F_B determinado teoricamente por Albrecht e Hutley (J. Chem. Phys. 55, 4438 (1971) para duas bandas de absorção ótica em ν_e e ν_f (em cm⁻¹):

$$F_B = (2\nu_s^2(\nu_e + \nu_f + \nu_i^2))/((\nu_e^2 - \nu_i^2)(\nu_f^2 - \nu_i^2))$$

onde ν_s é a frequência (cm⁻¹ da radiação incidente. Apoio Financeiro: FAPESP

ALTO ÍNDICE DE REFRAÇÃO NÃO LINEAR EM VIDROS DOPADOS COM QUANTUM DOTS DE CdTe.

DUARTE, A. S.; MEDEIROS NETO, J. A. DE; BARBOSA, L. C.; ALVES, O. L.; FRAGNITO, H. L.

UNICAMP

PALANGE, E.

Universidade di Roma

Descrevemos neste trabalho medidas do índice de refração não linear, n₂, em uma nova família de vidros borosilicatos contendo nanoestruturas semicondutoras de CdTe. As amostras foram preparadas fundindo pó de SiO₂, B₂O₃, Na₂CO₃ e ZnO, misturado com CdO e Te a 1350 °C. Vidros com essa composição foram tratados termicamente a uns 600 °C para produzir o crescimento controlado dos nanocristalitos. Para os materiais estudados as dimensões dos nanocristais (2 a 5 nm) é tal que apresentam efeitos de forte confinamento quântico tri-dimensional.

As medidas de n₂ foram realizadas utilizando a técnica de *varredura-z* com laser de Nd-YAG (λ = 1.06 μm) com pulsos de 100 ps. Os valores de n₂ encontrados neste materiais (> 10⁻¹⁴ cm²/W) são dos mais altos reportados em vidros inorgânicos na região de transparência. Da forma das varreduras-z concluimos que esta alta não linearidade é devida a transições ressonantes de dois fótons entre os níveis de confinamento quântico. Este vidros dopados com *quantum dots* de CdTe abrem novas possibilidades para dispositivos de chaveamento totalmente óptico.

Susceptibilidade Óptica Não Linear de Terceira Ordem de Filmes Poliméricos

MAZZALI, C.; DUARTE, A. S.; FRAGNITO, H. L.

IFGW - Unicamp

PLANAS, S. S.

Univ. Federal Fluminense

CARDOSO, V. L.; SANCHES, M. P. R.; VILLANI, M. F.; REGGIANI, A. E.

CPqD - Telebras

PALANGE, E.

Univ. di Roma

Neste trabalho apresentamos a caracterização de filmes poliméricos quanto a sua susceptibilidade não linear de terceira ordem, $\chi^{(3)}$. Este parâmetro é importante para o estudo da viabilização de tais materiais para a confecção de dispositivos de chaveamento totalmente óptico. Os filmes poliméricos dopados com moléculas orgânicas são atraentes devido aos seus altos valores de $\chi^{(3)}$, seu baixo custo e facilidade de fabricação. Além disto é possível dimensionar várias de suas propriedades ópticas (índice de refração, coeficiente de absorção, etc.) para uma dada aplicação através da escolha do dopante e sua concentração. Neste trabalho pesquisamos matrizes poliméricas de PMMA (poli[metacrilato de metila]) dopadas com os corantes DR1 (4-[N-ethyl-N-(2-hydroxyethyl)]amino-4'-nitroazobenzene) e HITC (Iodato de Hexamethylindo-tricarbocyanine).

As partes real e imaginária de $\chi^{(3)}$, que determinam, respectivamente, o índice de refração não linear (n_2) e o coeficiente de absorção de dois fótons (β) foram determinadas utilizando a técnica de *varredura-z* com um laser de Nd:YAG a 1.064 μm , operando nos regimes de Mode-Locking (pulsos de 100 ps a 500 MHz) e Q-Switching (envelope de 100 ns com taxa de repetição de 100 Hz) simultâneos. Para as amostras citadas obtivemos índices de refração não linear da ordem de 10^{-12} cm^2/W , sendo este negativo para DR1 e positivo para HITC. Os coeficientes de absorção de dois fótons foram da ordem de 100 cm^2/GW .

Os valores de n_2 obtidos (duas ordens de grandeza superior ao do CS_2) confirmam nossa motivação para o estudo destes materiais.

DEGENERESCÊNCIA DE EIXO ÓPTICO EM MULTICAMADAS MAGNETO-ÓPTICAS

LEITÃO, U. A.

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais

Apresentamos um cálculo teórico de Matrizes de Jones, com o objetivo de descrever a superposição de efeitos magneto-ópticos na presença de forte dicroísmo magnético. Devido à competição entre a birrefringência linear (LB) e o dicroísmo circular (CD), os eixos de LB perdem a ortogonalidade. O aumento do CD causa uma rotação nos eixos de LB. Existe um valor crítico dos parâmetros ópticos que causa o colapso dos eixos de LB, dando origem à birrefringência degenerada. Neste caso, existe apenas um modo normal de propagação da luz através do material. Resultados similares são observados em sistemas com presença simultânea de di-

croísmo linear (LD) e rotação de Faraday (FR). Tais fenômenos poderiam ser realizados em multicamadas magneto-ópticas especiais.

Financiamento: FAPEMIG, CNPq e FINEP.

REFLECTOMETRY OF ANISOTROPIC FILMS

SURDUTOVICH, G. I.; VITLINA, R.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

Porous silicon (PS) has received a great deal of interest due to its efficient photoluminescence at room temperature [1] which associated with possible optoelectronic applications in fully integrated silicon structures. This luminescence strongly depends on porosity, defined as the fraction of void in a silicon crystalline, and microstructure of PS. The "wires-type" anisotropic nanostructure gives base to imply the anisotropy of refractive indices in parallel and perpendicular directions to the film surface. Experimental data on this problem remain contradictory ones. In this work the results of theoretical and experimental investigations by reflectometry method of PS samples fabricated by different manners in various conditions are reviewed. The ellipsometric measurements of PS samples conclusively demonstrates an evident impossibility to describe PS films in the limits of isotropic refractive index model. We accept the model of a homogeneous uniaxial film with its optical axis normal to the surface and give simple method of determination of the "lower limit" of anisotropy by measurement of intensity reflectance coefficients of p and s-polarized light [2-3]. As a result we came to the conclusion about a pronounced degree of anisotropy of all investigated samples PS. The influence of a scattering roughness of the surface on interpretation of the obtained results is discussed in detail. The model of "blurred layer" - averaged over its thickness film - is proposed, which permits to get rid of interference effects due to reflection from substitute. In this model shift of the Brewster angle gives direct information about anisotropy of the film.

1. L. Canhan, Appl. Phys. Lett. **57**, 1046 (1990).
2. P. Basmaji, V.S. Bagnato, V. Grivickas, G. Surdutovich, R. Vitlina, MRS Conference, Proceedings, Boston, USA, December, 1993; ICSE'93, Paris, January 1993, First Interaction Congress on Spectroscopic Ellipsometry.
3. P. Basmaji, V. Bagnato, V. Grivickas, G. Surdutovich, R. Vitlina, submitted to Caxambu Conference, May 1993.

PROPRIEDADES ELÁSTICAS DA ÁGUA SOB PRESSÕES NEGATIVAS

ALVARENGA, A. P. D. DE
IFUSP

GRIMSDITCH, M.

*Materials Science Division, Argonne National Laboratory,
Argonne, IL 60439*

BODNAR, R. J.

*Department of Geological Sciences, Virginia Polytechnic
Institute, Blacksburg, VA 24061*

As propriedades elásticas da água sob pressões negativas foram investigadas por meio de espalhamento Brillouin. As amostras consistiram em inclusões de água e vapor de água em quartzo- α , tanto naturais como artificiais, fabricadas sob condições controladas. As inclusões foram aquecidas até sua temperatura de homogeneização (entre 120-370°C); ao serem resfriadas, pressões negativas de até 1000 bars foram alcançadas antes que ocorresse nucleação. Os resultados de velocidade do som obtidos de nossos experimentos Brillouin indicam que nucleação ocorre muito antes da região de instabilidade mecânica ser alcançada, onde o bulk modulus é zero. Mostramos também que a forma da inclusão é importante na determinação da deformação do cristal hospedeiro, quando a pressão interna é variada. Para alguns formatos, as mudanças induzidas são tão grandes que invalidam quaisquer conclusões que possam ser traçadas através de simples observação visual.

CÁLCULOS COLORIMÉTRICOS EM TOPÁZIO AZUL DO BRASIL.

BONVENTI JR, W.; ISOTANI, S.

Instituto de Física da USP.

ALBUQUERQUE, A. P. R. L.

*Divisão de Instrumentação do LSI - Escola Politécnica da
USP.*

Analisamos o espectro de absorção óptica do topázio azul, oriundo da região de Governador Valadares, Minas Gerais. Os espectros foram decompostos em bandas gaussianas. Calculamos as coordenadas cromáticas da amostra para os iluminantes "A" e "C" no diagrama da C.I.E. (Comission Internationale d'Eclairage), bem como sua dependência com a espessura, gerando um "caminho cromático". Demonstramos sua convergência para os limites de espessura da amostra tendendo a zero e infinito. Para um dado ponto no diagrama (coordenadas cromáticas do topázio), calculamos sua pureza espectral e o comprimento de onda dominante da luz transmitida. Também mostramos sua dependência com a espessura da amostra.

MÉTODO PERTURBATIVO PARA A SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO NÃO LINEAR DE SCHRÖDINGER

FOLHADELA NETO, J.; COELHO, I. S.; MOURA, M.
A. DE; OLIVEIRA, J. R. DE
Departamento de Física - UFPE

Estudamos analiticamente a equação não linear de Schrödinger com não linearidade logarítmica do tipo $-\lambda^2 \ell n |\psi|^2$ usando um método variacional baseado na expansão perturbativa da equação não linear. Este método perturbativo é o chamado expansão delta linear (EDL) onde a expansão é feita em torno de um termo linear otimizado. Na aplicação do método são introduzidos dois parâmetros δ e g de modo que a solução geral é expandida em termos de uma série em δ . A substituição desta solução na equação não linear estudada leva a uma sequência de equações lineares para cada ordem de δ cujas soluções respectivas dependerão do parâmetro g . Em seguida eliminaremos esta dependência através do critério de mínima sensibilidade onde desse modo g é agora função de x e t . Este método foi aplicado para um pulso de entrada na forma $C\delta(x)$ e gaussiana. No primeiro caso (entrada tipo delta), devido à forma específica para o pulso de entrada, nós mostramos que a solução encontrada é a solução analítica exata pois a série em δ pode ser somada. É importante destacar que para a entrada tipo delta podemos sempre expressar a função de Green em termos da solução da equação homogênea (ordem δ^0). Isto simplifica bastante o cálculo das integrais. No segundo caso (entrada Gaussiana) os cálculos são muito mais complexos e estamos em fase de análise dos novos resultados. Esperamos concluir que o Gausson (o soliton gaussiano da equação logarítmica) seja a solução estável para qualquer tipo de entrada em particular para uma entrada gaussiana.

INFLUÊNCIA DOS ESTADOS DE ARMADILHAS ELETRÔNICAS NA ABSORÇÃO ÓPTICA DE VIDROS DOPADOS COM Cd(S, Se)

MA, H.; ARAÚJO, C. B. DE

Departamento de Física, UFPE, 50732-910 Recife, PE

Recentemente tem havido um grande esforço para se conseguir um melhor entendimento da influência das armadilhas de portadores sobre as propriedades não-lineares dos vidros dopados com semicondutores (VDS). Atualmente é sabido que a dependência da resposta óptica destes materiais com a intensidade é largamente influenciada pelas armadilhas profundas ("deep traps") localizadas no gap dos VDS. Neste trabalho analisamos a contribuição das armadilhas profundas na absorção interbandas dos VDS. Estudamos detalhadamente a variação da absorção devido ao preenchimento das armadilhas assim como as alterações correspondentes no comportamento refrativo. O modelo de "band-filling" foi utilizado para interpretação dos resultados tendo revelado a importância dos processos de aprisionamento de buracos nos processos de relaxação.

Optica Quântica (OTI, ATO) -
20/05/93

**PASSEIOS QUÂNTICOS ALEATÓRIOS E
GRANDES DESLOCAMENTOS DE
DISTRIBUIÇÕES DE FÓTONS**

AHARONOV, Y.

Universidade de Tel-Aviv e Universidade de South Carolina
DAVIDOVICH, L.; ZAGURY, N.

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

O "passeio aleatório quântico" é definido para partículas que não podem ser precisamente localizadas devido às incertezas quânticas. Passeios aleatórios clássicos a uma dimensão são definidos em termos das probabilidades para uma partícula dar um passo de um dado comprimento para a direita ou para a esquerda, enquanto que *passeios aleatórios quânticos* são definidos em termos de amplitudes de probabilidades. O processo da medida é incorporado na teoria correlacionando-se cada passo possível a um outro grau de liberdade (por exemplo o spin), que faz o papel de uma *moeda quântica*: a medida do seu observável seleciona a transição realizada. Efeitos novos interessantes aparecem quando existe uma grande superposição das amplitudes de probabilidade para que a partícula se dirija para a direita ou para a esquerda. Neste caso o deslocamento médio da partícula pode ser muito maior do que aquele permitido classicamente.

Uma realização simples do "passeio aleatório quântico" é proposta. Considere uma cavidade de microondas em que somente um modo é excitado. A distribuição de número de fótons é tal que $1 \ll \Delta n \ll \bar{n}$. Um Átomo de dois níveis ressonantes com o modo da cavidade e no estado excitado é injetado na mesma. Após um tempo τ o átomo sai da cavidade e entra em uma região onde existe um campo eletromagnético clássico que gira o estado excitado, $|a\rangle$, e o estado fundamental, $|b\rangle$ de acordo com $|a\rangle \rightarrow \cos \alpha |a\rangle + \sin \alpha |b\rangle$, $|b\rangle \rightarrow -\sin \alpha |a\rangle + \cos \alpha |b\rangle$. O átomo passa então através de placas de ionização que detectam se ele se encontra ou não no estado excitado. Escolhendo convenientemente o ângulo de Rabi α e selecionando medidas pouco prováveis pode-se provocar grandes deslocamentos da distribuição de fótons (da ordem de sua variância) pela *deteção de um único átomo*.

**CORRELAÇÕES QUÂNTICAS ENTRE
DUAS CAVIDADES**

DAVIDOVICH, L.

Depto. de Física da PUC/RJ

HAROCHE, S.; BRUNE, M.; RAIMOND, J. M.

*Laboratoire de Spectroscopie Hertzienne - École Normale
Supérieure - Paris*

Propomos um método para estabelecer correlações quânticas entre duas cavidades, separadas espacialmente, através da passagem de um feixe atômico por elas. As experiências correspondentes têm diversas implicações, funcionando como testes da Mecânica Quântica, análogos aos que lidam com as desigualdades de Bell, e além disso permitindo a medida da perda de correlação quântica de sistemas macroscópicos (e, em particular, dos "ponteiros clássicos" do aparato macroscópico que mede um sistema quântico), prevista em diversos artigos^a mas jamais demonstrada experimentalmente. Em particular, mostramos como pode ser preparado o estado $|\psi\rangle \propto |\alpha, 0\rangle + |0, \alpha\rangle$, com um estado coerente em uma das duas cavidades. O efeito da dissipação sobre esse estado é tratado de forma exata, e é proposta uma experiência para medir a perda de correlação quântica entre os dois estados da superposição acima.

^a Quantum Theory of Measurement, edited by J. A. Wheeler e W. H. Zurek (Princeton Univ. Press, Princeton, 1983); K. Hepp, *Helv. Phys. Acta* **45**, 237 (1972); H. Nakazato e S. Pascazio, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1 (1993).

**OSCILADOR PARAMÉTRICO FORÇADO
POR UMA CORRENTE QUÂNTICA**

OLIVEIRA, F. A. M. DE; LIMA, E. G. DE

Departamento de Física - UFPE

O estudo das propriedades de novos estados quânticos e de modelos para sua geração são problemas de maior importância para a Ótica Quântica. Por exemplo, o modelo de Jaynes-Cummings e o oscilador paramétrico são geradores de estados não-clássicos da luz, tais como estados de número e estados comprimidos. O comportamento dinâmico de um sistema constituído pelo modelo de Jaynes-Cummings com um oscilador paramétrico em seu interior deve apresentar características originais e produzir novos estados quânticos. Neste trabalho, este modelo é simulado, com átomos atravessando consecutivamente a cavidade. A evolução temporal das principais características do campo no interior da cavidade é analisada em função do acomplamento com o oscilador paramétrico e do estado do átomo ao entrar na cavidade. Os resultados demonstram uma forte dependência do comportamento das observáveis do sistema, tais como quadraturas, número de fótons e suas variâncias com a fase inicial do átomo. Os *collapses & revivals* da inversão atômica na presença do oscilador paramétrico são praticamente idênticos aos usuais, mas os da excitação da cavidade são bastante diferentes. O próximo objetivo é obter as propriedades dos estados estacionários em função dos parâmetros do sistema, pois até agora este estudo tem se concentrado apenas na evolução dinâmica a partir do estado inicial.

REDUÇÃO DE RUÍDO QUÂNTICO EM LASERS COM SINAL INJETADO

FONTENELLE, M. T.; DAVIDOVICH, L.

Departamento de Física da PUC-Rio

Num tratamento bastante geral, completamente analítico e sem quaisquer aproximações, que inclui desde efeitos da dinâmica de polarização e populações atômicas até a estatística generalizada de entrada dos átomos, nós analisamos detalhadamente o espectro das flutuações do campo fora da cavidade de um laser bombeado por um campo externo coerente. Usamos a teoria de Heisenberg-Langevin, o que nos permite tratar o campo em todas as suas ordens. Mostramos que um intenso sinal externo é capaz de promover redução das flutuações de amplitude, ainda no limite de cavidade boa, para operação pouco acima do limiar de oscilação, quando há uma completa regularização da entrada atômica, o que concorda com resultados da literatura. Quando é possível eliminar adiabaticamente a polarização, mas não as populações atômicas, o ruído nas flutuações de amplitude pode ser reduzido mesmo para bombeamento Poissoniano. Maior redução do ruído neste caso é obtida quando o nível inferior decai muito mais rapidamente que o superior e ocorre na frequência $\Omega = \frac{1}{2} \sqrt{\gamma \Gamma_b (2 - \lambda / A_{\text{estac}})}$, onde γ é a constante de decaimento do campo na cavidade, Γ_b é a constante de decaimento do nível inferior, λ é a amplitude do campo externo e A_{estac} é a amplitude do campo de laser no regime estacionário. Mostramos que, em geral, o sinal externo leva a redução de ruído para bombeamentos bem inferiores e, portanto muito mais acessíveis, que aqueles necessários na ausência do campo externo.

ESTATÍSTICA DE BOMBEAMENTO E DINÂMICA DE MICROMASERS

GUERRA, E. S.; ZAGURY, N.

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

Em micromasers, a estatística de entrada dos átomos na cavidade pode afetar drasticamente a distribuição de fótons nestes sistemas. Nos casos em que a distribuição estacionária de fótons é caracterizada por apenas um pico dominante, o tempo característico, t_p , para que o sistema alcance o estado estacionário a partir do vácuo é da ordem do tempo de vida médio do campo na cavidade t_{cav} e os efeitos da estatística de bombeamento em geral só se manifestam nesta escala de tempo. Nos casos em que a distribuição estacionária de fótons é caracterizada por mais de um pico os efeitos da estatística de entrada dos átomos na cavidade são particularmente importantes. Nestes casos, $t_p \gg t_{\text{cav}}$ e é necessário analisar a dinâmica do processo de modo a examinar em que tempos os efeitos da estatística de bombeamento se manifestam.

Estuda-se a evolução das populações em micromasers de um e de dois fótons degenerados considerando-se que

a estatística de bombeamento de átomos excitados injetados na cavidade é regular ou poissoniana. Mostra-se que a medida da energia dos átomos que saem da cavidade, que é relacionada diretamente ao número médio de fótons, é sensível a estatística de bombeamento para tempos da ordem de t_p .

BOMBEIO ÓPTICO DO CÁLCIO 3P

GOMIDE, J. V. B.; CRUZ, F. C. DA; GARCIA, G.

A.; PEREIRA, D.; SCALABRIN, A.

Departamento de Eletrônica Quântica, Instituto de Física, Unicamp

O cálcio apresenta-se como um bom candidato a padrão atômico de frequência, utilizando-se a transição 3P_0 - 3P_1 a 1,2 THz. Na proposta do relógio de cálcio, o feixe atômico de cálcio é excitado para o tripleto metaestável 3P através de colisões elétron-átomo na região da descarga elétrica. O tempo de vida de 3P_1 é da ordem de milissegundos e é a única via de decaimento possível para o estado fundamental 1S_0 . O sinal do relógio pode ser observado através da fluorescência emitida a 657,2 nm, devido a esta transição. Excitamos os átomos neste tripleto metaestável $(4s4p)^3P_{0,1,2}$ para o tripleto $(4s5s)^3S_1$ irradiando o feixe atômico com um laser a 610,2, 612,2 e 616,2 nm, respectivamente. Ao variar o comprimento de onda do laser em torno a cada um destes valores, o sinal de fluorescência a 657,2 nm é alterado: é aumentado quando se está em torno a 610,2 e 616,2 nm e diminuído a 612,2 nm. Na região de interrogação do relógio, deve-se ter a maior população possível em 3P_0 e na região de detecção somente átomos em 3P_1 que tenham sido excitados durante a interrogação de Ramsey. O objetivo deste experimento é descobrir os mecanismos para tornar isto possível.

Suporte financeiro: FAPESP

^a J.V.B. Gomide, F.C. Cruz, G.A. Garcia, D. Pereira, A. Scalabrin, Produção de um feixe atômico metaestável de cálcio, Resumos do XVI ENFMC.

Aprisionamento de Átomos e Partículas (OTI, ATO) - 20/05/93

LIMITANTES EM DENSIDADES PARA ARMADILHAS MAGNETO-ÓPTICAS DE ÁTOMOS

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

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

Ao produzirmos átomos aprisionados em armadilhas magneto-ópticas, vários processos contribuem para limitações na máxima densidade atingível. Estes limi-

tantes impõem, por sua vez, barreiras aos vários experimentos que seriam desejáveis com átomos super-frios. Durante a permanência do átomo na armadilha existem várias forças que são introduzidas devido à interação átomo-radiação. Em primeiro lugar, temos a chamada força do "trap" $\vec{F}_T = -K_p \vec{r}$, onde K é a constante de força e p a probabilidade de absorção de fótons. Poém, à medida que átomos absorvem fótons, eles reemitem e estes podem ser novamente absorvidas por átomos vizinhos, criando desta forma, uma força devido a múltiplos espalhamentos $\vec{F}_R = Kp^2 \left(\frac{n}{n_0}\right) \vec{r}$.

A estabilidade da amostra existe para $|\vec{F}_T| > |\vec{F}_R|$, o que leva a um limite para a densidade $n < \frac{n_0}{p}$. Em segundo lugar, para produzir uma boa armadilha a amostra deve ser opticamente transparente e isto leva a um segundo limite para densidade $n < \frac{(b_0/p)^{3/2}}{N^{1/2}}$. Finalmente, os átomos apresentam uma temperatura finita e portanto estão espalhados no espaço levando ao terceiro limite $n < \frac{Np^{3/2}}{d_0^3}$. Em adição a estes limites temos o fato que a existência de colisões entre átomos aprisionados também levam a processos de limitações na densidade. Após medidas dos limitantes colisionais e demais limites é possível concluir que densidades no máximo da ordem de $5 \cdot 10^{10}/\text{cm}^3$ são produzidos neste tipo de armadilha. Medidas experimentais confirmam este número, demonstrando a necessidade de inovação para o alcance de limites maiores. (Suporte financeiro: FAPESP, CNPq, FINEP).

ESPECTROSCOPIA DE ÁTOMOS ULTRA FRIOS COLIDINDO

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

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

WANG, Y.; WEINER, J.

Universidade de Maryland, College Park, USA

Pela primeira vez é estudado diretamente processos colisionais que ocorrem com átomos super-frios mantidos em armadilhas magneto-ópticas. O processo estudado neste trabalho é a foto-ionização associativa (FIA), onde dois átomos no estado fundamental colidem e durante o decorrer da colisão ocorre a absorção de dois fótons. O primeiro fóton (absorvido quando átomos estão afastados) coloca o sistema num potencial atrativo $C3/R^3$ produzindo uma aceleração dos parceiros colisionais um contra outro. O segundo fóton absorvido durante a atração dos átomos promove o sistema para um estado duplamente excitado do qual a ionização ocorre espontaneamente quando os núcleos estão próximos.

Usando diferentes combinações de frequências exploramos todo o processo investigando passos intermediários da colisão bem como a importância da emissão espontânea no processo colisional. Tais efeitos só podem ser observados em colisões com átomos super-frios, pois o tempo de colisão é muito maior do que o tempo de

vida de estados excitados. Este estudo além de pioneiro promove melhor entendimento de processos fundamentais que ocorrem durante o encontro de dois átomos. (FAPESP/NSF).

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE ARMADILHAS MAGNETO-ÓTICAS USANDO FEIXES GAUSSIANOS

LIMA, E. G.; OLIVEIRA, F. A. M. DE; TABOSA, J.

W. R.; REVOREDO, W. C.; VIANNA, S. S.

Departamento de Física - UFPE

A armadilha magneto-ótica^a é atualmente o mais poderoso esquema para o aprisionamento de átomos neutros. O átomo neste tipo de armadilha executa vários ciclos de absorção-emissão de fótons e, devido ao caráter aleatório da emissão espontânea, o seu movimento pode ser descrito por uma equação de Folker-Planck para a distribuição de probabilidades no espaço de fases. Neste trabalho, apresentamos uma simulação Monte-Carlo para descrever a trajetória do átomo no espaço de fases^b. Em particular, estudamos a possibilidade de construção de um novo tipo de armadilha magneto-ótica usando apenas um par de lasers contrapropagantes e focalizados. Resultados preliminares indicam que é possível obter armadilhas estáveis para valores de gradientes de campos magnéticos ligeiramente maiores que os usados na armadilha tradicional.

Apoio Financeiro: CNPq, FINEP.

^aE. Rado et al. Phys. Rev. Lett. 59, 2631 (1987)

^bD. Grison, Thèse de Doctorat, Université Paris VI, (1992)

Captura e manipulação de partículas com o laser de Nd:YAG

CORREIA, A. L.; CESAR, C. L.; PENNA, A.; RANDI, S.

Instituto de Física "Gleb Wataghin" - UNICAMP

No ano passado apresentamos um sistema capaz de aprisionar e manipular pequenas partículas como esferinhas de latex, hemácias, bactérias e estruturas no interior de células vegetais sem causar danos aos organismos vivos, uma vez que o comprimento de onda do laser de Nd:YAG não é absorvido. O sistema utiliza o efeito da transferência de momento linear do fóton, que apesar de pequeno não é desprezível se consideradas as dimensões envolvidas. Este ano mostraremos aplicações desse sistema nas áreas de Biologia e Engenharia Genética. Um dos possíveis usos da montagem é o estudo da elasticidade de membranas e da viscosidade do material citoplasmático em células vegetais. Para a Engenharia Genética é importante que se disponha de um mecanismo capaz de manipular material genético e que opere com um baixo índice de perdas. Os resultados experimentais foram registrados em fita de vídeo cassete padrão VHS.

Espectroscopia, Interação com Átomos e Teoria (OTI) - 20/05/93

EFEITO DO DECAIMENTO ATÔMICO EM MICROMASERS DE DOIS FÓTONS DEGENERADOS

GUERRA, E. S.; PLON, J.; ZAGURY, N.

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

Estuda-se o efeito do decaimento atômico e da estatística de bombeamento em micromasers de dois fótons degenerados através de uma abordagem microscópica. A evolução do campo é descrita através da aplicação sucessiva, à matriz densidade reduzida do campo, do operador que descreve o processo de ganho e do operador que descreve o processo de perdas devido a interação do campo com as paredes da cavidade (estes dois processos são considerados independentes). Admitindo-se taxas de decaimento atômico γ iguais e usando-se a teoria de Wiesskopf-Wigner, obtém-se uma expressão para o operador de ganho em função de γ . Apresenta-se resultados numéricos para a probabilidade de detectar os átomos que saem da cavidade no estado inferior de energia da transição maser e para a variância do campo para estatísticas de bombeamento regular e poissoniana. Mostra-se que a estatística do campo é muito sensível a valores da taxa de decaimento atômico γ vezes o tempo de interação dos átomos com a cavidade. Por conseguinte é necessário considerar-se este efeito nas experiências em micromasers a átomos de Rydberg com baixos valores do momento angular orbital ℓ e não altamente excitados.

SELF-STEEPENING AND DAMPING OF OPTICAL PULSES IN NONLINEAR OPTICAL FIBERS

MOURA, M. A. DE

Departamento de Física - UFPE

We describe an exact analytical solution for the nonlinear Schrödinger equation modified by the inclusion of the self-steepening and linear damping terms. We apply the results to the pulse propagation in optical fibers in the normal as well as the anomalous regime where soliton behavior should occur. In particular we analyze the case of fundamental soliton propagation and show that even in the presence of dispersion, pulse distortion can exist due to the self-steepening of the pulse. It is also found that the critical distance for shock formation can be shortened due to the dispersive term. We have also included the linear damping term in the propagation equation and verified its role on the pulse propagation along the fiber.

Equações de Maxwell Generalizadas

DORIA, R. M.

Universidade Católica de Petrópolis

Uma generalização as Teorias de Gauge é a de se propor transformações de simetria polinomiais onde a variável é um único parâmetro de gauge. Dentro desta perspectiva propõe-se uma extensão ao grupo abeliano de Maxwell. Através da análise do teorema de Noether resulta que diferentes cargas são conservadas dentro de um mesmo grupo de simetria. Então, introduzindo-se diferentes potenciais vetores as equações de Maxwell são generalizadas. Diferentes fótons sem massa e com massa são obtidos. Uma outra característica resultante é uma extensão não linear das equações de Maxwell, onde fótons sem massa apresentam-se em vértices trilineares e quadrilineares. Obtém-se também através das leis de conservação a presença de diferentes setores para a carga elétrica além daquele usualmente obtido pela equação de continuidade derivada de Maxwell.

INTERAÇÃO MULTIFOTÔNICA DE ÁTOMO DE 2-NÍVEIS E CAMPO EM ESTADO INICIAL GENÉRICO

CHABA, A. N.; BASEIA, B.

Departamento de Física, CCEN, UFPB

VYAS, R.

University of Arkansas (USA)

Investigamos interação tipo p-fotons num modelo de Jaynes-Cummings generalizado. O tratamento assume dessintonia δ , átomo preparado em estado de superposição dos estados excitados não-excitado e campo em estado de superposição genérica de estados de número, numa cavidade ótica de alta fator-Q. Casos particulares, especificando δ , p, e estados iniciais são examinados e confrontados com a literatura. Foram obtidas num tratamento generalizado as seguintes propriedades: i) probabilidade de encontrar n fotons no campo, $p_n(t)$; ii) variança no número de fotons $\langle (\hat{n})^2 \rangle$; iii) fator $Q(t)$ de Mandel, que caracteriza a estatística de fotons; iv) squeezing nas quadraturas $\Delta \hat{X}_i(t)$, $i = 1, 2$; v) operador de estado do campo $\rho(t)$, bem como $\rho^2(t)$, $\text{tr} \rho^2(t)$. Estamos investigando efeito squeezing de mais alta ordem, propriedades atômicas - como inversão de população, $\langle \hat{\sigma}_z(t) \rangle$, e polarização, $\langle \hat{\sigma}_1(t) \rangle$. As expressões analíticas obtidas, dada a generalidade do modelo e condições iniciais, são bastantes complexas, a análise das mesma sendo implementada por métodos computacionais - os quais exibirão a evolução temporal da estatística, do efeito "squeezing", do surgimento de colapso e renascimento na inversão $\hat{\rho}_z(t)$, $\langle \hat{n}(t) \rangle$, bem como o surgimento eventual do "gato quântico de Schrödinger".

SOLUÇÃO NUMÉRICAS PARA O PROBLEMA DE AUTO DIFRAÇÃO

PENAFORTE, J. C.; FREITAS, U DE
UFPB

O processo de mistura de duas ondas consiste basicamente na superposição de dois feixes de luz coerente num meio não-linear. A interferência dos feixes, dá origem a uma grade de índice de refração produzida pela modulação da susceptibilidade do meio e desta forma, o fenómeno da auto-difração pode ocorrer. Em meios altamente não lineares, a presença de feixes difratados modifica consideravelmente a transferência de energia entre os feixes de bombeamento e prova. Através de equações acopladas para amplitude e fase dos campos incidentes num meio tipo Kerr, onde $n = n_0 + n_2 I$, investigamos via métodos numéricos o problema da transferência de energia do feixe de bombeamento para o feixe de prova, em função da dessintonia entre esses feixes (mistura não degenerada de duas ondas). Além disso, apresentamos resultados numéricos acerca da influência da primeira ordem de difração do feixe de bombeamento na amplificação do feixe de prova e também, para a própria amplificação dessa ordem de difração do feixe de bombeamento em função da dessintonia.

SQUEEZING OF EXCITONS IN SEMICONDUCTORS BY COHERENT LIGHT.

AN, N. B.

International Center of Condensed Matter Physics, UnB

An exciton in a semiconductor can be created by optical pumping. At low pump levels the exciton responds linearly to the light and thus, during the course of time, the statistical properties can be transferred between the light and the exciton without qualitative changes. At increasing levels of pumping, however, many excitons may be created which interact among themselves as well as response collectively to the light. These inter-exciton interaction and/or collective response might cause dramatic changes of statistical properties of the excitons as compared to those of the pumping light. We have shown that at a high pumping level coherent light may generate squeezed excitons and calculated the exciton squeezing degree as functions of different types of many-body interactions. The dependence of the initial light coherence degree and of the light-exciton spectral detuning have also been considered. A simplified version of the topic and a related problem of light squeezing via exciton-exciton interaction were studied respectively in /1/ and /2/.

/1/ Nguyen Ba An & Tran Thai Hoa, Mod. Phys. Lett. B6, 405 (1992). /2/ Nguyen Ba An, Quantum Optics 4, 397 (1992).

CHAOTIC SELF-PULSATIONS VIA PERIOD-DOUBLING MECHANISM IN A NONLINEAR PHOTON-EXCITON SYSTEM DRIVEN BY COHERENT INPUT LIGHT.

AN, N. B.

*International Center of Condensed Matter Physics,
University of Brasilia*

An optically excited semiconductor is modelled as a nonlinear photon-exciton system driven by an external coherent light. The interactions between the exciton, the intra-crystal photon and the external light are taken into account. The exciton-exciton interaction is shown to generate bistability of both the photon and the exciton numbers. A stability analysis based on the Hurwitz criteria is performed for the bistability curves. We show that both the upper and lower branches of the curves contain near the turning points domains of self-pulsation. Nearest to the points the self-pulsations display themselves in the form of a sequence of identical multi-peaked structures. By moving farther from these points the steady solutions first undergo small portions of irregular oscillation and then become periodic with a period-halving mechanism. These periodic solutions eventually disappear before entering enormous parts of stability. Though period-doubling routes to chaos were well-recognized in many other nonlinear systems, such a route is reported here for the first time for the photon-exciton system. Other works on the same system just found out the emergence of chaos without exploiting possible routes leading to it. We also consider the case of doping. The presence of extra carriers due to doping causes the additional exciton-carrier interaction which will develop a wider hysteresis loop of the bistability curve as compared to the undoped case. This widening may make the instability domain in the undoped system become stable in the case of doping.

ESPECTROSCOPIA DE REFLEXÃO DE VAPOR ATÔMICO UTILIZANDO LASER DE DIODO

ALVES, M. V.; CAVALCANTE, J. M. M.;
BOMBACINI, M. R.; CHEVROLLIER, M.; ORIÁ, M.
Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

A reflexão de uma interface entre um sólido e um meio diluído pode conter informações espectroscópicas quando a frequência da radiação incidente é varrida em torno de uma ressonância do vapor. Por outro lado, a sensibilidade desta técnica a processos que ocorrem a distâncias da superfície da ordem do comprimento de onda da radiação sugere a possibilidade de se obter informações da interação átomo-superfície. Apresentamos nesse trabalho resultados experimentais da Reflexão Seletiva de vapor de Césio excitado por laser de diodo a 852 nm. Em torno da ressonância obtivemos um espectro de forma dispersiva de largura Doppler

com uma singularidade de largura sub-Doppler, contribuição dos átomos que se deslocam paralelamente à superfície. Através de um método experimental de modulação em frequência é possível, com esta técnica linear, de se extrair um sinal de largura de linha natural. As formas de linha são discutidas e interpretadas em termos de uma teoria não-local da reemissão dos dipolos atômicos. Discutimos também algumas extensões destes resultados.

Workshop: Lasers, Tecnologia e Aplicações (OTI, INS) - 21/05/93

LASERS DE CRISTAIS DE FLUORETOS NO INFRAVERMELHO PRÓXIMO

VIEIRA JUNIOR, N. D.

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares C. P. 11049 São Paulo - SP - 05422-970

Matrizes sólidas são usualmente utilizadas como materiais hospedeiros de íons laser ativos. Os principais tipos de cristais hospedeiros são os óxidos e os fluoretos. Os cristais de fluoretos apresentam, em geral, temperatura de fusão mais baixa, o que favorece o controle do processo de crescimento e propicia cristais com menores tensões decorrentes de gradientes térmicos. Durante a última década, foi da Divisão de Óptica Aplicada o domínio do crescimento desses cristais e a espectroscopia óptica de centros de cor ou íons incorporados a essas redes, visando a sua utilização como meios laser ativos. O cristal de fluoreto mais simples é o fluoreto de Lítio. Nessa matriz, destacam-se os centros de cor F_2^- , que apresentam uma banda de absorção que se superpõe à linha de emissão do laser de Nd, podendo ser utilizado tanto como absorvedor saturável como também como meio laser ativo. Num regime de bombeio com cavidades acopladas obteve-se eficiências de até 40% na extração de energia, no regime pulsado. O intervalo de emissão vai de 1,09 a 1,25 μm . Obteve-se também o regime mode locking do laser pulsado de Nd, num regime de cavidades acopladas, obtendo-se pulsos de 100 ps de duração do laser principal.

Uma outra matriz de fluoretos muito importante é o $YLiF_4$, (YLF) que é um cristal com estrutura scheelita (tetragonal), tipo alfabético, o que permite que o ítrio seja substituído por qualquer outra terra rara, tais como Nd, Ho e Er. Inicialmente obtivemos cristais de Nd:YLF com concentrações da ordem de 1 mol%. Utilizamos esses cristais para operação pulsada, obtendo pulsos de 500 mJ de energia (1% de eficiência total). Desenvolveu-se também um protótipo de um laser c.w. (YAG) onde se obteve potência máxima de saída de 12 W no modo TM_{00} e 100 W multimodo. Obteve-se o chaveamento Q do laser cw, verificando-se pulsos com duração de 100 ns. Utilizando-se como meio laser ativo o Nd:Vidro, obteve-se dois protótipos de laser de alta potência, um com 6 J de energia e duração de 120 μs , e outro com 37 J de energia, com duração variável entre 0,2 e 0,6 ms. Esses protótipos já são adequados para aplicações industriais. Nesse sentido, estamos desenvolvendo um sistema que integra esses lasers e um com duração mais longa a um sistema de deslocamento com controle numérico, de forma a se constituir uma Central de Processamento de Materiais via Laser. Um outro campo de aplicações é o médico, onde lasers de Nd:YLF podem ser usados em oftalmologia. Um protótipo desse laser foi construído. Nessa área de atuação, lasers de Ho:YLF são amplamente utilizados e estamos desenvolvendo lasers desses materiais. Recentemente, iniciamos estudos visando a obtenção de lasers sintonizáveis em uma outra matriz, o $BaLiF_3$, que é uma perovskita invertida, cúbica, que permite a incorporação de metais de transição divalentes. Como candidatos a meio laser ativo estamos estudando inicialmente o Pb e o Ni nessa matriz.

DESENVOLVIMENTO E APLICAÇÕES DE LASERS SEMICONDUTORES NO CPQD - TELEBRÁS.

REGO, A. C. B.; AMARAL NETO, R. DO

CPQD-TELEBRÁS, Campinas - 13088-061 - SP - Brasil

As atividades de P&D em dispositivos optoeletrônicos no CPQD-Telebrás já acumulam mais de dez anos de experiência. Nesse período, os esforços se concentraram em lasers semicondutores, desde a primeira geração com emissão em 850nm (GaAlAs/GaAs) até os mais modernos com realimentação distribuída (DFB) em 1550nm (InGaAsP/InP), ou estruturas quânticas tensionadas em 980nm (InGaAs/GaAs/InGaP). Manteve-se a preocupação estratégica do domínio do ciclo tecnológico completo de projeto e fabricação dos dispositivos optoeletrônicos, desde substratos de GaAs ou InP até encapsulamento hermético dos dispositivos acoplados à fibras ópticas. Este ciclo tecnológico se inicia com etapas de crescimento epitaxial por fase líquida (LPE); ou por fase vapor de organometálicos

(MOCVD), seguido de processos litográficos, metalizações, difusões, passivações dielétricas e corrosões químicas, de tal forma à obtenção do confinamento óptico (guias) e do confinamento eletrônico (junções p-n). Caracterizações das camadas epitaxiais e dos processos de fabricação foram desenvolvidas para garantir o alto desempenho e a alta confiabilidade dos dispositivos: Fotoluminescência, Microscopia Eletrônica, Difração de raio X, etc. Caracterizações dos dispositivos lasers foram desenvolvidas a fim de obter alto desempenho eletro-óptico para aplicações em telecomunicações. Entre várias técnicas dominadas, destacamos: interferometria homodina, para medida de largura de linha espectral com resolução de 50KHz, medida do campo de emissão com resolução espectral, resposta em frequência de lasers modulados. Foram projetados e realizados estruturas de guiamento óptico por ganho em GaAs/GaAs para lasers de contato de faixa (SiO₂ "stripe contact" e "V-groove"), e estruturas de guiamento óptico por índice de refração em InGaAsP/InP (estrutura enterrada DCPBH e estrutura Ridge). Essas estruturas foram utilizadas em desenvolvimento de lasers para várias aplicações: lasers DCPBH de duplo canal com alta frequência de modulação para sistemas de Transmissão por fibra óptica, lasers Ridges em 980nm com alta potência óptica para bombeio de Amplificadores Ópticos a fibra (EDFA), lasers monomodo dinâmico com alta pureza espectral em estruturas de realimentação distribuída (DFB) para aplicação em Sistemas de Comunicações Ópticas de Longa Distância e Multiplexação em Comprimento de Onda (WDM).

DESENVOLVIMENTO DE LASERS A GÁS NO IEAV-CTA.

RODRIGUES, N. A. S.

CTA/IEAV - São José dos Campos - SP

O programa de desenvolvimento de lasers no CTA é anterior à própria criação do IEAV, ocorrida em 1981, e se iniciou como atividade de suporte para o programa de separação de isótopos via lasers. Dentre os lasers em que se tem trabalhado no IEAV, destacam-se os de CO₂ e o de Vapor de Cobre. Apesar do programa de desenvolvimento destes lasers ter sido dirigida a aplicações específicas do projeto de separação isotópica, várias configurações foram estudadas que podem ser aplicadas em diferentes áreas da ciência e da tecnologia. O objetivo deste trabalho é o de apresentar os resultados do programa de desenvolvimento destes lasers no IEAV e citar algumas das aplicações a que estes sistemas são ou foram aplicados.

O laser de CO₂ será enfocado na primeira parte deste trabalho. Seus princípios físicos serão apresentados e posteriormente detalhes para o projeto de lasers de CO₂, tanto contínuos como pulsados, serão discutidos. Algumas aplicações destes lasers no IEAV serão também comentadas.

O laser de vapor metálico (mais especificamente o de cobre) será objeto de discussão na segunda parte deste trabalho. Serão apresentados os princípios físicos e de operação, e o estágio do desenvolvimento deste tipo de laser no IEAV. Finalmente serão discutidas aplicações atuais e potenciais para este tipo de laser.

Lasers e Espectroscopia (OTI, ATO) - 21/05/93

LASERS DE DIODO ESTABILIZADOS PARA ESPECTROSCOPIA ATÔMICA DE ALTA RESOLUÇÃO

TUBOY, A. M.; SANTOS, M. S.; CHEVROLIER, M.;
BAGNATO, V. S.; ORIÁ, M.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

Lasers de diodo são atualmente uma excelente opção como fonte de radiação coerente para espectroscopia atômica. Numa versão mais simples (estabilização em corrente e temperatura) apresentam grandes limitações para muitas experiências, cuja principal é sua largura de linha que é maior que a largura de linha das transições ressonantes de átomos alcalinos por até uma ordem de

grandeza. Existem todavia várias técnicas que permitem obter um laser a semicondutor com largura de linha estreita e sintonizável. Nós discutiremos várias dessas técnicas ora em utilização ou em desenvolvimento no nosso laboratório e apresentamos os resultados para avaliação das performances de nossos lasers estabilizados além de exemplos de aplicação à espectroscopia atômica de alta resolução.

EFEITOS DE CAMPOS ELÉTRICOS EM TRANSIÇÕES VIBRACIONAIS E ROTO-VIBRACIONAIS DO ¹³CD₃OH

TELLES, E. M.; PEREIRA, D.; SCALABRIN, A.
UNICAMP

MORAES, J. C. S. DE

Departamento de Ciências, FEIS-UNESP

Neste trabalho foram obtidos dados espectroscópicos

de alta resolução associados a transições de absorção e emissão laser do $^{13}\text{CD}_3\text{OH}$ na presença de campo elétrico. Para isso, utilizamos uma cela fotoacústica com placas Stark, uma cavidade laser IVL na configuração em guia de onda híbrido - metal/dielétrico - e um laser de CO_2 em guia de onda como fonte de excitação. Um aumento na absorção e na intensidade de emissão laser foi observado para campos da ordem de 10^2 V/cm. Este comportamento é explicado através do efeito Hanle Não-Linear. Além disso, foi determinado o deslocamento em frequência (coeficiente Stark) induzido pelo campo para transições particulares. Estas informações são fundamentais para a análise teórica das moléculas laser ativas possibilitando a confirmação de previsões envolvendo a identificação das transições do ciclo laser. Suporte Financeiro: CNPq, FAPESP, FAEP

ESPECTROSCOPIA DE ABSORÇÃO NÃO-LINEAR COM RESOLUÇÃO DE FEMTOSEGUNDOSA EM $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$

ULMAN, M.; IPPEN, E. P.; FUJIMOTO, J. G.
Department of Electrical Engineering and Computer Science, M.I.T.

BAILEY, D. W.

*Department of Electrical and Computer Engineering
University of South Carolina, Columbia, SC 29208*

ACIOLI, L. H.

Departamento de Física, UFPE, 50732-910 Recife, PE
VALLEÉ, F. G.

Laboratoire d'Optique Quantique - École Polytechnique
STANTON, C. J.

Department of Physics, University of Florida,

Neste trabalho apresentaremos os resultados de um estudo sistemático da dinâmica de portadores fotoexcitados em $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$. Geração de contínuo^a e técnicas de síntese de Fourier^b são usadas para gerar pulsos com duração de 40 femtosegundos, sintonizáveis entre 500 e 800nm. Isto permite excitar os portadores para diferentes estados iniciais, o que não é possível usando apenas um comprimento de onda para o pulso de bombeio. Esta distribuição inicial é posteriormente estudada medindo a variação da transmissão diferencial em função do atraso de um segundo pulso de sonda, no mesmo comprimento de onda. A densidade de portadores é variada entre 5×10^{17} e 10^{19}cm^{-3} . Os resultados experimentais usando este sistema são comparados com simulações numéricas obtidas usando o método de Monte Carlo. Para esta simulação são incluídos os efeitos de espalhamento portador-portador (elétrons e buracos), espalhamento portador-fônon polar óptico e espalhamento intervala. Os efeitos de blindagem da interação coulombiana é levada em conta e a dependência com a densidade de portadores é suposta seguir adiabaticamente a densidade de portadores. Os resultados de medidas para as quais as energias dos fótons estão abaixo ou acima do limiar de espalhamento do

vale Γ para o vale L são discutidos e comparados com as simulações numéricas. Acordo quantitativo entre experimento e teoria é obtido para um potencial de deformação $D_{\Gamma-L} = 5 \times 10^8 \text{eV/cm}^c$.

^aW.H. Knox, M.C. Downer, R.L. Fork, and C.V. Shank, *Opt. Lett.*, 9, 552 (1984)

^bA.M. Weiner, J.P. Heritage, and E.M. Kirschner, *Journ. Opt. Soc. Am. B*, 5, 1563 (1988)

^cM. Ulman, D.W. Bailey, L.H. Aciole, F.G. Valleé, C.J. Stanton, E.P. Ippen, and J.G. Fujimoto, a ser publicado em *Phys. Rev. B*

ESPECTROSCOPIA OPTOGALVÂNICA DE INTERMODULAÇÃO E EFEITO HANLE NÃO-LINEAR NO TITÂNIO

CRUZ, F. C. DA; GOMIDE, J. V. B.; SCALABRIN, A.; PEREIRA, D.

*Departamento de Eletrônica Quântica, Instituto de Física,
Unicamp*

MIRAGE, A.

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - CNEN/SP

Investigamos a transição $^3\text{P}(j=0) - ^3\text{D}_0(j=1)$, em 592.2 nm, do titânio, através da espectroscopia optogalvânica intermodulada e do efeito Hanle não-linear. Com a primeira, obtém-se espectros com resolução sub-Doppler, determinando-se assim, o comprimento de onda absoluto e os desvios isotópicos para essa transição. As larguras de linhas homogêneas e os parâmetros de relaxação-cruzada são também determinados através de ajustes teóricos, assumindo o modelo de colisões fortes. A estrutura Zeeman dessa transição também foi investigada, permitindo a determinação do fator de Landè do estado excitado. O efeito Hanle não-linear, observado através do sinal optogalvânico versus campo magnético, foi usado para, através de uma análise usando o formalismo de matriz densidade e equações de taxa, determinar o parâmetro de saturação e as larguras de linha homogênea considerando-se contribuições de alargamento por potência.

Suporte financeiro: FAPESP, CNPq, FAEP/UNICAMP

Lasers Espectroscopia, Fibras Óticas e Holografia (OTI) - 21/05/93

ANÁLISE DA FORMAÇÃO DE MODOS EM UM LASER DE VAPOR DE COBRE COM CAVIDADE INSTÁVEL AUTOFILTRANTE.

ANAZAWA, R. M.; RODRIGUES, N. A. S.; KAM, K. Y.; RIBEIRO, A. L.

CTA/IEAv - São José dos Campos - SP

Foi desenvolvido um modelo teórico unidimensional, resolvendo-se a integral de Fresnel-Kyrchoff, para o cálculo da formação de modos em uma cavidade instável autofiltrante. Este modelo é uma variante do trabalho pioneiro de Fox e Li, onde os sucessivos transitos da radiação eletromagnética dentro da cavidade são simulados calculando-se a propagação de uma frente de onda através de uma sequência de lentes com distâncias focais e diâmetros coincidentes com os dos espelhos da cavidade. A partir do resultado da distribuição do campo elétrico no campo próximo, calcula-se a distribuição no campo distante e daí a divergência correspondente ao modo resultante. Verificou-se que existem, para determinadas configurações de cavidade instável autofiltrante, mínimos locais no comportamento da divergência do feixe com o diâmetro da iris/filtro espacial. Comparando estes resultados com os observados experimentalmente com um laser de vapor de cobre, verifica-se que nestes lasers (ou em qualquer laser de ganho de baixo sinal extremamente elevado), a cavidade instável autofiltrante tem maior importância como filtro da elevada emissão espontânea do que propriamente na formação de um modo de cavidade.

LASER DE $LiF:F_2^-$ BOMBEADO POR Nd:YAG CW CHAVEADO EM CAVIDADES ACOPLADAS

ROSSI, W. DE; COSTA, F. E. DA; RANIERI, I. M.; VIEIRA JUNIOR, N. D.; MORATO, S. P.

IPEN - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares

Centros de cor F_2^- em cristais de LiF foram criados de maneira otimizada e utilizados como um absorvedor saturável para o chaveamento Q de um laser CW de Nd:YAG de nossa fabricação. Este laser foi usado como bombeador de um meio laser ativo também de $LiF:F_2^-$ em um esquema de cavidades acopladas. O sistema emitiu radiação laser em $1,13\mu m$, com pulsos de 50 a 80ns de largura temporal e potência média máxima de 1,4W. Os resultados são analisados em função do acoplamento das cavidades, o qual aumenta a eficiência de bombeio através de um aumento na variação do ganho do sistema chaveado. Este acoplamento possibilita uma maior extração da energia do neodímio e uma diminuição da largura temporal dos pulsos. Uma oti-

mização do sistema poderá ainda possibilitar a sintonia do laser de centro de cor.// Apoio: FINEP/PADCT e CNEN.

Laser de Nd:YLF Bombeado Colinearmente Por Laser de Argônio

MALDONADO, E. P.; RANIERI, I. M.; VIEIRA JR, N. D.; MORATO, S. P.

IPEN/CNEN-SP - Supervisão de Materiais Optoeletrônicos

Desenvolveu-se um laser de Nd:YLF, a partir de um cristal sintetizado em nossos laboratórios, que consiste em um bastão de 4 cm de comprimento com faces em ângulo de Brewster, em uma cavidade de três espelhos com compensação astigmática, e bombeado colinearmente por um laser de Argônio na linha de $\lambda_p = 514$ nm. O eixo do bastão está alinhado com o eixo c cristalino, de forma que a emissão laser corresponde à polarização σ do cristal de Nd:YLF, $\lambda = 1053$ nm. O ressonador óptico especialmente projetado possui um modo fundamental cujo parâmetro confocal corresponde à metade do comprimento do bastão e baixa sensibilidade a desalinhamento dos espelhos. Os resultados de uma caracterização preliminar do laser são apresentados. O laser fornece 50 mW c.w. TEM_{00} para um bombeio de 800 mW, o que corresponde a uma eficiência da ordem de 6%.

Projeto apoiado pela FINEP - E.P.Maldonado com bolsa de Doutorado FAPESP.

ESTABILIZAÇÃO DE LASERS DE DIODO USANDO CAVIDADE EXTERNA

FEITOSA, C. C. DE A.; TABOSA, J. W. R.; VIANNA, S. S.

Departamento de Física - UFPE

Descrevemos a estabilização de um laser de diodo emitindo em $\lambda = 852$ nm através do uso de uma cavidade externa, contendo uma grade de difração^a. O laser com cavidade estendida, construído em nosso laboratório, pode operar numa banda de 10nm e é piezoelectricamente sintonizável, monomodo, numa faixa superior a 1GHz em torno da frequência central. A caracterização do nosso sistema foi feita pela observação de sinais de absorção saturada, envolvendo os níveis da estrutura hiperfina da transição $6S_{1/2} \rightarrow 6P_{3/2}$ do átomo de Césio. Resultados preliminares indicam que o laser, operando nesta configuração, apresenta uma largura de linha inferior a 1MHz, o que nos possibilita resolver todas as linhas da estrutura hiperfina especificada acima. O emprego deste sistema para a espectroscopia atômica e para a construção de armadilhas atômicas será discutido.

Apoio financeiro: FACEPE e CNPq.

^aCarl E. Wieman e Leo Hollberg, Rev. Sci. Instrum.

62, 1 (1991)

**ESTABILIZAÇÃO DE LASERS
SEMICONDUCTORES EM CAVIDADE
EXTERNA NA CONFIGURAÇÃO
LITTMAN**

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

*Departamento de Eletrônica Quântica, Instituto de Física,
Unicamp*

Está sendo investigado o uso da configuração Littman para estabilizar e sintonizar lasers de diodo de alta potência em 850 e 780 nm. A principal vantagem desta configuração é a de permitir o uso de lasers de potência comerciais, sem a necessidade de requisitos especiais sobre as camadas refletoras ou anti-refletoras depositadas sobre as facetas terminais. Na configuração Littman, a radiação sai do laser de diodo e incide em um ângulo rasante sobre uma rede de difração. A difração de primeira ordem incide perpendicularmente a um espelho, que a faz retornar à rede, e daí ao laser, sendo este o esquema básico da realimentação óptica. O feixe de saída do conjunto laser-cavidade externa é fornecido pela reflexão na rede de difração (ordem zero). Pode-se alterar o ângulo do espelho com relação à cavidade, permitindo que se sintonize o laser em frequência. Medidas da melhoria na estabilização e de estreitamento da largura de linha estão em curso.

Suporte financeiro: FAPESP e CNPq.

**AUMENTO DO DESEMPENHO DE LASERS
DE CONTATO DE FAIXA DE
GaInAsSb/GaAlAsSb EMITINDO EM 2,2 μ m
POR ALTERAÇÃO DA DOPAGEM DA
REGIÃO ATIVA**

SILVEIRA, A. C. F. DA; MOROSINI, M. B. Z.;
LOURAL, M. S. S.; ZUBEN, A. A. DE G. V.; PATEL,
N. B.

*UNICAMP, Inst. de Física, LPD - C.P. 6165 - Campinas
SP*

HERRERA-PÉREZ, J. L.
Univ. Aut. de Puebla - Mexico

A região de comprimento de onda entre 2 e 3 μ m é de potencial interesse em comunicações óticas utilizando fibras de fluoreto, e também para transmissão por radar e controle atmosférico de gases poluentes. Lasers semicondutores de heteroestrutura dupla (HD) com região ativa de GaInAsSb confinada por GaAlAsSb crescidas sobre GaSb vem-se mostrando os mais promissores para essas aplicações. Já reportamos¹ a menor densidade de corrente limiar para lasers de $Ga_{0.86}In_{0.14}As_{0.13}Sb_{0.87}/Ga_{0.73}Al_{0.27}As_{0.02}Sb_{0.98}$ emitindo em 2.2 μ m crescidas por epitaxia de fase líquida. Nós mostramos neste trabalho que o desenvolvimento de lasers de corrente limiar baixa são limita-

dos por um excessivo espalhamento de corrente na camada ativa de tipo-p de baixa resistividade. Isso foi parcialmente resolvido mudando a região ativa para tipo-n. O valor mínimo de I_{th} obtido para os novos lasers de camada ativa tipo-n, foi de 290mA, muito mais baixa se comparada aos 800mA para os de camada tipo-p, sendo que a densidade de corrente limiar para lasers de área larga é a mesma para ambos os casos (3 kA/cm²). Nós também mostramos que o índice de refração da região ativa pode ser estimado utilizando-se o perfil do campo afastado transversal ajustado por cálculos teóricos para o modo fundamental. O valor obtido de 3,78, maior que valores teóricos calculados anteriormente, assegura um bom confinamento ótico para essa HD. 1 - J.L.H.Perez, M.B.Z.Morosini, A.C.F.da Silveira e N.B.Patel in "Gallium Arsenide and Related Compounds", ed. G.Stringfellow, Inst. of Physics, Bristol, 483, (1992).

**O EFEITO HANLE NÃO-LINEAR EM
TRANSIÇÕES LASER DO AR⁺**

CRUZ, F. C. DA; GOMIDE, J. V. B.; SCALABRIN,
A.; PEREIRA, D.

*Departamento de Eletrônica Quântica, Instituto de Física,
Unicamp*

MIRAGE, A.

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - CNEN/SP

A espectroscopia optogalvânica é utilizada para a observação do efeito Hanle não-linear em transições laser do Ar⁺, contido numa lâmpada de cátodo ôco. O efeito é responsável, em parte, pelo aumento de potência em lasers iônicos a gás, quando submetidos a um campo magnético. Além disso, possibilita a determinação de parâmetros espectroscópicos tais como o parâmetro de saturação e tempos de vida das transições. Sinais Hanle foram obtidos para diversos valores de potência do laser e corrente da descarga, tomando o sinal optogalvânico em função do campo magnético. Uma análise teórica utilizando o formalismo de matriz densidade é utilizada para reproduzir os resultados experimentais e determinar parâmetros espectroscópicos relevantes.

**ESPECTROSCOPIA A TRANSFORMADA
DE FOURIER DE ¹²HCOOH E ¹³HCOOH**

LUÍS, G. M. R. DE S.; SCALABRIN, A.; PEREIRA, D.

IFGW/ UNICAMP

ZÍLIO, S. C.

IFQSC/USP

Numerosos estudos sobre o espectro roto-vibracional do ácido fórmico e suas espécies isotópicas têm sido realizados no passado. Dois tipos de experimentos determinaram um crescente interesse na obtenção de dados espectroscópicos de alta resolução para essas espécies. O primeiro tipo de experimento está relacionado com a

identificação de espécies isotópicas de ácido fórmico em observações interestelares. O segundo tipo está relacionado com a utilização dessas moléculas como eficiente meio ativo de lasers operantes na região do Infravermelho Longínquo (IVL). Neste trabalho apresentamos dados de espectroscopia a Transformada de Fourier (TF) dos isótopos $^{12}\text{HCOOH}$ e $^{13}\text{HCOOH}$ na região de 450 cm^{-1} a 5000 cm^{-1} . Apresentamos também dados relativos à coincidência entre as linhas de emissão do laser de CO_2 e de absorção do ácido fórmico. Tais dados são importantes na análise da possibilidade de utilização de lasers de CO_2 para o bombeamento óptico do ácido fórmico para a geração de radiação laser no IVL.

$^{13}\text{CD}_3\text{OH}$: OBSERVAÇÕES E IDENTIFICAÇÃO DE NOVAS TRANSIÇÕES LASER NO INFRAVERMELHO LONGÍNQUO

TELLES, E. M.; PEREIRA, D.; SCALABRIN, A.
UNICAMP

MORAES, J. C. S. DE
Departamento de Ciências, FEIS-UNESP

A descoberta dos lasers moleculares excitados opticamente no infravermelho longínquo (IVL) abriu novas oportunidades de pesquisa nesta região do espectro. Eles são suficientemente potentes, estáveis e monocromáticos para serem usados em áreas onde alta resolução é necessária e demonstram potencialidade para preencher todo o intervalo entre as regiões das microondas e óptica. Neste trabalho, reinvestigamos o $^{13}\text{CD}_3\text{OH}$ a fim de identificar novas emissões laser utilizando dados de alta resolução a Transformada de Fourier e de absorção fotoacústica na própria cavidade IVL. Para isso, um laser de CO_2 em guia de onda com 300 MHz de largura de curva de ganho e uma cavidade IVL do tipo Fabry Perot aberta foram utilizados. As novas emissões identificadas foram caracterizadas em comprimento de onda, offset da transição de absorção, polarização relativa e intensidade. Dentre estas novas emissões podemos destacar a de $655.0\text{ }\mu\text{m}$, prevista teoricamente, a de $2625\text{ }\mu\text{m}$ como sendo a mais longa emissão IVL gerada pelo $^{13}\text{CD}_3\text{OH}$ além de outras três associadas a transições de absorção pertencentes ao modo assimétrico "bending" do $^{13}\text{CD}_3$ com respectivos offsets em boa concordância com dados de alta resolução a Transformada de Fourier. Suporte financeiro: CNPq, FAPESP, FAEP

MEDIDA DA SEÇÃO DE CHOQUE DE ABSORÇÃO DO U_I POR ESPECTROSCOPIA OPTOGALVÂNICA

DESTRO¹, M. G.; NERI, J. W.; SCHWAB, C.;
RODRIGUES, N. A. S.

CTA/IEAv - São José dos Campos - SP
MIRAGE, A.

IPEN-CNEN/SP

Uma relação entre a magnitude do sinal optogalvânico (SOG) e o fluxo de fótons de excitação, obtida com base na solução das equações de taxa do sistema de dois níveis, foi verificada experimentalmente. Usou-se um laser de corante pulsado, sintonizado nas transições $0 \rightarrow 16900\text{ cm}^{-1}$ e $0 \rightarrow 16505\text{ cm}^{-1}$ do urânio neutro (U_I), incidente numa descarga de cátodo oco de U-Ar, para obter o SOG em função da potência do laser. Os resultados experimentais foram ajustados numericamente à relação teórica obtida. Os valores obtidos para as seções de choque de absorção são comparados com valores obtidos por outras técnicas.

¹ Em colaboração com Departamento de Física - CTA/ITA - São José dos Campos - SP

HOLOCAD - DIFFRACTIVE IMAGING ANALYSIS AND DEVELOPMENT OF A DEPTH SELECTOR

LUNAZZI, J. J.; DIAMAND, M.; JARAMILLO, J. M.
UNICAMP

HOLOCAD is a 3D imaging system that generates holographic figures with continuous horizontal parallax. In order to overcome the limitation of the current version of HOLOCAD that forms in space only plane figures, we describe a technique to build a depth-selector capable of generating figures that occupy the tridimensional space. The selector is made of a galvanometer with a mirror and a diffractive lens holographically generated, that presents variable spatial frequency. Design details and experimental results are presented. Equations that determine the formation of a punctual image through a diffraction grating are reviewed and experimentally verified. We describe the image behavior when the object point is displaced, and the proportionality between object and image is observed.

Acknowledgements : CAPES, CNPq, UNICAMP - FAEP, FAPESP

ESTUDO DE MEDIDA DE DEFORMAÇÃO PELO USO DA SHEAROGRAFIA

RODRIGUES, E.; MURAMATSU, M.

Instituto de Física da USP

LUNAZZI, J. J.

Instituto de Física da UNICAMP

Shearografia é um método óptico a laser originalmente desenvolvido para medida de deformação. Ao contrário da holografia que mede deslocamentos da superfície, a shearografia mede a derivada desses deslocamentos. A técnica consiste na iluminação (por dupla exposição) de um objeto (deformado entre as exposições) por uma fonte de luz coerente, sendo que os raios espalhados pelo objeto são captados por uma câmera de características

particulares determinada de câmara shearográfica. Esta câmara consiste numa câmara fotográfica comum, com a diferença de ter uma cunha de vidro colocada no plano da íris de sua lente, de tal maneira, que ocupe metade do campo desta lente. Isto fará com que o raio de luz vindo de dois pontos vizinhos do objeto interfiram em um único ponto no plano imagem.

Após a imagem ser registrada por filme fotográfico de alta resolução, faz-se necessário o uso de um processo de filtragem de Fourier passa-alta que irá nos proporcionar uma imagem final formada por franjas, já que estas não são imediatamente visíveis após o registro químico no filme. O padrão de franjas resultante representa o gradiente de deslocamento da superfície.

Tanto a holografia como a shearografia possuem a vantagem de serem métodos que proporcionam a análise de campo todo e sem contato. Contudo, a câmara shearográfica oferece várias vantagens em relação à holografia. Estas podem ser resumidas a seguir:

1. Requer um arranjo óptico simples, eliminando, assim, o problema de alinhamento.
2. É moderada quanto à exigência de isolamento de vibração.
3. O comprimento de coerência é reduzido.
4. Proporciona uma maior e mais controlável faixa de sensibilidade.
5. O meio de registro pode ter resolução baixa.

Serão apresentados alguns resultados preliminares da técnica, assim como, da construção da cunha de vidro, pois esta deve apresentar um ângulo muito pequeno que é da ordem de 10^{-2} grau.

Reconstrução de Hogramas Temporais

REIGADA, D. C.; TAGLIAFERRI, A. A.

UFF

Um "espectro canelado" (obtido iluminando-se um interferômetro de Michelson com luz branca) pode ser considerado como um holograma temporal, já que a sua gravação é feita pela superposição do espectro cromático-ou temporal- de duas ondas defasadas temporalmente, sendo uma delas considerada como referência. Sabe-se também que a separação das franjas do espectro canelado está diretamente relacionada com a separação longitudinal entre os espelhos (ou à espessura de uma lâmina de um material transparente qualquer colocada em um dos braços do interferômetro quando os espelhos se encontram no contato óptico. Este trabalho consiste então em estudar a aplicação da reconstrução de hologramas temporais em medidas de espessura.

TÉCNICAS PARA GRAVAÇÃO DE REDES DE BRAGG EM FIBRAS ÓTICAS

KAWASE, L. R.

PUC-RIO e CEPEL

CARVALHO, I. C. DOS S.; MARGULIS, W.

PUC-RIO

VALENTE, L. C. G.

CEPEL

O estudo da foto-sensibilidade no núcleo de fibras óticas dopadas com germânio tem sido alvo de intensa investigação nos últimos anos. Com este efeito é possível formar redes de Bragg ao se incidir radiação laser em fibras óticas. Serão discutidas duas técnicas possíveis para gerar esse tipo de rede. A primeira é um processo interno à fibra ótica, onde a onda de luz altamente coerente injetada e a onda refletida pela interface final da fibra formam uma onda estacionária que induz uma mudança periódica no índice de refração. A segunda técnica para a produção de redes utiliza um método holográfico externo à fibra, a partir de dois feixes coerentes de radiação Ultra-Violeta. Estes feixes incidem lateralmente a fibra ótica formando uma figura de interferências, que induz uma variação periódica do índice de refração no núcleo da mesma. Uma vez gerada a rede de Bragg, ao se acoplar luz de diferentes comprimentos de onda, somente aquela no qual foi escrita a rede é refletida. A fibra permite então a construção de filtros óticos e acopladores de polarização com diversas aplicações em telecomunicações e sensoriamento remoto.

SIMULAÇÃO NUMÉRICA PARA CARACTERIZAÇÃO DE GUIAS DE ONDA PLANARES

GARCIA, C. R. S.; CESAR, C. L.; BARBOSA, L. C.; ARANHA, N.; ROMANO, A.

Instituto de Física - IFGW - UNICAMP

ALVES, O. L.

Instituto de Química - UNICAMP

Com a possibilidade de se obter "chaveamento óptico em materiais não lineares houve um grande e renovado interesse em guias de ondas planares em vidros. O aumento do comprimento de interação mantendo a radiação altamente confinada o tornam ideal para aplicações em óptica não-linear. Desenvolvemos um programa de simulação numérica que nos permite obter as constantes de propagação e o número de modos guiados nas geometrias TE e TM. Ele pode ser aplicado para guias de muitas camadas, com o que simulamos um perfil de índice de refração com a profundidade. Como nossos guias são fabricados por troca iônica, um processo difusivo, é inevitável que o perfil do índice de refração varie com a profundidade. Este programa está sendo usado para caracterizar e calibrar o processo de fabricação de nossos guias. Ele também pode ser usado para se obter o comprimento em que a luz inicialmente confinada em um guia seja totalmente acoplada em um segundo guia próximo, ou seja, um acoplador. Este estudo é muito importante para o "chaveamento óptico" onde o acoplamento não-linear é

o mecanismo que chaveia. Apresentaremos resultados da simulação de guias com perfis de índices de refração típicos da fabricação por troca iônica, e também medidas de atenuação e acoplamento entre guias canais.

MONTAGEM DE UM LASER SEMICONDUTOR MONOMODO À CAVIDADE EXTERNA UTILIZANDO UM FILTRO ESPECTRAL À FIBRA ÓPTICA COMO ELEMENTO DE SINTONIA.

Rocco, M. T. M.

UNICAMP

CELASCHI, S.; BORIN, F.

CPqD - TELEBRÁS

Essa montagem visa a construção de um laser semicondutor à cavidade externa utilizando um filtro espectral à fibra óptica, desenvolvido no CPqD da TELEBRÁS, como elemento de sintonia. A função de transferência do filtro absoritivo ($F(\lambda) = \text{sen}^2 \frac{\pi \Delta \lambda}{\Delta \lambda}$ onde $\Delta \lambda = 1.2 \text{ nm}$ é o "Free Spectral Range" do filtro) permite selecionar um modo de operação do laser semicondutor, rejeitando os demais, obtendo - se assim, um laser semicondutor à cavidade externa altamente monomodo. A sintonia espectral pode ser obtida através do controle da temperatura T do filtro, onde $\frac{\Delta F}{\Delta T} = -(25 \pm 3) * 10^{-3} \text{ nm}/^\circ\text{C}$. Através da fabricação de um espelho na extremidade da fibra que compõe o filtro obtém - se a reflexão do sinal óptico e sua realimentação à região ativa do laser, formando - se assim, a cavidade externa. Foi utilizado, então, um acoplador zado um acoplador direcional 2X2 à fibra óptica com as saídas emendadas (T - mágico), dadas fazendo com que, praticamente 100% do sinal em $\lambda = 1.3 \mu\text{m}$ retornasse retorne ao diodo laser. Como existem reflexões intrínsecas e perdas na interface laser-fibra foi necessário aumentar o acoplamento entre o laser semicondutor e o filtro espectral. Para isso, foi usada uma resina óptica fotocurável com índice de refração $n_D = 1.535$ preenchendo o "gap" entre uma das faces do diodo laser e a extremidade da fibra de entrada/saída do filtro. Foram feitas, então, medidas com o diodo montado em DIP - 14 e obteve - se 3 modos realimentados pela cavidade externa. Os outros modos foram suprimidos em 12 dB. A seguir, será implementada uma montagem com um laser semicondutor com a metade do comprimento ($150 \mu\text{m}$) do laser convencional, para que se obtenha o dobro do espaçamento entre os modos, e se consiga, assim, a operação em modo único.

ESTUDO DE GRADES EM FIBRAS UTILIZANDO A TÉCNICA HEAT SCAN

LACERDA, M. DE M.; MARGULIS, W.

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

O estudo de grades de $\chi^{(2)}$ (Susceptibilidade de segunda ordem) em fibras óticas tem como objetivo compreender

a geração de segundo harmônico (2ω) nestes materiais, onde a priori é um efeito proibido. Pulsos de luz de 2ω de alta intensidade são gerados utilizando-se um laser Nd:YAG Q-Switched, Mode-locked com $\lambda = 1.064 \mu\text{m}$. A preparação é feita incidindo-se apenas radiação infravermelha na fibra, com uma potência média de 280 mW. A técnica de varredura de calor (Heat Scan) é uma poderosa maneira de caracterizar fibras dobradoras de frequência, através de uma varredura de um elemento térmico ao longo da fibra. Uma mudança na fase relativa entre o feixe de leitura ω e os pulsos de 2ω devida ao elemento aquecedor pode resultar na interferência destrutiva entre o segundo harmônico gerado antes e depois do elemento de calor, possibilitando o mapeamento da rede de $\chi^{(2)}$ responsável pela geração de segundo harmônico. Neste trabalho descrevem-se experimentos de caracterização utilizando a técnica de varredura de calor.

MODELO DE TAXA PARA O PROCESSO DE PREPARAÇÃO DE FIBRAS DOBRADORAS DE FREQUÊNCIA

LESCHIE, B.

Inst. Física, UFRJ, Ilha do Fundão

MENDONÇA, J. P. R. F. DE

Dep. Física UFJF- MG

MARGULIS, W.

Dep. Física PUC- RJ

É um fato bem estabelecido que a irradiação de sílica dopada com Ge com luz coerente ($\lambda = 1064 \text{ nm}$) junto com o segundo harmônico pode criar uma rede permanente de $\Xi^{(2)}$ que pode ser usada para geração de segundo harmônico em regime de quase-casamento de fase. O processo de "preparação", isto é, a formação de uma rede de $\Xi^{(2)}$ ainda não tem uma explicação teórica satisfatória. Desenvolvemos um modelo de taxa do processo de formação de uma rede de $\Xi^{(2)}$ numa fibra de sílica dopada com Ge sob a influência de radiação infravermelha e do seu segundo harmônico. A formação de uma rede de $\Xi^{(2)}$ é descrita por duas equações integrodiferenciais acopladas. Resolvemos estas equações numericamente. O comportamento temporal e espacial das intensidades do segundo harmônico gerado coincide qualitativamente com dados experimentais. O modelo leva em consideração as fases das ondas e permite comparações interessantes com experiências interferométricas. O comportamento das fases apresenta ainda discrepâncias com dados experimentais.

PERFIL RESULTANTE DE REDES HOLOGRÁFICAS GRAVADAS EM FOTORRESINA

ASSUNÇÃO, B. M.; COSTA, I. F. DA; LIMA, C. R.

A. DE; CESCATO, L.

UNICAMP

A eficiência de componentes ópticos holográficos depende fortemente do perfil da estrutura gravada na fotorresina. Um modelo teórico foi desenvolvido para calcular este perfil levando em consideração os efeitos da exposição, fotossensibilização, revelação e resolução da fotorresina. O cálculo, feito numericamente utilizando um simples computador IBM-PC, foi utilizado para estudar a influência de cada paraâmetro do processo no perfil resultante da fotorresina. Os efeitos da isotropia na revelação úmida, a não linearidade da curva de resposta da fotorresina, a luz de fundo e as ondas estacionárias produzidas pela reflexão na interface filme-substrato foram analisadas usando este modelo e os resultados foram confirmados experimentalmente.

SINTONIA DE UM LASER DE CENTRO DE COR POR UM PAR DE PRISMAS

PEIRO, G. P.; BUSTAMANTE, A. N. P.; MORATO, S. P.; VIEIRA JR, N. D.
IPEN/CNEN - São Paulo

Lasers de centro de cor apresentam bandas de emissão largas, que permitem a sua sintonia. A sintonização dos lasers em geral requer sistemas complexos, de difícil operação e montagem. Nesse trabalho descrevemos a operação sintonizada do laser de KCl:Tl, por um par de prismas e uma fenda. O primeiro prisma intruz uma dispersão no feixe que é colimado pelo segundo prisma. A fenda é posicionada entre o segundo prisma e o espelho de saída. Nesse caso, a sintonia é uma função do deslocamento linear da fenda, que pode ser facilmente calibrado. Utilizou-se como meio laser ativo os centros de $Tl^0(1)$ em KCl:Tl, que são eficientemente bombeados pelo laser de Nd e emitem numa banda centrada em $1,52 \mu m$. Obtivemos a sintonia no intervalo de $1,47$ a $1,58 \mu m$, com potência pico de $120 mW$. A resolução máxima obtida num arranjo simples foi de $1,2 \mu m$ e uma teoria preliminar foi desenvolvida para explicar essa resolução.

POLÍMEROS

Workshop: Correlação Eletrônica em Átomos e Moléculas (POL, ATO) – 19/05/93

Teorias de Muitos Corpos e o Problema de Correlação Eletrônica em Átomos e Moléculas CANUTO, S.

DEPTO. DE FÍSICA, UFPE, 50732910 RECIFE, PE. INST. DE FÍSICA, USP, 01498-970 SÃO PAULO, SP.

A descrição adequada do problema de correlação eletrônica é central para a previsão quantitativa e qualitativa de propriedades atômicas e moleculares. Teoria de perturbação de muitos corpos e coupled-cluster são técnicas complementares que permitem obter as correções de correlação eletrônicas de forma sistemática e precisa. Em nossa apresentação discutiremos a origem do problema de correlação eletrônica, como introduzir as correções necessárias e os vários métodos alternativos para lidar com este problema, incluindo interação de configurações. Discutiremos criticamente limitações, vantagens, desvantagens e perspectivas. Questões teóricas e computacionais serão consideradas. Exemplos ilustrativos serão mostrados incluindo vários aspectos do problema de correlação para estruturas, espectros e propriedades de átomos e moléculas.

Aplicações da Função de Onda Multiestrutural Generalizada (MEG)

NASCIMENTO, M. A. C.

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

A função de onda Multiestrutural Generalizada combina as vantagens dos modelos VB e SCF MO, preservando as estruturas químicas clássicas mas otimizando os orbitais de forma auto-consistente. Cada estrutura pode ser representada por uma função do tipo Hartree-Fock, ou ainda por funções do tipo MCSCF e CI que contem, claramente descritos, os mais importantes efeitos de correlação. A função de onda final é obtida variacionalmente e consiste da superposição das funções de onda representando cada uma das diferentes estruturas consideradas.

Esta função de onda é particularmente adequada quando a descrição do estado molecular requer funções de onda localizadas. A superposição de estruturas localizadas e não localizadas permite definir variacionalmente o grau de localização necessário à melhor descrição de sistema.

Ela é também bastante conveniente para descrever efeitos de correlação eletrônica, mantendo uma forma compacta e fácil de se interpretar. Como cada uma das estruturas pode ser representada por uma função de onda correlacionada contendo efeitos dominantes (claramente identificados), um número bastante reduzido de estruturas será necessário na função de onda MEG para se descreverem os efeitos menos importantes. A recuperação destes efeitos residuais, mas não desprezíveis, pelos métodos tradicionais, requer um grande número de configurações em cálculos do tipo CI ou CC, ou um tratamento de alta ordem do tipo MBPT. Portanto, a função de onda MEG permite a introdução dos efeitos de correlação sem que se perca a visão simples fornecida pelas estruturas químicas e com moderado esforço computacional.

Serão apresentadas aplicações da função de onda MEG no estudo de espectros de fotoeletrons, transições de camada interna em moléculas, e no estudo de transições eletrônicas em polímeros lineares.

Correlação Eletrônica em Estados Excitados via Interação de Configurações

ORNELLAS, F. R.

Instituto de Química, Universidade de São Paulo Caixa Postal 20780, 01498-970, São Paulo

As várias conceituações de correlação eletrônica serão apresentadas e o papel da metodologia Interação de Configurações (CI) na descrição dessa correlação será discutido. Aspectos formais destacando a simplicidade do método e problemas de ordem prática envolvendo sua viabilização computacional serão também abordados. Aplicações

da metodologia na caracterização de estados eletrônicos excitados de sistemas moleculares e de suas propriedades ilustrarão sua versatilidade e rigor. Essa caracterização não está restrita somente a regiões próximas ao mínimo de energia do sistema mas se estende a toda curva ou superfície de energia potencial. Neste particular, o conhecimento experimental dos termos atômicos permite não só obter o conjunto dos possíveis estados moleculares para uma descrição global do sistema mas também avaliar a qualidade das curvas construídas comparando-se seu limite assintótico com dados experimentais sobre os estados atômicos. Do ponto de vista teórico e também computacional, descrever o sistema numa configuração não próxima à região de mínimo ou estar-se interessado num estado excitado não introduz nenhuma dificuldade adicional no método.

Outro aspecto relevante a ser salientado é que o uso de uma base molecular suficientemente extensa e comum a todos os estados eletrônicos permite ainda que propriedades envolvendo dois estados como o momento de transição sejam computadas com rigor e relativa facilidade viabilizando dessa maneira a obtenção de probabilidades de transição e tempos de vida radiativa. O sucesso do método na descrição de estados conhecidos experimentalmente tem-nos levado também não só a prever novos estados eletrônicos de moléculas já conhecidas, mas principalmente a prever e caracterizar novas espécies moleculares.

Polímeros Modificados (POL) – *19/05/93*

Polímeros com Propriedades Ópticas não Lineares para Comunicações Ópticas

SANCHES, M. P. R.; REGGIANI, A. E.

Telebrás - Centro de Pesquisa e Desenvolvimento

Os polímeros com propriedades ópticas não lineares apresentam hoje em dia uma importante classe de materiais com grande potencial para o desenvolvimento de dispositivos ópticos diversos para aplicações em telecomunicações ópticas e computação óptica.

Esta busca de materiais alternativos se deve ao fato de que o potencial desta tecnologia requer materiais que possuam alto efeito óptico não linear e possam ser processados em diferentes tipos de estruturas.

Os polímeros orgânicos têm se mostrado bastante adequados devido à possibilidade de se otimizar as estruturas moleculares dos cromóforos responsáveis pelos efeitos ópticos não lineares que possuem tempos de resposta inerentemente rápidos, aliado à flexibilidade de processamento dos materiais poliméricos, permitindo com isso a obtenção de materiais com alto coeficiente eletro-óptico, baixa constante dielétrica, resistentes ao choque, à radiação e com boa qualidade óptica.

O objetivo deste trabalho é apresentar parte do conhecimento adquirido em estudos para avaliação e desenvolvimento destes materiais, e os resultados que estão sendo apresentados na literatura que têm nos motivado na direção desta pesquisa.

EFEITO DE CARGA ESPACIAL DURANTE A MUDANÇA CONFORMACIONAL NO P(VDF/TrFE).

GUIMARÃES NETO, J. M.

Departamento de Física-CCN-UFPI

FARIA, R. M.

Instituto de Física e Química de São Carlos-USP

Há fortes evidências de que a origem da ferroeletricidade, e principalmente das atividades piezo e piroelétricas, em copolímeros de poli(vinilideno de flúor) com poli(trifluoretileno) (PVDF/TrFE), tem além de efeitos cooperativos dipolares situados nos cristalitos do material, uma contribuição efetiva de cargas espaciais. Essas cargas estariam ligadas ao redor dos cristalitos ferroelétricos por atração eletrostática. Os copolímeros P(VDF/TrFE) em diferentes composições molares sofrem transição de fase estrutural ferro-paraelétrica, oriunda de uma mudança na conformação molecular, de trans-planar para helicoidal. Nesse processo de mudança de estrutura, as cargas se desligariam dos cristalitos e se rearranjariam no interior do material, movidas pela nova configuração de campo interno. Nesse trabalho apresentamos algumas medidas de correntes de despolarização estimuladas termicamente, de correntes isotermas, e ainda de medidas com amostras submetidas a diferentes tratamentos térmicos cujos resultados fortalecem as idéias descritas acima.

ESTUDOS DE ALCANCES, ESTABILIDADE TÉRMICA E DIFUSIVIDADE DE FOTORESISTES IMPLANTADOS COM Sn, Sb E Ag.

MAITEZ, R. L.; AMARAL, L.; BEHAR, M.

UFRGS

No presente trabalho implantamos íons de Sb, Sn e Ag no fotoresiste AZ1350 (polímero novolak + ingrediente foto-ativo) e usamos a técnica de retroespalhamento de Rutherford a fim de estudar os seguintes pontos: — a) O alcance projetado e o correspondente desvio estatístico em função da energia de implantação; — b) A estabilidade térmica do fotoresiste, após uma implantação com estes elementos até uma profundidade de $\sim 500 \text{ \AA}$; — c) A difusividade térmica destes íons implantados.

Como resultados encontramos que os parâmetros de implantação, extraídos dos perfis experimentais, estão em

bom acordo com as predições teóricas obtidas a partir da teoria de Ziegler, Biersack e Littmark. No entanto, verificamos que o perfil da perda de oxigênio ocorrida durante o processo de implantação não corresponde ao perfil de danos no material obtido teoricamente. Com respeito a estabilidade térmica, encontramos que implantações rasas de Sb e Sn tornam o fotoresiste mais resistente quanto a perda de material (principalmente o Sb). Implantações com a Ag, por sua vez, não aumentam a estabilidade do fotoresiste implantado. A barreira que reduz a liberação de moléculas como consequência do tratamento térmico é devido a dois fatores: danificação ocasionada pelo processo de implantação e efeitos químicos. Finalmente, os estudos de difusividade mostram que íons de Sb e Sn difundem regularmente onde a energia de ativação é de ~ 180 meV. A Ag por sua vez apresenta uma forte segregação.

CARACTERIZAÇÃO ELÉTRICA E ESTRUTURAL DE FILMES DE P(VDF-TrFE) DOPADOS

KONDO, A. A.

USP - IFQSC

ALVES, N.

UNESP - Presidente Prudente

O poli(fluoreto de vinilideno) (PVDF) e seus copolímeros com trifluoretileno (PVDF-TrFE), são polímeros semicristalinos que apresentam propriedades ferroelétricas. Muitas aplicações como transdutores eletro-mecânicos e piroelétricos foram desenvolvidas com estes materiais. Devido à sua natureza polar, estes materiais apresentam também polarizabilidade de segunda ordem, fato que tem sido de grande interesse para aplicações em ótica não linear, como por exemplo na geração de segundo harmônico ou modulação ótica. Estes efeitos nos polímeros ferroelétricos podem ser reforçados dopando os filmes com moléculas orgânicas, que exibem hiperpolarizabilidade. Os copolímeros quando dopados com corantes, adquirem também sensibilização ótica e fotocondutividade. Tem-se investigado materiais poliméricos, principalmente copolímeros P(VDF-TrFE), dopado com corantes de ótica não linear, que possam ser candidatos à substituição de materiais convencionais na fabricação de dispositivos. Dentre os resultados que já obtivemos destaca-se o elevado grau de cristalinidade apresentado pelo copolímero 70/30 dopado com Rodamina 560 e DODCI, mesmo sem nenhum tratamento térmico. Este resultado é altamente promissor, pois sabe-se que a atividade ferroelétrica é favorecida nos polímeros de alto grau de cristalinidade.

Polímeros (POL) - 19/05/93

Estudo do Poli(p-Fenileno) por Correntes Termo- Estimuladas de Depolarização*

WANG, M. S. E.; CAMPOS, M.; LI, M. S.;

OLIVEIRA, L.

Universidade de São Paulo, São Carlos

Foram realizadas medidas de corrente termo-estimuladas em amostras de poli(p-fenileno) (PPP). O PPP foi obtido na forma de pó, utilizando-se um processo de preparação química onde o benzeno foi polimerizado na presença de cloreto de alumínio e cloreto de cobre, segundo o método desenvolvido por Kovacic. Amostras sólidas na forma de discos, com diâmetro de 12.9 mm e espessuras que variaram entre 0.5 e 1.0 mm, foram obtidas pela compactação do pó a uma pressão de 2.5×10^5 N/m². Para as medidas elétricas foram depositados por evaporação no vácuo, contatos de ouro ou índio, nas duas faces das amostras. As medidas de corrente termo-estimuladas foram realizadas, aplicando-se um amperímetro DC a temperatura ambiente e resfriando-se amostras com campo aplicado até 4°K. Nessa temperatura, o campo foi desligado e as amostras aquecidas até 500°K, com uma razão de aquecimento de 3°K/min. Dessa forma foram observados três picos de correntes, cujos máximos ocorreram nas temperaturas de 136, 160 e 350 °K. Essas medidas foram complementadas com o emprego da técnica da calorimetria diferencial (DSC). Será discutida a possível origem de cada um dos picos observados.

* Trabalho realizado com patrocínio financeiro da CNPq (RHAE) e FAPESP.

INFLUÊNCIA DA UMIDADE EM CORRENTES DE ABSORÇÃO DIELETRICA EM POLI(ETILENO TERAFALATO).

NOGUEIRA, J. DE S.

Departamento de Física - UFMT

FARIA, R. M.

Instituto de Física e Química de São Carlos-USP

Medidas de correntes de carga e descarga em filmes de poli(etileno tereftalato) de 12 μ m à temperatura ambiente foram realizadas em diferentes atmosferas e no vácuo. As medidas feitas no vácuo obedeceram o Princípio da Superposição Linear, porém as realizadas sob atmosferas controladas violaram esse Princípio. Em medidas de carga iniciadas em ambientes de umidade relativa do ar elevada, seguida de vácuo, foram observadas uma inversão na corrente elétrica, isto é, a corrente registrada apresentou sinal contrário à da tensão aplicada. Foram realizadas medidas em diferentes umidades relativas do ar controladas por soluções saturadas de sais (NaCl-75%, K₂CO₃-43% e a 100%). A inversão

de corrente observada pode ser explicada pela extracção de dipolos de H_2O absorvidos pela amostra e previamente orientados pelo campo externo. O processo de extração dos dipolos orientados no interior da amostra se por um processo difusivo de transporte de massa, uma vez que fora da amostra passa a existir vácuo.

Estrutura Eletrônica de Polímeros Orgânicos Fotocondutores

CUNHA, C. R. M. DA; CALDAS, M. J.

USP

É sabido que a condutividade elétrica em cadeias poliméricas pode ser equiparável à do quartzo ou diamante (no caso do polifenileno, por exemplo), mas pode também ser próxima à de um semicondutor típico (no caso do trans-poliacetileno puro - TPA) ou de um metal como o bismuto (no caso do polipirrol dopado). De fato, alguns polímeros como o TPA ou a polianilina, podem se dopados com íons apropriados, apresentar variações de 15 ordens de magnitude na condutividade. Em geral polímeros que apresentam condutividade elétrica apreciável e propriedades eletrônicas interessantes tem um esqueleto em conjugação π , ou seja, ao menos parte da cadeia constitui um sistema quasi-unidimensional de elétrons delocalizados. A grande maleabilidade mecânica e resistência térmica de materiais orgânicos os torna atrativos do ponto de vista tecnológico se acompanhados de propriedades ópticas utilizáveis. Para tanto, além do efeito eletro-óptico o material deve apresentar fotocondutividade e possuir armadilhas para portadores fotogerados. Estamos interessados no estudo teórico de polímeros fotocondutores, em especial em cadeias contendo grupos *triciano-carbazol* em segmentos laterais, recentemente sintetizados. Dada a complexidade do sistema, o estudo será feito em vários níveis de modelagem. Como a geometria dos fragmentos não é muito conhecida iniciamos o nosso estudo com a molécula de carbazol. Obtemos a geometria para a molécula simples e também dopada com triciano. Para isso utilizamos, no cálculo da estrutura eletrônica, o método semiempírico MNDO (*Modified Neglect of Differential Overlap*).

ESTUDO DA ORIGEM E NATUREZA DE ESTADOS ORBITAIS ESPÚREOS NOS EXTREMOS NÃO-SATURADOS DE UM CLUSTER FINITO DE TRANSPOLIACETILENO (TPA)

CORRÊA, G. E. D. M.; CALDAS, M. J.

Instituto de Física-USP

Um cálculo autoconsistente (SCF) da densidade de estados orbitais (DOS) da cadeia infinita de transpoliacetileno (TPA) traz como resultado uma banda de valência com um gap pronunciado, em torno de 3.5 eV [1]. Este valor do gap excede o valor experimen-

tal, em torno de 1.5 eV, problema este devido certamente ao tratamento de campo médio utilizado, e poderia ser sanado pela inclusão de correlação eletrônica. Como prosseguimento de [1] estamos implementando um cálculo de Interação de Configuração para cadeias hipotéticas de TPA, utilizando diretamente os resultados de [1] em um cálculo não-autoconsistente de "clusters" (cadeia finita). Entretanto, notamos que dependendo do cluster considerado (cíclico ou não-cíclico), estados orbitais espúreos aparecem dentro do gap da cadeia (que no mais reproduz a DOS obtida em [1]). Tais estados estão relacionados com os extremos dos clusters finitos: os carbonos das pontas do cluster foram tratados da mesma forma que os carbonos do meio (efeito de ponta não-saturada), estes estados estão ausentes no cluster cíclico e na cadeia infinita (não possuem pontas). Uma primeira hipótese é a de que estes estados estejam bem localizados nos carbonos marginais do cluster. Por outro lado, é também possível que estes estados estejam delocalizados, isto é, espalhados numa região considerável da cadeia. A importância da determinação da natureza destes estados espúreos está em que deles depende a possibilidade de se obter um cluster que represente com fidelidade as propriedades da cadeia infinita, possibilitando a inclusão dos efeitos de correlação. Pretende-se neste trabalho apresentar os resultados do modelo de cluster, e a análise e o tratamento proposto para os estados espúreos na cadeia finita.

H. S. Brandi, Belita Koiller and M. J. Caldas, Nota Científica FÍSICA- PUC/RJ

FABRICAÇÃO DE FILMES TIPO GEL DE POLI(O-ANISIDINA)

MATTOSO, L. H. C.; FARIA, R. M.

Instituto de Física e Química de São Carlos-USP

BULHÕES, L. O. DE S.

Departamento de Química-UFSCar

MACDIARMID, A. G.

Chemistry Department-University of Pennsylvania

Géis poliméricos são materiais de extrema importância na tecnologia de fabricação de vários tipos de membranas, adesivos, borrachas e fibras de alta resistência mecânica. Recentemente descobriu-se que a polianilina também pode desenvolver uma estrutura reticulada em solução, devido a presença de microcristalinidade, levando à formação de gel. Neste trabalho são apresentados as condições de preparação de filmes gel obtidos para a poli(o-anisidina). O tempo de gelificação é apresentado em função do tipo de solvente, sendo significativamente menor em n-metilpirrolidona (NMP) que em clorofórmio. Segundo os resultados de espectroscopia UV-VIS o polímero se encontra em uma conformação mais estendida (rod) em NMP, o que favorece a sua organização em microregiões cristalinas. O tempo de

gelificação diminui acentuadamente com o aumento da massa molar média do polímero, da concentração e temperatura da solução até um determinado ponto crítico, a partir do qual seu decaimento é bem mais lento. Para os polímeros de maior massa molar se obteve filmes gel de melhor qualidade, de boa flexibilidade, e de condutividade elétrica em torno de 1 S/cm quando dopados com ácido trifluoroacético.

CONFORMATIONAL STUDY OF N,N'-SUBSTITUTED POLYPYRROLES

SANTOS, M. C. DOS

UNICAMP

ZOTTI, G.

Istituto di Polarografia ed Elettrochimica Preparativa,

Padova (Italy)

BERLIN, A.

*Dipartimento di Chimica Organica e Industriale
dell'Università, Milano (Italy)*

Functionalization of organic conjugated polymers has proven to be a promising technique to prepare polymers in which several properties are combined in the same system. Polypyrroles (PPy) are among the most studied conjugated polymers. A substantial increase in PPy conductivity is obtained by chemical or electrochemical doping, though the saturation conductivity is not higher than 100 S/cm. PPy chains for fully 2-2' linked pyrroles are planar; however, about 30% of 2-3' linkages are usually found in both chemically or electrochemically prepared samples. Pyrrole derivatives presenting two heterocycles fused onto a pyrazine ring have been prepared, as well as their polymers. This has been one of the approaches for modifying the redox potential of PPy, which is quite negative and makes PP $o-C_6H_4$ (2), $-CH_2$ (3), $-(CH_2)_2$ (4) and $-(CH_2)_3$ (5)). The polymers produced are α -coupled and contain 0.25-0.30 counterion per pyrrole ring. A linear correlation between redox potentials and log of conductivities of the polymers evidences the influence of polymer electronic properties on charge transport. Geometry optimizations at AM1 level were carried out to correlate conformation-electronic structure-conductivity.

FILMES LANGMUIR E LANGMUIR-BLODGETT DE POLI(3-BUTILTIÓFENO) MISTURADO COM ÁCIDO ESTEÁRICO.

PAWLICKA, A.; FARIA, R. M.; OLIVEIRA JR, O. N.

Instituto de Física e Química de São Carlos-USP

YONASHIRO, M.

Departamento de Química-UFSCar

CANEVAROLO, S.

Departamento de Engenharia de Materiais-UFSCar

Filmes Langmuir e Langmuir-Blodgett (LB) de poli(3-butiltiofeno)/ácido esteárico foram preparados para di-

ferentes composições molares. O poli(3-butiltiofeno) (P3BT) foi sintetizado por meio de oxidação química usando como oxidante $FeCl_3$. Em uma das sínteses se obteve polímero com massa molar média de 15.300 g/mol, chamada de massa molar baixa (lw), e em outra de 100.000 g/mol, massa molar alta (hw). Misturas de P3BT com ácido esteárico (SA) foram feitas em três diferentes razões molares: 1(P3BT):2(SA), 1:1 e 2:1. Foi verificado que a área por molécula aumenta com o aumento da razão molar, e independe da massa molar do polímero. A pressão de colapso para filmes lw mostrou-se praticamente independente da razão molar da mistura, ficando em torno de 70 mN/m. Uma das características singulares da curva π -A é a existência de um mínimo que segue o colapso. Para polímero lw, a pressão de colapso diminui com o aumento de P3BT na mistura, não ultrapassando 60 mN/m. Nesse caso ao invés do tradicional máximo do colapso observado na isoterma π -A, simplesmente aparece uma diminuição na taxa de crescimento da curva de pressão. Isso indica que o rearranjo molecular no colapso é diferente para os filmes de alta e baixa massa molar. Para ambos os filmes o potencial de superfície apresenta um acentuado aumento para uma dada área crítica atingindo valores entre 300 e 400 mV. Para a transferência dos filmes Langmuir a substratos de vidro foi usado o método vertical, e pelo monitoramento das curvas de taxa de transferência e de transferência acumulativa, concluiu-se que foram obtidos bons filmes Langmuir-Blodgett.

DETERMINAÇÃO DA TEMPERATURA DE TRANSIÇÃO VÍTREA, EM FILMES DE POLIURETANA DERIVADA DO ÓLEO DE MAMONA, PELA TÉCNICA TSDC

NAGASHIMA, H. N.; SAKAMOTO, W. K.; KANDA, D.

H. F.

UNESP

Filmes de poliuretana (PU) preparados a partir do poliálcool derivado do óleo de mamona são caracterizados pela excelente estabilidade hidrolítica e têm grandes possibilidades de aplicações tecnológicas. Estes filmes são preparados a partir do produto da reação de álcoois (polióis) e isocianatos. Neste trabalho medidas de corrente de descarga termo-estimulada (TSDC) foram realizadas em filmes finos de PU derivados do óleo de mamona para diferentes intensidades de campo elétrico de polarização. Foi observado um pico de corrente em torno de 60°C em todas as medidas. Para baixos campos, a corrente torna-se negativa após o pico, entretanto, para campos altos, a corrente permanece positiva formando um segundo pico de corrente em torno de 100°C. Foram feitas medidas no vácuo para análise da influência da umidade nos picos de corrente. Realizaremos medidas de TSDC a baixas temperaturas, do nitrogênio líquido à temperatura ambiente.

Conhecendo-se o comportamento da corrente de polarização termo-estimulada nesta faixa de temperatura e acima desta, poderemos determinar o valor da temperatura de transição vítrea (T_g).

CORRENTE LIMITADA POR CARGA ESPACIAL EM POLI(SULFETO DE P-FENILENO) AMORFO/AST.

CAVALCANTE, E. M.

Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira - UNESP

CAMPOS, M. S. DE

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

Foram realizadas medidas de corrente (isócronas) em função da voltagem (DC) para amostras amorfas do poli(sulfeto de p-fenileno) (PPS). Amostras obtidas por um processo de fusão e resfriamento rápido do PPS, possuíam área da ordem de 2 cm^2 e espessura variáveis entre 10 e $100 \mu\text{m}$. Eletrodos de alumínio ouro ou índio, foram depositados por evaporação no vácuo, nas duas faces da amostra. Resultados mostraram que para campos elétricos até cerca de 10^4 V/cm , há predominância de um efeito de superfície. Para campos maiores observa-se um efeito de volume, onde a corrente é limitada por carga espacial. Na análise dos resultados foram calculadas as constantes de Schottky e as constantes dielétricas a partir da constante de Poole-Frenkel. Os resultados mostraram que para campos elétricos não muito intensos, a corrente elétrica em função da voltagem segue o modelo de efeito Schottky. Para campos maiores que 10^4 V/cm , a análise dos resultados em função da voltagem, eletrodos e espessura das amostras, mostrou que a corrente passa a ser limitada por carga espacial. Segundo este modelo a densidade de armadilha foi calculada como sendo $6 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ e V^{-1} e o nível de Fermi em $0,4 \text{ eV}$.

SOLUÇÃO DE UM PROBLEMA DE CARGA ESPACIAL EM GEOMETRIA NÃO TRIVIAL.

DANTAS, I. F.

Departamento de Física/CCN/UFPI

CUMINATO, J. A.

Departamento de Computação e Estatística/ICMSC/USP

FERREIRA, G. L.; FIGUEIREDO, M. T.

Departamento de Física e Ciência dos Materiais/IFQSC/USP

O método holográfico de Budd-Wheeler^a foi usado para se obter a solução de uma variante do seguinte problema de carga espacial livre: tem-se dois eletrodos planos, infinitos, entre os quais está aplicada uma tensão. Um dos eletrodos emite carga segundo uma dada função, dependente de uma única coordenada. Achar a distribuição de campo elétrico. A variante foi tomar a distribuição de carga emitida como uma função degrau - um zero-criando-se assim duas regiões distintas entre

os eletrodos, uma de Poisson e outra de Laplace respectivamente com e sem carga, entre os quais se efetuou o acoplamento das soluções^b. Estudou-se em especial a forma da última linha de corrente, adjacente à região de Laplace na sua dependência com o potencial aplicado.

^aC. J. Budd and A. Wheeler, *Proceed. Royal Soc. London* A417, 389(1988).

^bC. J. Budd, A. Friedman, B. Mclead and A. Wheeler, *SIAM J. Appl. Math.* 50, 181(1990).

POLIMERIZAÇÃO RAMIFICADA EM MEIOS COM IMPUREZAS

SILVA, L. R. DA; TAVARES, D.; ARAUJO, J. M.;
LUCENA, L. S.

Departamento de Física da UFRN, Natal, RN 59072-970

TSALLIS, C.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro

O estudo do crescimento de polímeros em meios aleatórios é um dos problemas mais interessantes na Física dos Sistemas Desordenados, embora pouco progresso tenha sido obtido neste campo. Neste trabalho analisamos a formação de polímeros ramificados num meio contendo impurezas distribuídas aleatoriamente, numa rede quadrada ($d = 2$). O modelo engloba 3 efeitos que competem entre si, dando origem a fenômenos críticos: o efeito do volume excluído, a probabilidade de ramificação que favorece o crescimento e o efeito inibidor das impurezas. Através de simulação em computador determinamos o diagrama de fase e as características das transições. Determinamos ainda o tamanho médio dos polímeros para diferentes concentrações de impurezas o qual mostra uma divergência nos pontos críticos. A polidispersão varia exponencialmente fora da linha crítica e tem um comportamento tipo lei de potência ao longo dessa linha. A distribuição exponencial caracteriza uma fase onde os polímeros possuem tamanho finito de modo semelhante ao que ocorre com localização de Anderson.

PROPRIEDADES ÓPTICAS DE POLÍMEROS DOPADOS COM MOLÉCULAS ORGÂNICAS

PLANAS, S. A.

UNICAMP, Inst. Física e Dep. Física, Universidade Federal Fluminense

MAZZALI, C.; DUARTE, A. S.

IFGW/UNICAMP

CARDOSO, V. L.

U. F. de Uberlândia

SANCHES, M. P. R.; VILLANI, M. F.; REGGIANI, A.
E.

CpqD/TELEBRÁS

PALANGE, E.

Università de Roma

FRAGNITO, H. L.

IFGW/UNICAMP

Os filmes poliméricos dopados com moléculas orgânicas são materiais atrativos para aplicações em dispositivos ópticos e eletro-ópticos devido à facilidade de processamento e fabricação, baixo custo, possibilidade de variação do índice de refração linear e não linear com a concentração de dopante, e altos coeficientes não lineares.

Neste trabalho descrevemos a fabricação e caracterização óptica linear e não linear de filmes poliméricos dopados com moléculas orgânicas, medindo as susceptibilidades não lineares até terceira ordem dos mesmos. Filmes de espessuras entre 7 e 25 μm de polímeros amorfos de *poly(methylmethacrylate)* (PMMA) dopados com os corantes orgânicos *Disperse Red 1* (DR1) e -1,1', 3, 3, 3', 3'-*Hexamethylindo-Tricarbocyanine Iodide*- (HTIC), a concentrações menores que 10 % em peso foram depositados sobre substrato de vidro Borosilicato usando o método de *spin coating*. Para as medidas do índice de refração foram preparadas especialmente amostras suspensas em ar. Para as medidas da susceptibilidade de segunda ordem os filmes foram polarizados com campo elétrico, induzindo assim uma anisotropia no material.

As propriedades ópticas lineares dos filmes na região de 300 a 2500 nm foram determinadas utilizando um espectrofotômetro. As principais fontes de perdas na região de 1000 a 1600 nm , onde os dispositivos irão eventualmente operar, são devidas à absorção e espalhamento. O índice de refração dos filmes foi medido a partir do período das franjas de interferência no espectro de transmitância em filmes suspensos em ar.

Medimos o índice de refração não linear dos polímeros, parâmetro relevante no desenho de dispositivos, em 1,06 μm , usando a técnica de *varredura-z* (baseado no efeito de autofocalização da luz). Pesquisamos a origem física do alto valor da não linearidade, chegando à conclusão que a causa é a absorção ressonante de dois fótons. Os coeficientes não lineares medidos, positivo para HTIC e negativo para DR1 foram altíssimos, duzentas vezes maior que o do CS_2 , usado como padrão.

Não linearidades de segunda ordem estão sendo medidas em amostras com as moléculas não lineares orientadas por um campo elétrico externo através da geração do segundo harmônico do laser de Nd:YAG em 532 nm , usando uma lâmina de quartzo como referência.

CARACTERIZAÇÃO DE POLÍMEROS DE CADEIA LATERAL PARA USO EM DISPOSITIVOS

CARDOSO, V.

Universidade Federal de Uberlândia

PLANAS, S. A.

UNICAMP, Inst. Física e Dep. Física, Universidade Federal Fluminense

VILLANI, M. F.; SANCHEZ, M. P. R.; REGGIANI, A.

E.

CPqD/TELEBRÁS

BITTENCOURT, E.

UNICAMP, Faculdade de Engenharia Química

Filmes poliméricos são materiais atrativos para aplicações em dispositivos ópticos não lineares tais como chaves e moduladores eletro-ópticos. Estes materiais podem apresentar propriedades ópticas, estruturais, físicas e químicas superiores aos cristais inorgânicos atualmente utilizados.

Neste trabalho apresentamos as etapas da síntese do monômero de metilmetacrilato com o cromóforo *Disperse Red 1* (DR1), sua purificação, polimerização e caracterização.

A síntese consiste de uma reação de esterificação entre o metacrilato clorado com o cromóforo em meio básico (piridina) a 100 °C. A purificação do monômero foi feita em coluna cromatográfica, seguido de reprecipitação em solventes adequados. A polimerização com iniciador térmico (AIBN) foi realizada sob vácuo após degasificação da solução. A reação de esterificação do cromóforo foi acompanhada através da absorção no infravermelho e a conversão final foi confirmada usando a técnica colorimétrica em filmes sendo que a mesma foi desenvolvida especialmente para este propósito. O polímero apresentou temperatura de transição vítrea de aproximadamente 130 °C.

As amostras de filmes foram depositados por *spin coating* sobre vidro e foram caracterizadas opticamente na região de UV-IV usando um espectrofotômetro Perkin-Elmer Lambda 9 computadorizado. As perdas encontradas foram principalmente devidas a espalhamento e absorção. Com esta técnica é possível detectar perdas de até 0.02 dB na região de 1.3 a 1.6 μm onde geralmente são usados os dispositivos.

Dinâmica de Sólitons no Polímero $(\text{CS})_x$.

MAGELA E SILVA, G.; CASTRO, C. F.; FONSECA, A. L. DE A.

UnB

Neste trabalho consideramos a dinâmica de sólitons no polímero diatômico conjugado $(\text{CS})_x$. As excitações não-lineares de energia mais baixa em polímeros deste tipo são pares de sólitons de spin 0 ou 1/2, e que possuem valores de carga irracionais.^a Determinamos os valores das cargas destes defeitos através de cálculos ab-initio dos parâmetros envolvidos. Estudamos também a mobilidade destes defeitos através de simulação numérica. Para tal, resolvemos as equações de movimento que descrevem a evolução temporal do sistema eletrônico e de fônons. Usando a extensão do modelo SSH para polímeros diatômicos, incluímos a ação de um campo elétrico externo e resolvemos as equações de movimento usando o tempo real. Para a caracterização da condutividade deste polímero a mobilidade

dos pares de sólitons pode ser um fator preponderante nos mecanismos de condução, de modo que a resposta destes pares a um campo elétrico externo merece especial atenção.

^aM.J. Rice and E.J. Mele, Phys. Rev. Let. 49, 1455 (1982).

PROPRIEDADES ELETROMECAÑICAS EM COMPÓSITOS PU/PZT

SAKAMOTO, W. K.; NAGASHIMA, H. N.

UNESP

LONGO, E.

UFSCAR

Propriedades dielétricas e elásticas de compósitos, por exemplo, epoxi-vidro, tem sido estudado por muitos pesquisadores. Sabe-se, também, que compósitos ferroelétricos apresentam piezoelectricidade. Os compósitos piezoeletricos são materiais hetero-estruturais, compostos de polímero (matriz) e cerâmica piezoeletrica. A inclusão da cerâmica tem permitido combinar a flexibilidade do polímero e a alta atividade piezoeletrica da cerâmica. Neste trabalho compósitos de poliuretana (PU) derivado do éster do ácido ricinoleico e cerâmica de titanato zirconato de chumbo (PZT) foram obtidos na forma de filmes finos e estão sendo caracterizados. Para apresentarem as propriedades piezoeletricas as amostras são polarizadas por um campo de 3,0 KV/mm. Resultados preliminares mostram que o compósito PU/PZT apresenta um coeficiente piezoeletrico de tensão d_{31} da ordem de pC/N. Estudos da dependencia da atividade piezoeletrica com a porcentagem PU/PZT estão sendo realizadas com objetivo de utilizar o compósito como sensor para medidores de umidade de solo.

ESTUDO DAS TRANSIÇÕES DE FASE DIFUSAS EM COPOLÍMEROS P(VDF-TrFE)

MOREIRA, R. L.; PAULA, R. DE; LOBO, S. M.

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais

A transição de fase ferroelétrica dos copolímeros P(VDF-TrFE) foi investigada utilizando técnicas calorimétricas e dielétricas. Como é bem sabido, as fases ferro e paraelétricas destes materiais coexistem em intervalos relativamente largos de temperatura, levando a um arredondamento das anomalias físicas na transição. Assim, nós utilizamos uma generalização do tratamento de Landau-Devonshire para transições difusas, o que nos permitiu uma análise quantitativa do comportamento macroscópico dos polímeros. Em particular, nós pudemos estimar os parâmetros de Landau, a cristalinidade, as polarizações espontâneas e os campos coercivos para copolímeros com 25, 30 e 40 mol% de TrFE. Financiamento: FAPEMIG, CNPq e FINEP.

ESTUDOS POR RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA DA BORRACHA NATURAL DE MANIHOT GLAZIOVII

PELEGRINI, F.

Universidade Federal de Goiás

BARROS, G. G.

Universidade de Brasília

A borracha natural (BN) de Manihot Glaziovii (maniçoba) apresenta a mesma estrutura da BN de Hevea Brasiliensis (seringueira): poli(cis-1-4-isopreno). A massa molecular média varia de 0.6×10^6 a 1.0×10^6 dependendo das condições de envelhecimento. O processo de envelhecimento de elastômeros está associado à produção de radicais livres, formação de hidroperóxidos e consequente decomposição em radicais alcóxidos ($RO\cdot$) e peróxidos (RO_2), alterando assim suas propriedades físico-químicas. Substâncias inorgânicas como íons ou óxidos de metais de transição podem entretanto atuar como catalizadores, retardadores ou inibidores em processos de degradação em sistemas poliméricos. A RPE apresenta-se como uma técnica bastante útil no monitoramento de mecanismos e cinética de polimerização em meios de baixa viscosidade. Em meios de alta viscosidade ou sólidos esta técnica apresenta-se limitada por apresentar aspectos geralmente pouco resolvidos, sendo então utilizada como técnica complementar. Sua utilização todavia tem crescido muito nos últimos anos, principalmente na investigação dos efeitos produzidos por tensões e deformações em espécies elastoméricas. Neste trabalho empregamos a técnica de RPE para identificar os íons de metais de transição existentes na BN de Manihot Glaziovii, bruta e purificada, e os radicais livres produzidos no processo de envelhecimento. Além disto, investigamos também à baixas temperaturas, em termos de RPE, a transição da borracha natural para sua fase vítrea, procurando determinar sua temperatura vítrea T_G .

IMPEDÂNCIA ELETRO-ÓPTICA A.C. APLICADA AO ESTUDO DO ELETROCROMISMO DA POLIANILINA EM DIFERENTES ELETRÓLITOS

TORRESI, S. I. C. DE

DFA/IFGW-UNICAMP.

GOFF, A. H.; TAKENOUTI, H.

UPR15 du CNRS, Physique des Liquides et Electrochimie. Université de Paris VI.

Os polímeros condutores tem tido uma grande importância como materiais eletrocromicos e, entre eles, a polianilina (PANI) tem sido um dos mais estudados. A associação de técnicas espectroscópicas e eletroquímicas permite sugerir um modelo da cinética de inserção de

carga e absorção óptica nestes materiais. A análise das propriedades eletroquímicas em relação com as propriedades ópticas, tem sido feita particularmente no que se refere à reversibilidade e velocidade de coloração / descoloração destes materiais poliméricos quando sujeitos a uma perturbação elétrica. Neste trabalho, analisa-se simultaneamente a resposta em corrente e refletância de um filme de polianilina depositado sobre um eletrodo de platina, quando sujeito a uma perturbação sinusoidal de potencial de pequena amplitude no estado estacionário de coloração. Desta maneira é possível obter simultaneamente a impedância eletroquímica ($\Delta E/\Delta I$) e a impedância eletro-óptica ($k\Delta R/\Delta E$). A relação destes dois parâmetros permite calcular $\Delta R/\Delta Q$, ou seja a eficiência electrocrômica diferencial.

FILMES LANGMUIR-BLODGETT DE POLI(O-FENETIDINA)

RIUL JR, A.; MELLO, S. V.; MATTOSO, L. H. C.; OLIVEIRA JR, O. N.; FARIA, R. M.

Instituto de Física e Química de São Carlos-USP

A técnica de Langmuir-Blodgett (LB) tem se mostrado bastante promissora na aplicação a sistemas poliméricos, em particular polímeros condutores, pois permite a organização e a deposição de monocamadas de macromoléculas orgânicas com alto grau de orientação e ordem sobre substratos sólidos. Isto é de extremo interesse para os polímeros condutores, em particular para as polianilinas cuja condutividade elétrica aumenta significativamente com o grau de ordem estrutural. Neste trabalho, um novo derivado de polianilina, a poli(o-fenetidina), foi sintetizado quimicamente e caracterizado por espectroscopia FT-IR, UV-Vis e voltametria cíclica. Este polímero se destaca pela sua flexibilidade e alta solubilidade em solventes orgânicos de baixo ponto de ebulição, o que facilita a fabricação de filmes de LB. As monocamadas de Langmuir foram obtidas através de soluções do polímero com clorofórmio, em superfície de água ultra pura e caracterizados por medidas de pressão e de potencial de superfície. As isotermas são dependentes do volume da solução espalhada na superfície da água. O colapso ocorre a pressões relativamente baixas, menores que 15mN/m. A formação de agregados provoca considerável histerese nas curvas de pressão e de potencial de superfície, tornando o filme visivelmente azulado após várias compressões. As condições ideais para a deposição dos filmes LB estão sendo investigadas, levando-se em conta os efeitos cinéticos sobre a compressão da monocamada, que tem se mostrado de grande importância.

Preparação e Caracterização de Polímeros (POL, MAT) - 20/05/93

SEMICONDUCTORES ORGÂNICOS COM GAP DE ENERGIA VARIÁVEL

DE-PAOLI, M. A.; MICARONI, L.; MARTINI, M.; ROCCO, A. M.; PERES, R. C. D.; DUEK, E. A. R.

Instituto de Química, Unicamp

GORENSTEIN, A.

IFGW/UNICAMP

Polímeros intrinsecamente condutores, PIC, são materiais orgânicos compostos de cadeias de ligações duplas C=C conjugadas. Aliado à condutividade elétrica, estes materiais apresentam um acentuado efeito electrocrômico e fotoeletroquímico. Os modelos usados para explicar estas propriedades são os mesmos que se usam para semicondutores clássicos, ou seja, o Modelo de Bandas. Estes cálculos teóricos relacionam o estado oxidado dos PIC à formação de estados bipolarons no meio da zona proibida (gap) e o estado reduzido a uma zona proibida de alta energia (ca. 3 a 4 eV). Processos redox químicos ou eletroquímicos são usados para mudar reversivelmente o material de um estado para outro, passando por diversos estados intermediários. Este processo pode ser repetido por até 2 x 10 ciclos no caso do poli(pirrol), por exemplo. Apresentaremos resultados enfatizando o efeito electrocrômico do poli(pirrol)/dodecilsulfato e do copolímero de enxertia de poli(anilina) e borracha nitrilica. O primeiro é um PIC com propriedades mecânicas semelhantes às do poli(estireno) e o segundo é um material elastomérico condutor e electrocrômico. Além disso, descreveremos resultados de medidas do efeito fotoeletroquímico com poli(3-metil-tiofeno) e poli(anilina).

Agradecimentos: FAPESP, FINEP e CNPQ.

ESTUDO DAS PROPRIEDADES ELÉTRICAS DE COMPÓSITOS POLIURETANO/POLIANILINA

AKCELRUD, L.

Escola de Química-UFRJ

GONÇALVES, D.; BULHÕES, L. O. S.

Departamento de Química-UFSCar

FARIA, R. M.

Instituto de Física e Química de São Carlos-USP

Foram preparados diferentes filmes de poliuretano (PU) pela técnica de pré-polímero variando-se sistematicamente o teor de segmento rígido da cadeia de poliuretano. Esses filmes foram utilizados como matriz na polimerização "in situ" da anilina com agente oxidante em meio ácido, sendo obtidos filmes tipo compósito posteriormente dopados em solução de HCl 1,0 M. Por

meio de medidas espectroscópicas na região do visível, observou-se variações de cor reversíveis e estáveis dos filmes compostos após processos de protonação e desprotonação, típicas de reações redox das polianilinas. A caracterização ótica dos filmes produzidos indicaram um aumento na condutividade elétrica, o que foi confirmado em medidas de condutividade dc. A condutividade de um filme composto aumentou em mais de quatro ordens de grandeza quando submetida a tratamento em solução ácida por aproximadamente seis horas.

PREPARAÇÃO DE FILMES DE LANGMUIR DE POLÍMEROS CONDUTORES COM NATUREZA MISTA

SANTOS, C. G. DOS; MELO, C. P. DE

Departamento de Física - UFPE

MAIOR, R. S.

Departamento de Química Fundamental - UFPE

Neste trabalho são discutidas as condições de preparação de filmes de Langmuir correspondentes à deposição de misturas em diferentes concentrações relativas de derivados alquilados do pirrol e do tiofeno. As isotermas correspondentes aos diferentes processos de compressão são examinadas como critério para a comparação da estabilidade das diferentes estruturas formadas. Tanto a deposição direta de misturas dos monômeros quanto de co-polímeros, assim como a polimerização in situ após a deposição foram investigadas. Como regra geral foi observado que a estabilidade do filme obtido cresce com o aumento da concentração relativa do derivado de pirrol na mistura.

(Apoio: FINEP, CNPq, RHA/E e FACEPE)

CARACTERIZAÇÃO DA DOPAGEM ELETROQUÍMICA DE FILMES DE POLIANILINA COM MICROBALANÇA A CRISTAL DE QUARTZO.

TORRESI, R. M.; TORRESI, S. I. C. DE

IFGW/DFA-UNICAMP.

GABRIELLI, C.; KEDDAM, M.; TAKENOUTI, H.

UPR15 du CNRS. Physique des Liquides et Electrochimie. Université de Paris VI.

A microbalança a cristal de quartzo apresenta-se como uma excelente ferramenta no estudo de intercâmbio de íons e moléculas de solvente nos processos redox que ocorrem nos polímeros condutores. A polianilina (PANI) é um dos materiais mais estudados no que concerne os polímeros condutores e diferentes autores estão de acordo sobre o fato que os processos de oxidação/redução do polímero, produz o intercâmbio de ânions e cátions entre o filme polimérico e o eletrólito, para manter a eletroneutralidade. No presente trabalho este intercâmbio iônico é estudado em detalhe fazendo uso da técnica da microbalança a cristal de quartzo

combinada com técnicas eletroquímicas clássicas como voltametria cíclica. Analisa-se a influência de diferentes parâmetros como velocidade de varredura, espessura do filme polimérico e composição do eletrólito sobre o balanço iônico dentro do filme no intervalo de potencial de -0.25 até 0.5V (SCE). Esta análise é feita calculando-se a contribuição relativa dos ânions e cátions a eletroneutralidade a partir dos dados de microbalança e carga elétrica envolvida nos processos redox. Os resultados mostram que o transporte de prótons é predominante no começo dos processos de oxidação ou redução além de uma cinética mais rápida na incorporação de prótons em comparação à de expulsão de ânions, evidenciada nos experimentos a diferentes velocidades de varredura. Por outro lado, dados obtidos com diferentes eletrólitos mostram que a natureza do ânion só afeta o processo de redução onde a quantidade de ânions expulsos é maior quanto menor é a relação carga/tamanho dos mesmos. Além disso, o transporte de ânions é mais importante quando a espessura do filme polimérico é maior, o que daria sítios preferenciais na cadeia polimérica dependendo da morfologia do filme.

Moléculas Modelo Para o Estudo de Estrutura Eletrônica de Polímeros: Poliacetileno, Polimetilmetacrilato e Poli(3hexil)tiofeno

CORREIA, N.

UnB

BRITO, A. N. DE

MAX-LAB, Lund - Suécia

SVENSSON, S.

Uppsala University, Uppsala - Suécia

Apresenta-se três casos estudo de propriedades espectrais de polímeros acessadas a partir da análise de espectros correspondentes de moléculas modelo. O espectro de fotoemissão de caroço (XPS) C1s e O1s de polimetilmetacrilato (PMMA), utilizado para caracterização da pureza do material, foi analisado a partir dos espectros de metilisobutirato, metilmetacrilato, metilacrilato, ácido acrílico, ácido acético e ácido fórmico.* Mostra-se que a forma da banda correspondente a fotoemissão de C1s em PMMA não obedece a uma relação estequiométrica devido a diferentes contribuições ao espectro shake-up provenientes de sítios atômicos distintos.

Um comportamento oscilatório foi predito para o shift químico da linha C1s de poliacetileno (PA) a partir da análise dos espectros correspondentes de eteno, butadieno e hexatrieno**, onde é possível uma deconvolução das linhas provenientes dos distintos carbonos.

Poli(3hexil)tiofeno (P3HT) apresenta um termocrocismo reversível. Este fenômeno foi explicado a partir da quebra de planaridade entre anéis tiofênicos adjacentes***. A comparação do espectro shake-up das moléculas de tiofeno e bitiofeno com os correspondentes espectros de P3HT a diferentes temperaturas mostra

um aumento de intensidade e o deslocamento da primeira banda shake-up, que corresponde a localização e a quebra de conjugação do sistema eletrônico π .

* A. Naves de Brito, M. P. Keane, N. Correia, S. Svensson, U. Gelius and B. J. Lindberg. *Surface and Interface Analysis* 17, 94(1991).

B. Sjögren, A. Naves de Brito, N. Correia, S. Lunell, B. Wambberg, U. Gelius and S. Svensson. *J. Electr. Spectrosc.* 59, 000(1992).

** A. Naves de Brito, S. Svensson, M. P. Keane, H. Ågren, N. Correia. *Europhysics Letters*, 00, 000(1992).

*** M. P. Keane, S. Svensson, A. Naves de Brito, N. Correia, S. Lunell, B. Sjögren, O. Inganäs e W. R. Salaneck, *J. Chem. Phys.* 93, 6357 (1990).

POLARONS E EFEITOS DE CORRELAÇÃO EM PASTILHAS DE P3MT DOPADAS COM ClO_4^- OBSERVADOS EM MEDIDAS DE EPR.

PAWLICKA, A.; NASCIMENTO, O. R.; FARIA, R. M.

Instituto de Física e Química de São Carlos-USP

PEREIRA, E. C.; BULHÕES, L. O. S.

Departamento de Química-UFSCar

WALMSLEY, L.

Departamento de Física-UNESP-Rio Claro

Medidas de ressonância eletrônica paramagnética (EPR) em pastilhas prensadas de P3MT dopadas com ClO_4^- , mostraram uma linha dysoniana cuja variação com a temperatura apresentou dependência com a taxa de resfriamento. Em torno de 150 K, o sinal de EPR mostrou ser nitidamente uma superposição de duas linhas, uma estreita e mais intensa, e outra mais larga. Fixando-se a temperatura a 220 K, observou-se um alargamento da linha no tempo sem que a assimetria do sinal se alterasse. A 110 K, aumentando-se a potência da microonda, verificou-se que o sinal atinge a saturação. A análise cuidadosa dos resultados indica que existe contribuições de Pauli e de Curie na susceptibilidade magnética do material abaixo de 220 K. Em torno dessa temperatura deve ocorrer uma alteração na configuração eletrônica das moléculas, que interpretamos ser uma transição devido a dimerização de uma rede polarônica induzida por correlações elétron-elétron.

Estudo Teórico de Polímeros (POL) – 21/05/93

Competition Between Spin, Charge and Bond Waves in a Peierls-Hubbard Model

VENEGAS, P. A.

Departamento de Física, UNESP-Campus Bauru

HENRÍQUEZ, C.

Comisión Chilena de Energía Nuclear, Santiago-Chile

RÖSSLER, J.

Dpto. de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago-Chile

We study a one-dimensional extended Peierls-Hubbard model with intra-cell and first neighbour Coulomb repulsion for the half-filled band. Two types of phonons are coupled to the electronic system: intramolecular and longitudinal inter-cell vibrations. We consider the phononic variables in the adiabatic limit, and use the Hartree-Fock approximation for electrons.

Our model shows a discontinuous boundary between static spin and charge waves phases, while the transition from a bond wave to a spin or charge wave phase is continuous. In the last case the system crosses from one phase to another through an intermediate phase that lacks of inversion symmetry. These phase transitions can be brought about by changes in temperature or internal system parameters.

FERRIMAGNETISMO E TRANSIÇÃO METAL-ISOLANTE EM CADEIAS POLIMÉRICAS

COUTINHO-FILHO, M. D.

Departamento de Física - UFPE

SANTOS, M. C. DOS

Inst. Física Gleb Wataghin, UNICAMP

A solução Hartree-Fock do Modelo de Hubbard em uma cadeia losangular é apresentada com intuito de descrever um possível estado fundamental ferromagnético não-saturado em cadeias poliméricas. Na aproximação *tight-binding* a característica peculiar do modelo é a presença de duas bandas dispersivas e uma banda localizada central contendo 1/3 dos estados de uma partícula. Resultados do potencial químico, magnetização e energia total do sistema em função do número médio de elétrons por sítio e dos parâmetros do modelo são apresentados. Verifica-se que o sistema é ferrimagnético para densidades eletrônicas próximas do valor de banda semi-cheia, $n = 1$, situação em que o sistema exhibe uma transição metal isolante para qualquer valor de repulsão Coulombiana intra-sítio. Mostra-se também que, quando o nível localizado não está semi-cheio e completamente polarizado, o sistema exhibe separação

de fases ou uma estrutura magnética mais complexa. Para densidades suficientemente distantes de $n = 1$ o sistema é paramagnético como usualmente encontrado em cadeias unidimensionais.

IMPUREZAS MAGNÉTICAS EM CADEIAS POLIMÉRICAS

AZEVEDO, S. A. F.; CARMO JR, C. DO;
COUTINHO-FILHO, M. D.; MELO, C. P. DE
Departamento de Física - UFPE

Os efeitos de polarização de spin em uma cadeia polimérica do tipo $(AB)_2$ são examinados através do uso de matrizes transferência para a função de Green, dentro de aproximação do hamiltoniano Hubbard diagonal. A técnica é especialmente conveniente para o caso em que uma impureza substitucional é introduzida na cadeia, quando a modificação localizada na polarização do sistema (tipo uma onda amortecida de densidade de spin) pode ser calculada. O mapeamento dos efeitos correspondentes como função das intensidades relativas dos termos de repulsão coulombiana intra-sítios é efetuado, bem como são discutidas as possíveis implicações para a interação mútua entre impurezas.

(Apoio: FINEP, CNPq)

INSULATOR-METAL TRANSITION ON POLYTHIOPHENE

LAVARDA, F. C.
Universidade Estadual Paulista - Bauria
SANTOS, M. C. DOS; GALVÃO, D. S.; LAKS, B.
Universidade Estadual de Campinas

Polythiophene and their derivatives are materials that present remarkable increase of electrical conductivity upon doping. In the highly doped regime, the optical absorption, thermopower and magnetic susceptibility show metallic behavior. However, a non linear evolution of the magnetic susceptibility as a function of the doping concentration is observed, and there is a critical concentration above which the samples switch from the insulating to the metallic state. In the present work, the electronic structure of polythiophene at several doping levels is investigated by the use of Hückel Hamiltonian with σ bond compressibility. Excess charges are assumed to be stored in conformational defects of bipolaron type. The Hamiltonian matrix elements representative of a bipolaron are obtained from a previous thiophene oligomer calculation, and then transferred to an infinite chain. Negative Factor Counting and Inverse Iteration techniques have been used to evaluate densities of states and wave functions, respectively. Several types of defect distributions were analysed. Our results are consistent with the following: i) the bipolaron lattice doesn't present a finite density of states at the Fermi level at any doping level; ii) bipolaron islands

show a insulator-metal transition at 8 mol% doping level; ii) segregational disorder show a insulator-metal transition to doping levels ranging from 20 to 30 mol%.

Dinâmica de Sólitos e Interações entre Cadeias em Poliacetileno.

MAGELA E SILVA, G.
UnB

Aspectos dinâmicos da condução entre cadeias de poliacetileno são estudados. Isto é feito através de uma expansão do modelo SSH^a, onde acrescentamos termos de troca entre sítios localizados em cadeias vizinhas, um campo elétrico externo agindo sobre o sistema e termos descrevendo os átomos dopantes. Realizamos cálculos onde as interações entre as cadeias e suas excitações não-lineares são tratadas de maneira dinâmica, com a integração numérica do sistema auto-consistente das equações de movimento que descrevem a evolução temporal do sistema eletrônico e de fônons. ^b Obtemos resultados relacionando a mobilidade/confinamento de sólitos com a transferência de carga entre cadeias vizinhas e também mostramos como a propagação de sólitos em cadeias que interagem entre si é possível como um fenômeno coletivo, envolvendo dois ou mais sólitos. Esta propagação ocorre com uma oscilação característica podendo estar relacionada com o espectro de infravermelho do material.

^aW.P. Su, J.R. Schrieffer and A.J. Heeger, Phys. Rev. B 22, 2099 (1980); 28, 1138(E) (1983).

^bG.M. e Silva and A. Terai, Phys. Rev. B a ser publicado.

POLARIZABILIDADES ELÉTRICAS DE CADEIAS POLIMÉRICAS LONGAS

FONSECA, T. L.; GALVÃO, L.; MELO, C. P. DE
Departamento de Física - UFPE
KIRTMAN, B.

Department of Chemistry, University of California, Santa Barbara, CA, USA

O problema da polarizabilidade elétrica de cadeias conjugadas longas é examinado através do método do campo finito. Para isso as cadeias são consideradas como constituídas por segmentos terminais curtos (onde ocorre a acumulação de carga polarizada) ligados a um longo segmento central que pode ser tomado como invariante. O uso da técnica de matrizes transferência, com as apropriadas condições de contorno, permite então o cálculo tanto das densidades locais de estado quanto das cargas por sítio e por cela unitária. Finalmente, a energia do sistema como função da intensidade do campo externo aplicado pode ser calculada o que nos deverá fornecer as diversas componentes do tensor de polarização.

(Apoio: FINEP, CNPq e RHAEE)

Propriedades de Transporte (POL) – 21/05/93

CONDUTIVIDADE GIGAHERTZ E DC DE PASTILHAS DE POLI(3-METILTIOFENO) DOPADAS COM ClO_4^- OBTIDAS POR MEIO DE MEDIDAS DE EPR.

PAWLICKA, A.; NASCIMENTO, O. R.; FARIA, R. M.

Instituto de Física e Química de São Carlos-USP

PEREIRA, E. C.; BULHÕES, L. O. DE S.

Departamento de Química-UFSCar

WALMSLEY, L.

Departamento de Física-UNESP-Rio Claro

Medidas de ressonância eletrônica magnética (EPR) com pastilhas prensadas de pó de poli(3-metiltiofeno) (P3MT), dopados com ClO_4^- , mostraram uma distorção na linha da derivada da absorção da microonda. Estudando essa distorção, caracterizada pela razão A/B (A e B sendo as amplitudes máximas da linha), Dyson elaborou um modelo teórico envolvendo a penetração da microonda na amostra (skin-depth). Este modelo, denominado Condução por Ressonância Magnética, permite calcular a condutividade gigahertz do material. Realizamos medidas EPR para três frequências diferentes de microonda: 1,29 GHz (banda-L), 9,52 GHz (banda-X) e 34,72 GHz (banda-Q). As condutividades AC foram três ordens de grandeza maiores que as condutividades DC, atingindo valores em torno de 20 S/cm. Medidas de condutividade em função da temperatura, de nitrogênio líquido à ambiente, foram feitas em banda-X, e um pico bem acentuado foi observado próximo a 220 K. A curva de condutividade DC também mostrou uma inflexão em torno desta temperatura, dando indícios de que acontece uma alteração no mecanismo de condução ao longo da amostra.

Caracterização do Poli(Sulfeto de p-Fenileno) por Correntes Termo-Estimuladas de Polarização e Depolarização*

WANG, M. S. E.; CAMPOS, M. S. DE

Universidade de São Paulo, São Carlos

Foram realizadas medidas de Corrente termo-estimuladas, tanto de polarização, como de despolarização em amostras amorfas de Poli(Sulfeto de p-Fenileno) (PPS). O polímero na forma de pó, com o nome comercial de Ryton, foi compactado e sob pressão fundido a uma temperatura da ordem de 300°C, quando então foi reofriado rapidamente. Dessa forma foram obtidas amostras amorfas com área da ordem de 4.0 cm² e espessuras que variam entre 20 e 50 μm. Contatos de ouro ou índio, foram depositados por evaporação no vácuo, nas duas faces das amostras. Para a realização das medidas de corrente termo-estimuladas, foi aplicado um campo

DC nas amostras a temperatura ambiente. Após a aplicação do campo, foram adotados dois procedimentos: a amostra era aquecida com o campo aplicado até clico de 250°C, ou era aquecida sem campo até 250°C, quando então era aplicado o campo, a amostra resfriada até temperatura ambiente com campo e a corrente medida no reaquecimento sem campo. Todas as medidas foram realizadas com uma razão de aquecimento constante de 2°/min, com esse procedimento foram observados cinco picos de corrente, cujos máximos ocorreram nas temperaturas de 42, 92, 122, 164 e 193 °C. Essas medidas foram complementadas com a técnica de Calorimetria Diferencial (DSC). A origem de cada um dos picos será discutida em detalhes.

*Trabalho realizado com patrocínio financeiro da CNPq (RHA/E) e FAPESP.

CONDUTIVIDADE INDUZIDA NAS FASES FERRO E PARAELETRICA DOS COPOLÍMEROS P(VDF/TrFE) DE RAZÕES MOLARES 60:40 E 70:30.

CUNHA, H. N. DA

Departamento de Física-CCN-UFPI

FARIA, R. M.

Instituto de Física e Química de São Carlos-USP

O comportamento da evolução temporal da condutividade induzida por radiação ionizante (RIC) em filmes poliméricos é um assunto pouco explorado, a despeito de ser uma técnica que pode fornecer muitas informações a cerca dos mecanismos de condução nesses materiais, e correlacioná-los à sua estrutura. Nesse sentido realizamos uma série de medidas de condutividade induzida, com radiação X, em copolímeros P(VDF/TrFE) de razões molares 60(VDF):40(TrFE) e 70:30, os quais sofrem transição de fase estrutural ferro-paraelétrica em 80 e 105 K, respectivamente. Observamos que a condutividade induzida no copolímero, quando em sua fase ferroelétrica, cresce quase linearmente com o tempo para taxa de dose de radiação constante, em torno de 2 Gy/s; e tende à um valor constante quando o polímero se encontra na fase paraelétrica. O comportamento da RIC mostrou forte dependência nas condições ambientais em que foram realizadas as medidas - vácuo, umidade, temperatura. Modelos simplificados de cinética de geração/recombinação e captura/excitação de portadores, têm sido ajustados aos resultados experimentais.

MEDIDAS DE TRANSPORTE EM FILMES DE POLÍMEROS CONDUTORES

SANTOS, F. L. DOS; MELO, C. P. DE

Departamento de Física - UFPE

Neste trabalho são apresentados resultados da investigação do comportamento da resistividade elétrica de

filmes de polipirrol e de politiofeno como função de temperatura, e se discute a interpretação teórica desses resultados à luz dos modelos usuais para o transporte de carga em sistemas desordenados. A resistividade *d.c.* desses materiais é medida tanto pela técnica usual de Van der Pauw quanto por uma adaptação da técnica de Montgomery para a determinação do fator de anisotro-

pia do tensor resistividade. Os resultados obtidos até o momento indicam ser difícil uma distinção conclusiva entre os diferentes mecanismos possíveis.

(Apoio: FINEP, CNPq e CAPES)

RESSONÂNCIA MAGNÉTICA

Experimentos de NMR e NQR (RES)

– 19/05/93

ESPECTROMETRO DE RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR CON CICLAJE RAPIDO DEL CAMPO MAGNETICO*

ANOARDO***, E.; PUSIOL**, D. J.; ROMERO***, E.; MARQUÉS**, C.

FAMAF, Universidad Nacional de Córdoba

Se presenta el diseño y construcción de un espectrómetro de Resonancia Magnética Nuclear con ciclaje rápido del campo magnético -FFCNMR-. El imán fue construido por medio de diez cilindros de cobre concéntricos, cortados adecuadamente para lograr la mejor homogeneidad en el campo magnético con la menor inductancia posible. Por el solenoide circulan 90 A para dar un campo máximo de 0.5 T. El campo puede desaparecer totalmente del interior del solenoide en menos de 1 ms, y volver a conectarse en 1.2 ms -con la ayuda de un sistema de almacenamiento de la energía-. La homogeneidad y estabilidad del campo son compatibles para experimentos de RMN de línea ancha en todo el rango de campos intermedios entre $5 \cdot 10^{-1}$ a $5 \cdot 10^{-6}$ T. Un sistema de MOSFETs de potencia regula la corriente, tanto en campos altos como bajos. En la memoria de un computador PC se almacena la evolución temporal del campo magnético, la información pasa al circuito de control del campo PID a través de un conversor D/A de 16 bits, con velocidad de conversión programable desde un microcontrolador.

* Trabajo parcialmente financiado por CONICET, CONICOR y Fundación Antorchas de Argentina y Fundación A. von Humboldt de Alemania. ** Miembro de la Carrera del Investigador del CONICET. *** Becario del CONICOR, Córdoba.

RESSONÂNCIA DE QUADRUPOLO NUCLEAR PURA EM AMOSTRAS DE PÓ CRISTALINO DE As_2O_3

RABBANI, S. R.; SANTOS, J. G. DOS; PONTUSCHKA, W. M.; HUSSEIM, M.

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

PUSIOL, D. J.

FAMAF, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina

Apesar da importância e facilidade de observar as linhas de RQN de ^{75}As , este assunto ainda foi pouco estudado. Nos poucos trabalhos apresentados as amostras apresentam-se em forma de pó cristalino obtido comercialmente. Neste trabalho, as medidas de RQN pulsada, à temperatura ambiente, foram efetuadas em amostras de arsenolita em pó comercial (p.a.) e policristalina preparada por recristalização em solução aquosa. A micrografia eletrônica obtida com o pó comercial revelou três tipos de camadas formadas durante o processamento industrial que contribuiu para a introdução de defeitos. As diferenças verificadas na intensidade e forma de linha nas amostras estudadas são discutidas.

LA RESONANCIA CUADRUPOLO NUCLEAR EN LA INVESTIGACION DE SOLIDOS MOLECULARES

BRUNETTI, A. H.

FAMAF, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina

La Resonancia Cuadripolar Nuclear (R.C.N.) ha mostrado ser una técnica muy eficaz para el estudio de sólidos, ya que el núcleo es usado como un sensor muy sensible para investigar localmente efectos estáticos y dinámicos de la red cristalina. En el caso de los cristales moleculares, puede servir también para el estudio de algunas ligaduras intramoleculares y como son afectadas por el potencial cristalino. Se muestra estudios efectuados en Córdoba en varios casos de sólidos moleculares donde la molécula deja de ser rígida, comparada con los efectos de empaquetamiento cristalino, dando origen a modos semi-externos, a fases incommensuradas y a desorden orientacional. Se hicieron mediciones del tiempo de relajación nuclear spin-red, spin-spin, frecuencia de resonancia y forma de línea en películas delgadas de paraclorobenceno y de cloroformo sobre silicato de magnesio. Se presenta una discusión y posibles explicaciones de los resultados. (A.H.B.) - Carrera del Investigador Científico, CONICET (Argentina)

DINÂMICA E MOBILIDADE ATÔMICA EM *LiNbO₃* SUBMETIDO A TROCA POR PRÓTONS

NASCIMENTO, G. C. DO; PACOBAHYBA, L. H.;
ENGELSBURG, M.; SOUZA, R. E. DE
Departamento de Física - UFPE

LiNbO₃ submetido a troca por prótons (Próton-exchanged ou PE) é vastamente utilizado na fabricação de guias de onda ópticos pela sua propriedade de guiar apenas a luz polarizada paralelamente a direção do índice de refração extraordinário do cristal de *LiNbO₃*. O tratamento de PE induz um aumento considerável no índice de refração extraordinário e uma diminuição do índice ordinário existindo várias conjecturas sobre a origem microscópica da mudança anisotrópica no índice de refração. Utilizamos a RMN do hidrogênio e sua dependência com a temperatura em PE *LiNbO₃*, para sondar a dinâmica dos prótons na rede e suas possíveis implicações em relação aos modelos microscópicos propostos.

ESTUDIO DE MICROCRISTALES DE *As₂O₃* POR MEDIO DE LA RCN DEL ⁷⁵As

WOLFENSON, A. E.
FAMAF, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina
RABBANI, S. R.; CUSTÓDIO, M. C.; OLIVEIRA, M.
I. T. DE
Instituto de Física, Universidade de São Paulo

En microcristales de *As₂O₃* (muestra con alta relación superficie- volumen) se estudian los efectos de la superficie sobre los parámetros de la Resonancia Cuadrupolar Nuclear (RCN) (p.e: frecuencia de resonancia cuadrupolar, tiempo de relajación spin-red y largo de la línea de resonancia). La muestra se preparó evaporando 90 mg de *As₂O₃* de alta pureza sobre 10^{17} esferas de *SiO₂* de 70 Å de diámetro (lo cual representa una superficie de aproximadamente $18 m^2$). La muestra así obtenida es sometida a un re- cocido en alto vacio con el propósito de asegurar la homogeneidad de la misma. La elección de *As₂O₃* como elemento de estudio se debe a que con pequeñas cantidades se obtiene una señal de la RCN del ⁷⁵As con una buena relación señal-ruído. Además los estudios previos realizados sobre la RCN de cristales de *As₂O₃* en las diversas estructuras que presenta permite caracterizar estructuralmente la superficie de la muestra a partir de los cambios observados en los parámetros de la RCN.

Aplicações de Ressonância Magnética (RES) - 20/05/93

RESONÂNCIA FERROMAGNÉTICA CONVENCIONAL (RFM) E FOTOTERMICAMENTE MODULADA (RFM-FM) EM AMOSTRAS NA FORMA DE PÓ

MEDINA NETO, A.; GANDRA, F. G.; ROMANO, J.
A.; CORTEZ, A. C. R. DA M.; SILVA, E. C.;
GALEMBECK, F.; VARGAS, H.
Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)
NIKITOV, S. A.
Institute of Radio Engineering and Electronics

Neste trabalho apresentamos resultados da magnetização ", da ressonância ferromagnética convencional (RFM) e da ressonância ferromagnética fototermicamente modulada (RFM-FM) para amostras de *Nd₂Fe₁₇* ", cuja temperatura de Curie é cerca de 57 - oC. A técnica da RFM-FM é baseada na absorção de microondas num processo dependente da temperatura ", e distingue-se das outras técnicas baseadas em ondas térmicas pela sua alta sensibilidade. A RFM-FM pode fornecer também uma resolução espacial desta absorção ", embora não utilizemos esta característica neste trabalho. A amplitude do sinal da RFM-FM é proporcional ao valor da derivada da susceptibilidade em relação à temperatura. São apresentados cálculos para amplitude do sinal da ressonância ferromagnética ", considerando a magnetização em regime não saturado ", e um modelo teórico é discutido para descrever os espectros da RFM e da RFM-FM deste material na forma de pó prensado ", não-orientado, obtendo-se uma boa concordância entre os espectros experimentais e os calculados teoricamente. Valores numéricos da magnetização ", bem como os valores do campo de ressonância e largura de linha dos experimentos de RFM ", são utilizados para o cálculo da amplitude do sinal da RFM-FM.

Interpretação de medidas de EPR em PbTe:RE (RE = Er³⁺, Dy³⁺ e Yb³⁺).

GENNARO, A. M.; MARTINS, G. B.; RETTORI, C.;
BARBERIS, G. E.
UNICAMP
AN, C. Y.
INPE

Apresentamos resultados e interpretação de medidas de EPR no semicondutor de gap estreito PbTe dopado com terras raras (Er³⁺, Dy³⁺ e Yb³⁺). Er³⁺ apresenta um quarteto Γ_8 como estado fundamental. Dy³⁺ e Yb³⁺ apresentam como estado fundamental um duplete Γ_6 .

Nos foi possível verificar nas medidas com Er^{3+} e Dy^{3+} a presença de sítios com simetria axial. A anisotropia de g para Dy^{3+} foi interpretada com base na presença destes sítios. Estamos na fase final dos cálculos teóricos e fitagens e já podemos atribuir a presença destes sítios a vacâncias de chumbo. Consideramos como resultado inédito a enorme anisotropia de g obtida para o Dy^{3+} . Tal anisotropia não tem como origem a mistura via campo magnético com Γ_8 excitado. A mistura é feita através da interação spin-rede que tem origem nas deformações causadas pelas vacâncias de chumbo.

ESTUDO DOS MECANISMOS TL DO $CaSO_4:DY$

MAURICIO, C. L. P.

Instituto de Radioproteção e Dosimetria (IRD/CNEN)

ONORI, S.

Istituto Superiore di Sanità

Sulfato de Calcio dopado com terras raras, principalmente Dy é muito usado como dosímetro termoluminescente (TL) para a monitoração individual e ambiental, entretanto os mecanismos TL continuam pouco conhecidos. A ressonância de spin eletrônico (ESR) é uma técnica bastante poderosa para caracterização de centros paramagnéticos presentes em materiais expostos à radiação. O dosímetro termoluminescente de $CaSO_4:Dy$ produzido pelo Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN-CNEN/SP), São Paulo, Brasil, foi analisado pela técnica de ressonância paramagnética eletrônica. O dosímetro TL é produzido comercialmente na forma de pastilhas (chips) de 3mm de diâmetro e 1mm de espessura, sinterizados com Teflon. Os dosímetros foram irradiados em uma célula gama com doses entre 10 e 60.000Gy com uma taxa de dose de cerca de 0,3 Gy/s. O espectro ESR, à temperatura ambiente, dos chips irradiados é complexo e apresenta um sinal largo e intenso devido ao teflon. O espectro de dose zero não apresenta sinal. De 100 até 60.000Gy, o espectro ESR apresenta a mesma forma, mas as amplitudes variam com a dose. Para melhor avaliar as propriedades do $CaSO_4:Dy$, foram feitas medidas com pó sem Teflon. O espectro apresenta, então, 2 sinais distintos (A e B). Estes sinais se apresentam na forma de tripletos estreitos e com grande desvanecimento à temperatura ambiente. Por volta de 150C, os sinais A e B desaparecem completamente e começa a surgir um novo sinal (C), que deve estar relacionado a região do pico dosimétrico, pois desvanece próximo de 350C. Os tripletos A e B devem estar relacionados aos radicais SO_4 e SO_3 e devem ser responsáveis pelos picos de baixa temperatura da curva de emissão do $CaSO_4:Dy$. O sinal C ainda não está bem identificado.

RPE DE ÍONS Er^{3+} EM MONOCRISTAIS

DE $Ca_3Ga_2Ge_3O_{12}$.

MORAES, I. J.

Departamento de Física - IMF - UFG

SOUZA, R. R. DE; TERRILE, M. C.

Departamento de Física e Ciências dos Materiais - IFQSC - USP

Garnets com impurezas de elementos de transição são bastante utilizados como meio ativo em LASERS. Há interesse em determinar os sítios ocupados pelos dopantes e as interações que afetam suas propriedades. Estudamos monocristais de $Ca_3Ga_2Ge_3O_{12}$ dopados com Er^{3+} e $Er^{3+} - Cr^{3+}$ usando espectroscopia de RPE, no intervalo de temperatura de 4,2 K a 60 K. Apresentamos aqui os resultados para o íon Er^{3+} (visível a baixas temperaturas), sendo que a ressonância do íon Cr^{3+} já foi discutida em reuniões anteriores. Analisamos a variação angular dos espectros com o campo magnético no plano (110). Um grupo de três linhas mostra claramente o comportamento esperado para sítios dodecaédricos, que são habitualmente ocupados pelo íon Er^{3+} substituindo o Ca^{2+} . Determinamos os valores dos parâmetros: $g_1 = 4,504 \pm 0,005$, $g_2 = 2,902 \pm 0,005$ e $g_3 = 2,454 \pm 0,005$, e estes resultados são coerentes com a simetria D_2 destes sítios. Outras linhas aparecem simultaneamente possivelmente provenientes de íons Er^{3+} ocupando sítios diferentes. Na amostra mais concentrada as ressonâncias colapsam em duas, devido a interação de troca $Er^{3+} - Er^{3+}$.

DEPENDÊNCIA COM CAMPO MAGNÉTICO DA ABSORÇÃO DE Cr^{3+} EM $GdAlO_3$

BASSO, H. C.; CRUZ, G. K.; CARVALHO, R. A.;

RUFFINO, M.; TERRILE, M. C.

Instituto de Física e Química de São Carlos

As propriedades óticas do íon Cr^{3+} em $GdAlO_3$ (antiferro magnético com $T_N = 3.89K$), dependem fortemente da presença de um campo magnético externo. Este fato foi mostrado e analisado em trabalhos anteriores sobre a emissão desse material(1). A transição responsável pela emissão é ${}^2E - {}^4A_2$. Neste trabalho apresentamos os resultados obtidos para a absorção correspondente à mesma transição. O sistema de medida é descrito separadamente. Trabalhamos à temperatura de 1.9K, ou seja abaixo da temperatura de transição magnética, e num campo de até 5T. Efetuamos as experiências orientando o campo externo em direções paralelas a cada um dos eixos do cristal, e em cada caso com polarização paralela aos eixos A ou B do cristal, que é birrefringente. Verificamos novamente que a probabilidade de transição diminui, de forma geral, com o campo aplicado. Porém a forma detalhada dessa dependência é inesperadamente complexa. (1)Helman J.S. at al.

Phys. Rev. B 44,6878(1991)

**APLICAÇÃO DE IMAGENS POR
TOMOGRAFIA DE RMN E RAIOS X NA
CARACTERIZAÇÃO DO FENÔMENO
"FINGERING" EM UM MEIO POROSO***

DURAND, A. P.; TANNUS, A.; PANEPUCCI, H. C.

U.S.P. - Inst. Fis. Qui. S. Carlos

CRESTANA, S.

Embrapa - Nuc. Pesq. Des. Inst. Agropecuária

As tomografias de ressonância magnética nuclear e de raios X, principalmente devido às suas características de produzirem imagens não-invasivas do interior de objetos, emergem como de grande potencial no acompanhamento, in situ, de processos de transporte de líquidos no interior de meios porosos. No presente trabalho, a aplicação da técnica de RMN ao estudo em 2-D e 3-D do fenômeno "fingering" em um meio poroso estratificado é mostrado. Para tal fim, foram realizados, em laboratório, experimentos de infiltração de água em uma coluna cúbica de $15 \times 15 \times 15 \text{ cm}^3$, contendo duas camadas de areia de diferentes texturas, simulando um solo estratificado. Um fluxo contínuo de água de 700ml foi aplicado durante 2.5 minutos na superfície da coluna. Assim que o fluxo atingiu o regime estacionário de infiltração, a coluna foi colocada no interior das bobinas do eletroímã do tomógrafo de RMN de 500 Gauss, localizado em São Carlos-SP, no IFQSC-USP. Várias imagens tomográficas foram obtidas dos planos: coronal, transversal e sagital da coluna. Para cada situação foram coletadas sete fatias de 1.8cm de espessura, espaçadas 2mm uma da outra. O tempo empregado para a coleta do conjunto de 7 fatias foi de 4 minutos. Paralelamente, foram realizadas experimentos por tomografia de raios X, no Hospital das Clínicas da UNICAMP. Várias imagens foram coletadas de fatias transversais de 1.5mm de espessura, com duração menor do que 20s cada uma, permitindo seguir a dinâmica do fluxo. Até a presente fase de estudo, é possível afirmar que a associação das duas modalidades de tomografia viabilizam observar e quantificar experimentalmente, desde o início até o final do processo, a formação de "fingers" em uma coluna contendo um meio poroso estratificado. Será apresentada uma discussão de prós e contras de cada uma das duas técnicas tomográficas empregadas.

* Este trabalho conta com o apoio do projeto temático FAPESP 90/3773-7

**Ressonância Magnética (RES) -
20/05/93**

**Um algoritmo para a representação matricial
do hamiltoniano efetivo de spin.**

GONÇALVES, W. M.; PONTUSCHKA, W. M.;

SARTORELLI, J. C.

IFUSP

A obtenção dos níveis de energia dados pelo hamiltoniano efetivo de spin:

$$\mathcal{H} = \beta \mathbf{H} \cdot \mathbf{g} \cdot \mathbf{S} + \mathbf{S} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{S} + \mathbf{S} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{I} \quad (1)$$

requer o cálculo algébrico de $N(N+1)/2$ (onde $N=(2S+1)(2I+1)$) elementos de matriz.

Como a dificuldade deste método aumenta muito à medida que aumentamos os valores de spin, desenvolvemos um algoritmo para a montagem numérica dos elementos de matriz.

O algoritmo possibilita a representação dos operadores de spin e autoestados através de matrizes auxiliares $N \times 3$, que facilitam o cálculo dos autovalores, autovetores e da probabilidade de transição.

**MODULAÇÃO DA CORRENTE DO
MICROSCÓPIO DE TUNELAMENTO,
INDUZIDA POR UM CENTRO
PARAMAGNÉTICO RESSONANTE NA
SUPERFÍCIE Si/SiO₂.**

MENEZES, R. P.; HELMAN, J. S.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF

Foi observado que a precessão de spins paramagnéticos individuais na superfície de Silício oxidada, quando aplicado um campo magnético constante, causa uma modulação com a frequência de Larmor na corrente do microscópio de tunelamento^a. A possibilidade que a microscopia de tunelamento oferece de detectar a precessão de um spin individual e portanto de conhecer seu entorno químico e magnético particular, depende criticamente da existência de um modelo que permita a interpretação dos dados. Tem sido sugerido^b que as oscilações da corrente podem estar associadas com variações na densidade de carga que acontecem quando centros paramagnéticos são perturbados. Essas oscilações tem componentes com a frequência de Larmor devido a interação spin-órbita. Propomos um modelo no qual estas variações na densidade de carga induzem um momento dipolar dependente do tempo, que localmente muda a barreira de potencial, modulando a corrente.

^aY. Manassen, R. J. Hamers, J. E. Demuth, A. J. Castellano Jr., Phys. Rev. Lett., 62, 2531 (1989)

^bD. Shachal, Y. Manassen, Phys. Rev. B, 44, 11528 (1991).

**FORMULAÇÃO ANALÍTICA PARA O
CÁLCULO DO CAMPO MAGNÉTICO DE
BOBINAS CORRETORAS SHIM PARA
MAGNETOS DE ALTA HOMOGENEIDADE.**

BIANCHI, I.; SHIGUE, C. Y.

Centro de Materiais Refratários - CEMAR/Faenquil

No projeto de bobinas corretoras de campo para um magneto de alta homogeneidade (melhor do que 100ppm), é necessário o emprego de expressões analíticas do campo induzido por espiras circulares e semi-circulares em todo o espaço. Para as espiras circulares utilizou-se o método do potencial escalar magnético, e para as espiras semi-circulares, desenvolveu-se a integral de Biot-Savart em série de Taylor até a quarta ordem em coordenadas retangulares (x,y,z), integrando-se os termos resultantes um a um. Para avaliação da consistência e determinação dos limites de validade da solução analítica, empregou-se o método da integral elíptica resolvida por Quadratura Gaussiana de 24 pontos. São apresentados resultados para as corretoras z e zx, que correspondem a um arranjo de bobinas circular e semi-circular, respectivamente.

**ESTUDOS POR RPE DOS COMPOSTOS DE
 $Cu(\alpha - AIB)_2$ E $Cu(D, L - ala)_2 \cdot H_2O$ NA
FORMA DE PÓ.**

SAAB, S. DA C.; SHIBUYA, C.; TERRILE, M. C.;

NASCIMENTO, O. R.

USP/IFQSC/DFCM

CALVO, R.

INTEC/CONICET - Santa Fé, Argentina

Através da espectroscopia de Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE) nas frequências de 9,5 e 35 GHz, obtivemos os espectros das amostras de cobre com aminoácidos [$CuCNH_2(CH_3)_2(CO_2)_2$] e [$Cu(NH_2CHCH_3CO_2) \cdot H_2O$], na forma de pó, à temperatura ambiente. A interação de troca é grande (o parâmetro de troca J é muito maior que $A/g\beta$) devido a alta concentração do Cu(II) nas amostras, e as linhas de ressonâncias devido a interação hiperfina não são observadas, sendo moduladas pela interação de troca. A simulação dos espectros é feita através de um programa que calcula o espectro $d\chi''/dH$ de RPE, de uma amostra de pó assumindo $S = 1/2$ e $I = 0$ com J suficientemente grande. Este programa em especial é útil para casos em que temos espectros com linhas de ressonância relativamente largas, bem como variações angulares complicadas. Assim obtemos, através da simulação, os valores de g_1 , g_2 e g_3 para cada amostra. Estes resultados estão de acordo com os valores obtidos para os monocristais dos mesmos compostos.

**O USO DA RESSONÂNCIA
FERROMAGNÉTICA
FOTOTERMICAMENTE MODULADA NA
INVESTIGAÇÃO DE MATERIAIS
FERROMAGNÉTICOS**

ROMANO, J. A.; CORTEZ, A. C. R. DA M.;

VARGAS, H.

UNICAMP

MIRANDA, L. C. M.

Instituto de Pesquisas Espaciais

NIKITOV, S. A.

Institute of Radio Engineering and Electronics

A ressonância ferromagnética tem sido utilizada por muitos anos como uma potente técnica na investigação de materiais ferromagnéticos. Recentemente "alguns métodos alternativos" que usam técnicas de detecção fototérmicas foram surgindo, entre eles a Ressonância Ferromagnética Fototermicamente Modulada (RFM-FM). Nesta técnica a amplitude do sinal é proporcional à derivada da susceptibilidade magnética em relação à temperatura. A RFM-FM foi utilizada neste trabalho para a investigação de amostras ferromagnéticas na forma de pó. Dois fatores distintos do comportamento da amplitude do sinal são determinados e explicados: a existência de uma amplitude finita em campo magnético externo igual à zero e a existência de uma amplitude mínima para algum valor do campo magnético. Esta técnica pode ser muito útil no estudo dos principais fatores da absorção da RFM, como a forma e a largura de linha desta absorção, e o comportamento da magnetização com respeito à temperatura.

Direct Inversion Pulse Adjusting in NMR

FOERSTER, B.; TANNÚS, A.; PANEPUCCI, H.

IFQSC-USP

A common calibration procedure in NMR requires adjusting of the radio frequency amplitude in order to maximize excitation efficiency. Two recent methods have been investigated and a new modified technique proposed. Van der Muelen et. al. ^a first used a sequence of three identical RF pulses to calculate the flip angle using the amplitudes of two of the four occurring echoes. The algorithm later was improved by J. W. Carlson et. al. ^b using all four echo amplitudes. Both techniques suffer for a serious discontinuity around 180° which makes evaluation of the flip angle in this range impossible. Using the improved algorithm for calculating the flip angle and a modified pulse sequence we developed a new technique resulting in smooth behavior from 50° to 350° and unlike the previous methods as well about 180°. This is of great importance for adjusting inversion pulses used in various experiments. Experimental results have been compared with simulation obtained by numerically solving the Bloch differential equations using a Runge-Kutta fourth order algorithm.

^aP. van der Muelen and G. H. Ypern, Proc. SMRN V 1129, (1986)

^bJ. W. Carlson and D. M. Kramer, Proc. SMRN X, (1991)

RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA NO ESTUDO DE TRÂNSIÇÕES MAGNÉTICAS EM FERRITAS DE CÁLCIO E NIÓBIO.

SOUZA, P. H. DE; TERRILE, M. C.; MAGON, C. J.

*Departamento de Física e Ciências dos Materiais -
IFQSC-USP*

MORAES, I. J.

Departamento de Física - IMF - UFG

Sabe-se que o composto $Ca_2Fe_{2-x}Nb_xO_{5+x}$, com $x = 0$ ($Ca_2Fe_2O_5$), possui uma temperatura de transição (T_N) antiferromagnética-paramagnética igual a 725K. Ao adicionarmos nióbio ($x > 0$) este substitui íons de ferro e a temperatura de transição diminui. Neste trabalho foi estudada a dependência da intensidade e da largura de linha com a temperatura e concentração de nióbio (x) na faixa de temperatura de 4.2K até 300K e entre as concentrações de $0 \leq x \leq 1$. Em nossas medidas observamos que com o decréscimo da temperatura a largura de linha aumenta drasticamente nas proximidades de T_N . Assim determinamos para diferentes valores de x , em amostras policristalinas do tipo $Ca_2Fe_{2-x}Nb_xO_{5+x}$, diferentes valores de T_N . Para a amostra com $x = 0$, em temperatura ambiente, não se observou sinal de Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE). Este fato foi interpretado como sendo causado pelo forte alargamento produzido pela interação de troca entre íons Fe^{3+} . Para pequenos valores da concentração (x) é observado um sinal de RPE devido aos íons de nióbio quebrarem a interação de troca entre os íons de ferro, formando então Fe isolados, isto é, Fe cuja vizinhança magnética são íons de Nb. Estes sinais de RPE possuem $g \approx 2$, mas à medida em que aumentamos o valor de x observamos outro sinal com $g \approx 2,6$, devido a posição cristalina diferente da anterior, e obtemos este sinal somado com o anterior. No momento estamos estudando a variação da intensidade em relação à concentração de Nb, com o objetivo de entender melhor a estrutura magnética dos íons de ferro, assim como sua valência e queremos também a confirmação da disposição dos seus primeiros vizinhos, já que o íon Fe é o responsável pelos sinais de RPE.

INTERACTION BETWEEN THE NEUTRAL FORM OF LOCAL ANESTHETICS AND PHOSPHATIDYLCHOLINE MEMBRANES AS STUDIED BY 2H, 31P AND 1H-(NOE) NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE.

PAULA¹⁻², E. DE

¹ *Departamento de Bioquímica, Instituto de Biologia -
UNICAMP - Campinas/SP*

JARRELL, H. C.

*Institute for Biological Sciences, National Research
Council, Ottawa, On, Canada*

SCHREIER, S.

² *Departamento de Bioquímica, Instituto de Química,
USP - São Paulo*

Local anesthetics (LA) block the conduction of the nervous impulse by directly binding to the Na⁺ channel protein (blocking Na⁺ influx into the cell, J.Pharmacol.Exp.Ther. 171:32, 1970) and by the interaction with phospholipids (Biochemistry 20:6824, 1980), changing membrane fluidity. Previous work from our laboratory indicated that the neutral form of various LA decrease lipid organization (as measured by the EPR spectra of incorporated spin probes) to a different extent. In this work we examined the interaction of esters (tetracaine, procaine and chlorprocaine) and amides (dibucaine, etidocaine, bupivacaine, mepivacaine, lidocaine and prilocaine) LA with phosphatidylcholine (PC) membranes; we tried to evaluate the contribution of the differences in structure and binding sites of LA on their effect upon phospholipid bilayers. No change was observed in the 31P-NMR spectra of egg PC bilayers upon addition of LA. The 2H-NMR spectra of membranes containing egg PC and chain perdeuterated dimyristoyl PC at a 4:1 molar ratio showed a significant decrease in lipid order (as monitored by a decrease in the quadrupolar splittings, $D_{N1/2}$) in the C7-C12 region and small changes for carbons 2-6, in agreement with 31P results. Measurements of the spin-lattice relaxation time (T1) confirmed that profile of changes of $D_{N1/2}$. 1H-nuclear Overhauser experiments indicated that the anesthetics aromatic protons are connected to the glycerol protons of the lipid, the connectivities being smaller for the LA with larger effects on the degree of order of the acyl chain region. The results suggest that both location and structure of LA are responsible for the different membrane effect. Financial support: CAPES, NRCC.

DEFEITOS PONTUAIS EM DOLOMITAS NATURAIS

FRANCO, R. W. DE A.

Departamento de Física da Universidade Federal de Goiás

ROSSI, A. M.

CBPF/CNPq

Centros paramagnéticos em dolomitas ($CaMgCO_3$) tem sido propostos como paleotermômetros geológicos e indicadores de processos de cristalização (1,2). A interpretação do espectro de RPE deste mineral permanece, no entanto, não completamente resolvida. Amostras de calcários dolomíticos da formação Irati (grupos Bambuí e Araxá) de diferentes regiões do estado de Goiás, com análise química elementar conhecida foram estudadas por RPE, em banda X e banda Q. O

espectro foi interpretado como sendo constituído por Mn^{2+} (10 – 3000 ppm) ocupando sítios de Ca^{+2} e Mg^{+2} e radicais CO_3^- , CO_2^- e CO^{--3} , criados pelas radiações ionizantes. Os modelos propostos por Lloyd R. V. e Lumsden O. N. (1987) e D. N. Lumsden e R. Lloyd (1984) para utilizar centros paramagnéticos de cristalização e criados por irradiação como indicadores de variações térmicas e da diagênese mineral são investigadas e discutidas.

(1) R. V. Lloyd e D. N. Lumsden, *Chemical Geology*, 64 (1987) 103-108

(2) D. N. Lumsden e R. Lloyd, *Geochimica et Cosmochimica Acta* Vol.48 pp 1861-1865(1984)

CONSTRUÇÃO DE CABEÇOTE PARA TRANSFERÊNCIA DE POLARIZAÇÃO ELÉTRON-NÚCLEO (EFEITO OVERHAUSER).

BISCEGLI, C. I.; COLNAGO, L. A.
EMBRAPA/NPDIA - São Carlos - SP
MAGON, C. J.

Departamento de Física e Ciências dos Materiais - IFQSC/USP

Um dos principais problemas da tomografia de RMN para obtenção de imagens de pequenos objetos, da ordem de milímetros, é a baixa sensibilidade da técnica, devido à pequena separação entre os níveis energéticos. Para amenizar esse problema algumas técnicas têm sido tentadas. A transferência de polarização elétron-núcleo (Dynamic Nuclear Polarization-DNP) vem sendo usada para aumentar o sinal de RMN, tanto em sólidos quanto em líquidos. Experimentos de DNP em solução, requerem a irradiação do soluto paramagnético com microondas para saturar a transição eletrônica, enquanto se observa o sinal de RMN do solvente. Foi construído inicialmente um cabeçote para DNP (9,2 GHz para o elétron e 14 MHz para o próton) usando uma bobina tipo sela colocada longitudinalmente no centro de uma cavidade cilíndrica Varian V-4535, operando no modo TE_{011} . Resultados obtidos com uma amostra de 10 μ l, uma solução aquosa de 2,2mM do marcador paramagnético TEMPO (Aldrich), mostraram aumento de até 6 vezes do sinal de RMN na presença da microonda. Com o objetivo de aumentar ainda mais o sinal de RMN, construiu-se uma cavidade de RPE com frequência e acoplamento ajustáveis onde no seu centro transversalmente foi montada uma nova bobina do tipo Helmholtz, constituída de 6 espiras (fio de cobre 34) formando um conjunto de 3 espiras cada uma afastadas 8mm. Aplicações em espectroscopia e para melhorar o contraste em imagens por RMN estão sendo realizadas com esse sistema.

CENTROS PARAMAGNÉTICOS DO

$NH_4Br : Cu$

MAURO, E. DI

UEL

SANO, W.

IFUSP

O brometo de amônia apresenta propriedades interessantes tais como duas transições de fase, abaixo da temperatura ambiente, relacionadas ao ordenamento do tetraedro de NH_4 e alteração na estrutura cristalina. Com o objetivo de entendermos como estas duas transições modificam o comportamento dos centros paramagnéticos formados em torno do cobre, estudamos^a o $NH_4Br : Cu$ crescido em soluções cujo pH variou de zero a 8,26. Utilizando principalmente, a RPE nas bandas X e Q, realizamos um estudo térmico e angular de 77 K à temperatura ambiente, com o qual verificamos que o $NH_4Br : Cu$ forma tres centros paramagnéticos distintos, de acordo com o pH das soluções, sendo um deles descrito pela primeira vez. Pelas simetrias apresentadas para cada uma das fases do cristal, pudemos propor modelos para estes centros compatíveis com as transições de fase. Mostramos que em virtude da forte covalencia apresentada pelos centros, a interação super-hiperfina supera a hiperfina.

^aE.Di Mauro, Centros Paramagnéticos do $NH_4Br : Cu$, Tese de Doutorado, Instituto de Física da USP, São Paulo, 1992.

ESTUDO DA RESSONÂNCIA MAGNÉTICA DE Fe^{3+} EM LÂMINAS DE PALÁDIO.

MEDINA NETO, A.; OLIVEIRA, V. S.; GANDRA, F. G.

UNICAMP - Instituto de Física

Foi realizado o estudo da ressonância magnética de Fe^{3+} em lâminas de paládio com espessura de 100 e 200 microns, nas concentrações de 0,2, 0,5 e 1 at%, em função da temperatura. Os experimentos foram realizados com campo externo perpendicular e paralelo à superfície da lâmina. Os espectros obtidos para H perpendicular mostram a presença de duas linhas muito próximas, cuja separação aumenta com a concentração. Para H paralelo, observa-se uma única linha metálica. Contudo, tentativa de ajuste com uma linha Dysoniana não apresentou o resultado esperado, o que indica que o espectro é composto de mais de uma linha. Os resultados são interpretados como sendo devidos ao espectro de pó para o Fe^{3+} em simetria cúbica com distorção axial, e contribuição de g paralelo e g perpendicular. Para pequenas concentrações a separação entre as linhas é muito pequena, de modo que o espectro se constitui de apenas de uma linha. Isto mostra que a contribuição do campo de demagnetização para o campo efetivo é a responsável pela separação das linhas. Levando em conta o fator de demagnetização para uma

lâmina, nos casos de H perpendicular e paralelo, estimamos os valores de g paralelo e perpendicular para as diversas concentrações.

Espectroscopia de Alta Resolução por RMN do PolyParaPhenylene (PPP) dopado com $FeCl_3$

BONAGAMBA, T. J.; GIOTTO, M. V.; BELLO JUNIOR, B.; NASCIMENTO, J. F.; PANEPUCCI, H. C.; CAMPOS, M. S.; MAGON, C. J.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

PARTITI, C. S. M.

Instituto de Física da USP

Este trabalho consiste na síntese e caracterização do polímero PolyParaPhenylene (PPP) dopado com $FeCl_3$, usando a técnica de Espectroscopia de Alta Resolução em Sólidos por Ressonância Magnética Nuclear. Para analisar estas amostras, espectros de alta resolução de ^{13}C foram obtidos utilizando, simultaneamente, as técnicas de desacoplamento em alta potência (DEC) e rotação em torno do ângulo mágico (MAS). Alterações nos espectros ^{13}C do PPP dopado com $FeCl_3$ causadas por defeitos na cadeia polimérica, tal como pólarons e bipólarons, foram analisadas. Estudamos também os efeitos de variação de temperatura e purificação sobre os espectros do PPP.

As amostras foram adicionalmente caracterizadas por outras técnicas, tais como: Ressonância Paramagnética Eletrônica, Efeito Mössbauer, InfraVermelho, Absorção Atômica e Medidas de Condutividade Elétrica.

Referências:

[1] Giotto, M.V.; /it Caracterização do PolyParaPhenylene (PPP) dopado com $FeCl_3$, utilizando Espectroscopia de Alta Resolução por Ressonância Magnética Nuclear., Instituto de Física e Química de São Carlos, Dissertação de Mestrado (1993).

[2] Bonagamba, T.J.; *Espectroscopia de Alta Resolução em Sólidos por RMN.*, Instituto de Física e Química de São Carlos, Tese de Doutorado (1991).

[3] Bello Jr., B.; *Síntese, dopagem, propriedades elétricas e caracterização do PPP.*, Instituto de Física e Química de São Carlos, Dissertação de Mestrado (1991).

DISPERSION EN LA RELAJACION ESPIN-RED EN CRISTALES LIQUIDOS Y ALGUNOS TEJIDOS BIOLÓGICOS*

PUSIOL**, D. J.; ANOARDO***, E.; GONZÁLEZ***, C. FAMAF, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina

Se presentan resultados experimentales de la dispersión en la relajación espin-red, ($T_1(\nu_L)$), en algunos cristales líquidos termotrópicos y colestéricos, estudiados en el rango de frecuencias de Larmor de 200 Hz a 100 MHz. Los resultados reflejan propiedades del orden local y de la dinámica molecular en la escala de tiempos de los movimientos lentos y ultralentos ($10^{-8} < \tau_c < 10^{-2}$ seg).

Estos experimentos se realizan por medio de la técnica de la Ressonancia Magnética Nuclear con ciclaje rápido del campo magnético. Esto significa que se polarizan los espines en un campo alto (.5 T), luego éstos evolucionan en un campo menor -al cual corresponde la frecuencia de Larmor, $\nu_L - y$ luego se detecta la magnetización nuevamente a campo alto. El pasaje típico de campo alto a campo cero puede ser tan rápido como 1 ms.

Se clarifica la significancia de los movimientos colectivos como las fluctuaciones de orden del Director (OFD), respecto de los movimientos individuales como rotaciones de la molécula o partes de ella y autodifusión traslacional. La transición de la Ley $T_{1FD}(\nu_L) \propto (\nu)^{1/2}$ en la fase nemática¹ a la correspondiente a $T_{1FD}(\nu_L) \propto (\nu)^1$ en la fase esméctica². El estudio de la dispersión en el tiempo de relajación en el orden dipolar, $T_{1D}(\nu_L)$, presenta evidencias independientes de la existencia de los movimientos colectivos en la escala de tiempo de los movimientos lentos. También los experimentos reflejan la existencia de rotación molecular, inducida por la difusión traslacional de la molécula en la hélice colestérica.

Estos experimentos han mostrado la existencia de *relajación cruzada* entre los núcleos de hidrógeno y núcleos cuadrupolares como nitrógeno (o cloro) que forman parte de la molécula. Este fenómeno se manifiesta como *dips* en las curvas de $T_1(\nu_L)$. La forma de los dips refleja la distribución de gradientes de campo eléctrico en el sitio del núcleo cuadrupolar no promediados por los movimientos moleculares en la escala de tiempos correspondiente; por lo tanto es posible *modelar* estructuras locales parcialmente desordenadas. Se presentan simulaciones Montecarlo que describen la distribución del ordenamiento orientacional y posicional en las diferentes mesofases.

Una interpretación similar se realiza para los experimentos realizados en músculos de ranas, sanguijuelas vivas, algas, proteínas hidratadas y DNA hidratado³.

* Trabajo parcialmente financiado por CONICET, CONICOR y Fundación Antorchas de Argentina y Fundación A. von Humboldt de Alemania.

** Miembro de la Carrera del Investigador del CONICET.

*** Becario del CONICOR, Córdoba.

³ R. Kimmich, et al. J. Magn. Reson. 68, 263 (1986).

RNM DE PRÓTONS EM LIGAS METÁLICAS HIDROGENADAS: CONTRIBUIÇÃO DA INTERAÇÃO DIPOLAR H-METAL PARA RELAXAÇÃO SPIN-REDE.

LEITE, M. A. S.; WONEY FILHO, W.

UFG

Diversos são os compostos intermetálicos que nas condições normais de temperatura e pressão absorvem

uma grande quantidade de íons leves. Estes materiais são conhecidos como ligas metálicas hidrogenadas, ou vidros metálicos hidrogenados. Medidas de tempos de relaxação spin-rede em função da temperatura e frequência, foram obtidas por Wolney ^a em espectômetro de ressonância nuclear magnética pulsada da Universidade de Sheffield, e por J. Shinar ^b, fornecem os dados para a verificação da efetividade da contribuição dipolo-dipolo para a taxa de relaxação spin-rede $1/T_1$ através do processo de difusão de spins nas interações hidrogênio-metal (Zr, Hf, V, Ni) calculando os segundo momentos. Os materiais investigados foram: Ni₃₆ Zr₆₄ H_{0,50}; Zr₃ Rh H₃; Ni₃₆ Zr₃₂ Hf₃₂ H_{1,36}; Hf V₂ H₃, Zr V₂.

^aW. Wolney Filho, J. M. Titman and R. L. Havill, XIV ENFMC, Caxambú-MG, 1991

^bJ. Shinar, D. Davidov and D. Shaltiel, Phys. Rev. B, 30; 6331(1984)

Workshop: Ressonância Magnética em Sistemas Biológicos I (RES, BIO) – 21/05/93

RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA DE Hb-NO E A DINÂMICA DE PROTEÍNAS

BEMSKI, G.; WAJNBERG, E.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, R. Dr. Xavier Sigaud 150, 22290 Rio de Janeiro

Os estudos da dinâmica de proteínas usam em geral técnicas óticas para observação de fenômenos rápidos. Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE) permite obter em princípio, informações detalhadas sobre a estrutura eletrônica dos centros paramagnéticos.

O nitróxido de hemoglobina (Hb-NO) representa um sistema rico em detalhes observáveis pela RPE. Em vista disto estudamos o comportamento do Hb-NO, primeiro durante a fotólise e ultimamente em função da temperatura.

Em temperaturas baixas (< 30K) os espectros são compostos de três componentes cujas amplitudes variam com a temperatura de formas diferentes, e cujas relaxações (T_1) também diferem. Acreditamos que estes espectros correspondem a várias orientações do ligante NO com respeito ao plano da heme, congeladas em temperaturas abaixo de 30K. Em temperaturas mais elevadas um dos espectros começa a predominar.

Acima de 180K a área do espectro começa a diminuir apreciavelmente sem grande mudança na forma das linhas. Este fenômeno se deve provavelmente a mudanças conformacionais no bolso da heme que causam um aumento de relaxação do centro Fe-NO.

A temperatura desta transição corresponde a temperatura em que várias outras técnicas (Mössbauer, difração de neutrons, etc) apontam na direção de profundas mudanças na estrutura e dinâmica de hemoproteínas.

Free radical formation *in vitro* and *in vivo* monitored by electron paramagnetic resonance

AUGUSTO, O.

Depto. de Bioquímica, Instituto de Química - USP

Inherent in oxygen utilization by aerobic organisms is the possibility of damage to biomolecules by free radical species, a phenomenon that has come to be called oxidative stress. Although oxidative stress is thought to be involved in the pathophysiology of several diseases, little information is available for *in vivo* generation of free radical intermediates. Demonstration of ephemeral free radicals inside a whole organism is a challenging task that has only recently been undertaken and is still being developed. Since free radicals are usually very reactive species, most of the methods to detect free radicals under physiological conditions, even *in vitro* systems, are indirect, measuring an effect of the radical and not the radical itself. Electron paramagnetic resonance (EPR) is the only direct method for detecting free radicals since it is based on the absorption of energy by free radicals in the presence of a magnetic field. Under physiological conditions, however, most radicals do not attain steady state concentrations higher than the detection limit of the EPR spectrometer and consequently their EPR detection and identification have been performed by spin-trapping or freeze-trapping techniques. An interesting exception has been the direct EPR detection of the ascorbyl radical, the stable univalent oxidation product of ascorbate (vitamin C), in biological fluids of experimental animals and humans. Within this context, I will briefly discuss the potentialities and drawbacks of using EPR for monitoring free radical reactions under physiological conditions.

The examples to be discussed will be results obtained in our laboratories, particularly those demonstrating that increases in blood flow trigger the production of endothelium-derived free radicals in rabbits *in vivo*, a process that can be monitored by the plasma levels of the ascorbyl radical.

*Workshop: Ressonância Magnética
em Sistemas Biológicos II (RES, BIO)
- 21/05/93*

SPIN LABELING ON INTERCELLULAR LIPID LAMELLAE IN STRATUM CORNEUM

ALONSO, A.

Instituto de Física Gleb Wataghin - UNICAMP - Campinas

Stratum Corneum (SC), the most superficial skin layer with 15 micron thickness, is the major responsible by retention and control of skin hydration. This membrane is also important in the organism protection and it makes contributions to the skin viscoelasticities properties. The molecular structure of SC has been extensively studied recently and some models were proposed considering the existence of intercellular membranes involving the corneocytes. These membranes consist of multilayers called Landmann units which number varied from place to place (Donald et alli, J. Invest. Dermatol. 92:251-257, 1989), and that can be reduced by organic solvents. These intercellular membranes constitute the barrier to water diffusion and they have an important role in cohesion between corneocytes. In these work we use spin labeling method and Electron Spin Resonance (ESR) technique to evaluate the fluidity of these membranes in comparison to other membranes (RBC) trying to offer information for models development. We also correlate the fluidity with some properties as Water Content, Elasticity and Permeability of SC. The results so far show that fluidity changes according to the hydration of SC, increasing with higher Water Contents, higher Elasticity and higher Permeability Constants.

Aplicações Médicas da Ressonância Magnética em São Carlos
PANEPUCCI, H.; TANNÚS, A.; MARTINS, M.; VIDOTO, E.; BONAGAMBA, T.
Instituto de Física e Química de São Carlos U.S.P.

A Ressonância Magnética Nuclear como técnica espectroscópica particularmente apropriada ao estudo de compostos orgânicos encontra múltiplas aplicações em biologia e bioquímica. Nos últimos anos a introdução a de métodos bidimensionais facilitou a análise de interações internucleares permitindo a obtenção de distâncias interatômicas e a determinação de estruturas moleculares não totalmente solúveis com técnicas de difração. Paralelamente a este desenvolvimento, uma outra aplicação da RMN, a formação de imagens que mostram a distribuição de hidrogênio, a transformou num poderoso método de diagnóstico médico, a Tomografia de Ressonância Magnética. O programa que vem sendo desenvolvido no IFQSC em São Carlos orienta-se às aplicações médicas que atualmente compreendem o diagnóstico por imagens e a espectroscopia localizada "in vivo". O trabalho a ser apresentado, pretende mostrar as sucessivas etapas e progressos do programa, que vão desde a produção das primeiras imagens em 1983, até o atual uso corrente do tomógrafo de 0.05 Tesla construído em São Carlos, no atendimento médico na região. Além da cronologia de resultados que inclui as primeiras imagens por 2DFT com seleção de planos em 1984, tomografia e imagens de fluxo com campo de 2 Tesla em 1986 e tomografia de corpo inteiro em campo baixo em 1987, serão apresentados resultados de localização espacial tridimensional usando bobinas de superfície e pulsos adiabáticos.

SEMICONDUCTORES

Dinâmica de Portadores (SEM) - _____
19/05/93

AVALIAÇÃO DO TEMPO DE CAPTURA DE ELÉTRONS EM POÇOS QUÂNTICOS DE InGaAs/InP.

SOUZA, P. L. DE

Centro de Estudos em Telecomunicações, PUC-Rio

SAMUELSON, L.; LIU, X.; NILSSON, S.; SEIFERT, W.; HESSAN, D.

Dept. of Solid State Physics, Lund University

SERMAGE, B.

Centre National d'Études des Télécommunications Bagnex

Foram feitas medidas de fotoluminescência convencional e resolvida no tempo numa amostra contendo seis poços quânticos de InGaAs/InP crescida por epitaxia metalorgânica de fase vapor a baixa pressão. Cada poço foi crescido por um tempo determinado entre 1 e 20 segundos.

A posição dos picos de fotoluminescência observados experimentalmente para os vários poços estão dentro do intervalo de energia previsto por cálculos teóricos, nos quais interfaces de diferentes composições e espessuras foram simuladas. Estes mesmos cálculos prevêm uma barreira para os elétrons inferior à dos buracos para poços quânticos de pelo menos até cinco monocamadas.

De posse dos valores das barreiras para elétrons e das medidas de tempo de vida para os diferentes poços quânticos, pode-se determinar o tempo de captura de elétrons usando o Princípio do Balanço Detalhado entre a captura e emissão na temperatura do início do declínio da fotoluminescência. Os tempos de captura obtidos estão entre 2 e 15 ps. Concordâncias e discrepâncias com valores publicados de outros pesquisadores [1,2] que utilizam outros métodos para determinar tempos de captura serão discutidas.

[1] P.W.M Blom, C. Smit, J.E.M. Haverkot and J. H. Wolter, *Phys. Rev. B* 47, 2072 (1993).

[2] B. Deveaud, A. Chomette, D. Morris and A. Regreny, *Solid State Comm.* 85, 367 (1993).

CAPTURA DE PORTADORES EM POÇOS QUÂNTICOS DE GaAs-AlGaAs

WEBER, G.; PAULA, A. M. DE

*Departamento de Física, Instituto de Ciências Exatas,
Universidade Federal de Minas Gerais,*

Nos últimos anos a captura de portadores em poços quânticos tem sido alvo de vários estudos teóricos e experimentais. Este interesse surge essencialmente devido à importância destes processos para dispositivos semicondutores. Os tempos de captura foram medidos por técnicas de fotoluminescência e espalhamento Raman (cw e resolvido em tempo). Todos os experimentos mostraram que a captura de portadores se dá em uma escala de tempo de picosegundos, no entanto Blom *et al.* [*Phys. Rev. B* 47, 2072 (1993)] mediram tempos de captura que variam com a largura do poço, enquanto Oberli *et al.* [*Appl. Phys. Lett.* 54, 1028 (1989)] não observaram qualquer dependência com a essa largura. O processo de captura é essencialmente a emissão de fônons LO através da interação elétron-fônon (Fröhlich). Nós apresentamos as taxas de captura devido a fônons confinados para poços quânticos de GaAs-GaAlAs usando o modelo de continuidade dielétrica (slab model) corrigido [G. Weber,

Phys. Rev. B 46, 16171 (1992)], para descrever os modos de fônon. Cálculos anteriores consideraram fônons bulk [J. A. Brum and G. Bastard, *Phys. Rev. B* 33, 1420 (1986)], ou fônons confinados obtidos por condições de contorno hidrodinâmicas [M. Babiker, A. Ghosal, and B. K. Ridley, *Superlat. Microstruct.* 5, 133 (1989)]. Nós comparamos os nossos resultados com as medidas experimentais e discutimos em detalhe as vantagens do nosso procedimento teórico.

CARRIER DENSITY DEPENDENCE ON LASER INTENSITY IN QUANTUM WELL PHOTOLUMINESCENCE

LEYVA, M. DE D.; OLIVEIRA, L. E.

Instituto de Física, Unicamp

A quantum-mechanical calculation of the laser-intensity-dependent conduction-subband electron density in GaAs-(Ga,Al)As quantum wells is performed by considering radiative recombination of electrons with free holes and with holes bound at neutral acceptors. Effects of temperature and of the acceptor distribution in the well are considered. Our calculations, which have no free parameters, are in quantitative agreement at $T = 300$ K with the results by Ding *et al.* (*Appl.*

Phys. Lett. 60, 2051 (1992)) who obtained the carrier density for multiple asymmetric coupled quantum wells through a fitting procedure which reproduced the total experimental photoluminescence intensity. For low temperature, there are no experimental results to compare with our calculations, which show three different behaviors of the intensity-dependence of the carrier density for a given acceptor concentration.

Hot electron energy relaxation in GaAs quantum wires: LO-phonon emission

CAMPOS, V. B.

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

SARMA, S. D.

Physics Department, University of Maryland, College Park, MD

We calculate, within the electron temperature model, hot electron intrasubband energy relaxation rates via LO-phonon emission in GaAs quantum wires. Our theory includes the known important physical mechanism such as quantum degeneracy, dynamical and static screening, hot phonon bottleneck effect. We compare the results obtained considering bulk phonons and two macroscopic models of phonon confinement, namely the slab (or electrostatic) model and the guided or (mechanical) model. We find that the slab model, while giving relaxation rates comparable to the bulk phonon emission rates, leads to an order of magnitude faster relaxation than the guided model. In the experimentally interesting electron temperature range of 40-200 K, and for reasonable wire parameters and electronic densities, we find that the hot phonon bottleneck effect is the single most important physical mechanism determining energy relaxation. The typical intrasubband relaxation time is of the order of a picosecond, quite comparable to the values corresponding to two dimensional quantum well structures.

Decaimento Temporal Longo de Fotoluminescência em InGaAs.

LAMAS, A. C.; GOBBI, A. L.

CPqD-Telebrás, C.P. 1579, Campinas 13088-061

A fabricação de circuitos optoeletrônicos em ligas semicondutoras III-V requer a exposição da superfície destas ligas à vários passos de processamento como limpeza com ácido, enxágue em água deionizada, deposição de nitreto de silício (SiN), etc. Estados de superfície que sejam ativados ou assim criados em interfaces ou em áreas expostas do material influenciam determinante-mente o desempenho dos dispositivos ou circuitos fabricados e mesmo impedem a sua utilização em telecomunicações, por exemplo.

Utilizamos o decaimento temporal em tempos longos da intensidade de fotoluminescência (LTPLID) da

transição banda-banda do InGaAs como ferramenta de análise da sensibilidade dos estados superficiais ou quasi superficiais deste material como função da intensidade da luz incidente e para diferentes etapas de processo. Observamos que superfícies submetidas a deposição de SiN por Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition (PECVD) apresentam um aumento sistemático da intensidade de fotoluminescência, típico de superfícies passivadas no intervalo de tempo de até 100 seg. de exposição. Em seguida o decaimento temporal parece ser dependente da potência da luz incidente, conforme esta é variada de 0.1 à 400 W/cm². LTPLID de amostras recém limpas apresentam comportamento típico de superfícies passivadas quando excitadas com baixa intensidade de potência (P < 0.1 W/cm²). Aumentando-se a densidade de potência da luz incidente até 800 W/cm² observa-se o aparecimento de dois processos distintos que influenciam a taxa de variação da intensidade de fotoluminescência. Submergindo-se em água deionizada, amostras previamente limpas em ácido fluorídrico por mais de 5 minutos, gera-se processos de decaimento rápidos, onde os tempos de vida são da ordem de alguns segundos. Estes processos ocorrem logo após a excitação por luz, e são seguidos por outros mecanismos mais lentos que podem ser dependentes da potência da luz incidente.

Efeitos Eletrônicos em Heteroestruturas (SEM) - 19/05/93

RESSONÂNCIAS DE FANO EM EXCITONS QUASE-BIDIMENSIONAIS

BRUM, J. A.

Instituto de Física "Gleb Wataghin" - UNICAMP

OBERLI, D.

Walter Schottky Institut, Tu-München, D-8046 Garching, Alemanha

O confinamento dos portadores em poços quânticos de semicondutores quebra as bandas de valência e de condução em uma série de subbandas. Assumindo uma dispersão parabólica no plano das camadas e se as subbandas apresentam uma separação energética maior que a energia de ligação dos excitons, cada subbanda para os elétrons e para os buracos dá origem a uma família de estados excitônicos quase bidimensionais. Devido ao caráter tridimensional da interação de Coulomb, excitons pertencendo às diferentes subbandas, mas com a mesma simetria no plano, encontram-se acoplados. Estados excitônicos ligados, associados a subbandas excitadas, estão degenerados com o contínuo excitônico das subbandas fundamentais.

Nós calculamos a interação entre estes estados, modelando os excitons quase bidimensionais através de uma

interação de Coulomb efetiva e bidimensional^a. Seguindo esta descrição, excitons pertencendo a pares diferentes de subbandas não são acoplados. Quando se leva em conta o caráter tridimensional do exciton, em perturbação, estes excitons acoplam-se.

Observa-se uma situação típica de ressonância de Fano com o alargamento do pico de absorção devido ao estado excitônico ligado antecedido de uma antiresonância, criando uma linha de absorção fortemente assimétrica. A antiresonância só é observada porque o acoplamento ocorre entre estados excitônicos tipo s.

Um acoplamento adicional ocorre entre os estados excitônicos ligados e do contínuo devido ao acoplamento entre as subbandas de buraco pesado e leve (segundo a aproximação da massa efetiva, estes são os termos fora da diagonal do Hamiltoniano de Luttinger). Neste caso, o acoplamento ocorre entre estados 1s - do exciton de buraco pesado e o contínuo p- ou d- do exciton de buraco leve. Como apenas os estados s são óticamente ativos, o único efeito observável é o alargamento do pico de absorção.

^aT.-F. Jiang, *Solid State Commun.* 50, 589 (1984).

EXCITONS EM SUPER-REDES DE CdTe/CdZnTe

CHITTA, V. A.; PEYLA, P.; WASIELA, A.; D'AUBGNÉ, Y. M.; MARIETTE, H.

Laboratoire de Spectrométrie Physique, Université Joseph Fourier, Grenoble I, B. P. 87, F-38402, Saint-Martin d'Hères, France.

MAGNEA, N.

Dept de Recherche Fondamentale, Matière Condensée, SP2M-PSC, Centre d'Etudes Nucléaires de Grenoble

STURGE, M.

Physics Department, Dartmouth College, Hanover NH 037554.

Super-redes de CdTe/CdZnTe são chamadas de super-redes de tipo misto: os elétrons e buracos-pesados são confinados nas camadas de CdTe (super-rede de tipo I), enquanto que os buracos-leves são confinados nas camadas de CdZnTe (super-redes de tipo II). Neste trabalho, a energia de ligação, a força de oscilador e o deslocamento diamagnético das transições excitônicas são estudados em função do período da super-rede. Para os excitons de buracos-pesados (tipo I - gap direto), estas quantidades variam lentamente quando o período da super-rede é diminuído, até o limite de pequenos períodos ser alcançado, onde o exciton adquire um caráter 3D. Para os excitons de buracos-leves (tipo II - gap indireto) a energia de ligação assim como a força de oscilador tem valores muito pequenos para grandes períodos, devido à grande separação espacial entre o elétron e o buraco, enquanto que o deslocamento diamagnético é grande, pois o raio de Bohr também é grande. Quando o período da super-rede diminui, a

energia de ligação aumenta monotonicamente, até atingir, para pequenos períodos, o valor correspondente do material massivo. A força de oscilador também aumenta, enquanto que o deslocamento diamagnético diminui, quando o período é diminuído.

Calculando-se a energia do exciton assim como a função de onda dos portadores em função do período da super-rede pode-se interpretar os resultados obtidos usando-se somente um parâmetro ajustável: "o valor médio do offset da banda de valência - OBV". OBV é a soma das contribuições do offset químico com o da tensão hidrostática. Para as super-redes estudadas, as quais possuem uma baixa concentração de zinco nas barreiras ($x \approx 0.1$), o valor de OBV encontrado é de $2 \pm 4\%$ da diferença de gap entre a barreira e o poço quântico. Este valor concorda com o predito teoricamente.

MAGNETIC FIELD TUNED TRANSITION OF AHARONOV-BOHM OSCILLATIONS FROM hc/e TO $hc/2e$ PERIODICITY IN THE ARRAY OF AlGaAs/GaAs RINGS

GUSEV, G. M.; BASMAJI, P.

Instituto de Física e Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, SP, Brasil

LITVIN, L. V.; NASTAUSHEV, Y. V.; TOROPOV, A. I.

Institute of Semiconductor Physics, Russian Academy of Sciences, Siberian Branch, Novosibirsk, Russia

The array of antidots with periodicity nearly equal to diameter of antidot have been fabricated on GaAs/AlGaAs heterostructures with high mobility two-dimensional electron gas by electron-beam lithography and plasma etching. By this way the array of connected rings with diameter d of $0.3 \mu\text{m}$ has been formed. The sample size was $2 \times 2 \mu\text{m}^2$. The magnetoresistance oscillations which can be connected with Aharonov-Bohm (AB) effect with amplitude decreasing with increase of magnetic field has been found. We observed two sample states which is characterized by different shapes and periodicity of magnetooscillations. For the first state periodicity in magnetic field decreases from hc/eS to $hc/2eS$ when B up to 0.2 T , where $S = \pi d^2/4$. Thus, magnetic field transfers the sample to the second state with period $hc/2eS$. However, after 30-40 s at zero magnetic field sample returns to the first state. We suggest, that impurities are responsible for this behaviour. These impurities have a two-level states, and for one of which electrons are more strongly scattered than for another (due to the motion of strong scatter from the narrow place between antidots). If impurities scatter electrons, oscillations with period hc/eS have a different phase in the different rings and are averaged. Only oscillations with period $hc/2eS$ are survived because these oscillations are not sensitive to impurities scattering. Switching of impurities to other state gives rise to hc/eS AB oscillations which are

dominant in the system without scattering. The mechanism of the magnetic field influence on the impurity state are also discussed.

ELECTRONVOLTAIC EFFECTS IN SEMICONDUCTORS : FUNDAMENTALS AND APPLICATIONS

ASSUMPÇÃO, R. DE T.
UNICAMP-DEMA/FEM

When a semiconducting material is illuminated by a high energy electron beam, excess electron-hole pairs are generated within a depth about the electron penetration range of the specimen. If a built-in electric field such as a P-N or Schottky barrier is present in the semiconductor material, the generated pairs can be separated and sensed as a Voltaic effect in an external circuitry.

This "Electronvoltaic" effect, which is analogous to the well known Photovoltaic effect when the incident illumination is carried out by electrons rather than photons, can be conveniently exploited for characterization of defects in semiconductors by means of the EBIC (Electron Beam Induced Conductivity) mode of operation of the Scanning Electron Microscope (SEM).

The aim of this work is twofold : discuss the fundamental aspects of qualitative (SEM-image) analysis of non-radiative recombination centers in semiconductors and present a recently developed experimental method for quantitative characterization of these defects.

Results will be shown for dislocations, grain boundaries, doping and compositional inhomogeneities in direct and indirect band gap materials.

Propriedades e Aplicações Óticas de Semicondutores (SEM) - 19/05/93

ESTUDO DAS TRANSIÇÕES ÓPTICAS E_0 e E_1 EM SUPERREDES DE Ge/Si UTILIZANDO ELETROREFLETÂNCIA.

RODRIGUES, P. A. M.; SILVA, M. A. A.; CERDEIRA, F.

DFESCM, Instituto de Física, UNICAMP

Apresentamos medidas de eletrorefletância das transições E_0 e E_1 em superredes de Ge/Si com períodos $d \sim 15 - 40 \text{ \AA}$ e das transições E_1 em superredes de Ge/Ge_{0,7}Si_{0,3} com $d \sim 150 \text{ \AA}$. As transições E_0 nas amostras "finas" ($d \sim 15 - 40 \text{ \AA}$) podem ser entendidas utilizando um modelo de função envelope escalar. Este resultado, já obtido anteriormente para as amostras "grossas" ($d \sim 150 \text{ \AA}$) de Ge/Ge_{0,7}Si_{0,3},^a sugere que as transições E_0 no sistema Ge/Si podem ser en-

tendidas utilizando a aproximação da função envelope para períodos $d \geq 15 \text{ \AA}$.

As transições E_1 nas amostras "finas" são bem mais complexas. Porém, os espectros destas amostras podem ser interpretadas consistentemente em termos de transições interbandas obtidas a partir de cálculos LMTO da estrutura de bandas.^b Nas amostras com $d \sim 40 \text{ \AA}$ o múltiplo E_1 se separa e observa-se dois pares de transições que podem ser atribuídas às transições E_1 , $E_1 + \Delta_1$ tipo-Ge e tipo-Si. Apesar de as transições E_1 , $E_1 + \Delta_1$ tipo-Ge nestas superredes estarem localizadas a mais altas energias que as correspondentes transições no Ge-bulk, o seu comportamento com o período d não pode ser entendido em termos de modelos de confinamento simples.

As transições E_1 nas amostras com $d \sim 150 \text{ \AA}$ não demonstram nenhum deslocamento em relação à transição E_1 do Ge-bulk e da liga Ge_{0,7}Si_{0,3}. Este resultado sugere que para $d \sim 150 \text{ \AA}$ os estados eletrônicos responsáveis por estas transições praticamente não são influenciados pelo potencial da superrede.

^aP.A.M.Rodrigues, F.Cerdeira and J.C.Bean, Phys. Rev. B, **46**, 15263 (1992).

^bU.Schmid et al., Phys. Rev. B, **43**, 14597 (1991).

MEDIDAS DE FOTOLUMINESCÊNCIA EM GaAs COM DOPAGEM PLANAR

PAULA, A. M. DE; OLIVEIRA, A. G. DE

Departamento de Física, Instituto de Ciências Exatas,
Universidade Federal de Minas Gerais,

Recentemente tem crescido o interesse em estudar sistemas com portadores em duas dimensões devido a importância de suas aplicações tecnológicas. Estruturas com dopagem planar ou dopagem delta, onde átomos de Si são colocados nominalmente em uma monocamada atômica, apresentam um gás de elétrons bi-dimensional confinados em poços com um potencial em forma de V. Essa estruturas já foram estudadas por várias técnicas de transporte elétrico. Porém, não existe na literatura nenhum estudo sistemático de suas propriedades óticas. Nós apresentamos medidas de fotoluminescência para uma série de amostras de GaAs com dopagem delta de Si em diferentes concentrações (variando de $1.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ a $1.8 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$). Os espectros mostram dois picos de intensidade em energias abaixo da energia do *gap* de GaAs *bulk*. Nós estudamos a dependência desses picos com a temperatura da amostra e a intensidade da luz usada para excitar os portadores. A posição em energia e a intensidade desses picos localizados abaixo do *gap*, dependem fortemente da concentração de Si, fornecendo informações importantes sobre os processos de incorporação do Si em GaAs.

ESPECTROSCOPIA DE EXCITAÇÃO DE LUMINESCÊNCIA EM "QUANTUM DOTS" DE CdTe EM VIDROS.

OLIVEIRA, C. R. M. DE; PLENTZ FILHO, F. O.; MEDEIROS NETO, J. A.; CESAR, C. L.; BARBOSA, L. C.; CRUZ, C. H. B.; FRAGNITO, H. L.;

MENESES, E. A.
IFGW - UNICAMP
ALVES, O. L.
IQ - UNICAMP

Obtivemos espectros à 2K de PL [photoluminescence] e PLE [photoluminescence excitation] em uma sequência de quatro amostras de "quantum dots" de CdTe em vidros. As quatro amostras provem de uma mesma amostra submetida à diferentes tempos de tratamento térmico [25, 50, 95, 170 min à 580 °C], o que origina diferenciação no tamanho médio e distribuição de tamanhos dos nanocristais de CdTe. Os espectros de PLE mostram uma estrutura muito mais resolvida do que a absorção óptica, pois esta técnica permite isolar nanocristais de certo tamanho de outros. Isto possibilita um melhor entendimento do confinamento quântico nessas amostras e da distribuição de tamanho dos nanocristais.

FOTOCORRENTES PRIMARIAS EM DIODOS SCHOTTKY DE Pd/a-Si:H

BORGES, P. DE F.; CAMARGO JR, S. DE S.
Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais - COPPE

Foram realizadas medidas de fotocorrentes primárias versus tensão reversa aplicada em diodos Schottky de paládio depositado sobre silício amorfo hidrogenado (a-Si:H). Nestas medidas foi utilizada iluminação monocromática de baixa intensidade e de diferentes comprimentos de onda (450nm, 550nm e 650nm), permitindo estudar desde o caso de forte absorção em uma estreita região do semicondutor próximo ao contato Schottky, até a situação de absorção fraca e uniforme ao longo de toda a amostra. Os resultados experimentais mostram uma fotocorrente crescente com o campo aplicado, que satura numa eficiência de coleção unitária em altos campos, sem mostrar evidências de efeitos de carga espacial. Os dados experimentais foram ajustados pelos modelos de Crandall (1983) e Abel et alli (1989), cuja principal diferença reside na suposição feita sobre as taxas de recombinação e conseqüentemente na distribuição de portadores na camada intrínseca do diodo. Discute-se a controvérsia existente sobre a influência dos comprimentos característicos associados aos portadores sobre o transporte e a interpretação do produto mobilidade-tempo de vida obtido no ajuste dos modelos acima aos dados experimentais.

Propriedades ópticas de filmes GaAs crescidos a baixa temperatura por MBE

ROSSI, J. C.; LUBESHEV, D. I.; BASMAJI, P.
IFQSC-USP - São Carlos C.Postal 369 - 13560-970
PIZZANI, P. S.; GALZERANI, J. C.
UFSCar - São Carlos - SP
NOTARI, A. C.
UNIR - Jiparana - Ro

Filmes de GaAs crescidos por MBE a baixa temperatura (B.T.) tem recebido recentemente uma atenção muito grande devido às suas aplicações em dispositivos tipo transistor a efeito de campo elétrico (alta resistividade da camada tampão, e curto tempo de vidas dos portadores). Neste trabalho, estamos apresentando efeito da temperatura de crescimento nas propriedades óptica e elétrica de GaAs dopado com silício crescido a B.T.

As amostras de GaAs: Si foram crescidas por MBE - MECA 2000 sobre substrato de GaAs não dopado a temperatura de crescimento entre 550 e 100°C. Essas amostras consistem em 0.1µm uma camada tampão de GaAs seguido por 1µm camada de GaAs:Si. Os espectros Raman das amostras crescidas acima de 200°C apresentam uma cristalinidade bastante boa, note que nessas amostras o modo TO não é excitado, nem há deslocamento para baixas frequências de LO.

O deslocamento da frequência do Fônion LO em função da temperatura de crescimento foi observado.

As amostras crescidas a temperatura $\leq 200^\circ\text{C}$ apresentam pouca cristalinidade indicando início da fase amorfa para temperatura $\leq 100^\circ\text{C}$.

Espalhamento Raman Ressonante em Superredes Tensionadas de InGaAs/GaAs.

RIBEIRO, E.; CERDEIRA, F.
Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física, DFESCM, 13081-970 Campinas SP
ROTH, A. P.
Institute for Microstructural Sciences, NRC, Ottawa, K1A 0R6, Canada

Em recente estudo de espalhamento Raman ressonante induzido por pressão¹, sugere-se que os modos ópticos dos fônons no sistema InGaAs/GaAs não estão sujeitos a confinamento. Para estes modos, a superrede se comportaria como um semicondutor homogêneo, no qual apenas os modos LO no centro da zona existem. Perseguindo esta idéia, estudamos em detalhe o espectro Raman de superredes de InGaAs/GaAs com períodos de 100 Å e 50 Å. Utilizamos frequências em ressonância com as transições ópticas $E_0 + \Delta_0$ tanto dos poços quânticos de InGaAs como das barreiras de GaAs, à procura de modos confinados ou de interface. ¹ V.

Lemos, C. K. Inoki, F. Cerdeira, T. Ritter and B. A. Weinstein, *Solid State Commun.* **84**, 1011 (1992).

OPTICAL PROPERTIES OF AMORPHOUS SILICON MEASURED USING Z-SCAN TECHNIQUE

KOLENDA, J.; GRIVICKAS, V.

Vilnius University - Vilnius

MISOGUTI, L.; FRAGALLI, J. F.; ZILIO, S. C.;

BAGNATO, V. S.

IFQSC, USP - São Carlos

The investigations of amorphous hydrogenated silicon (a-Si:H) in recent time have attract many attention due to the possible applications of this layers in optical devices. The technology of a-Si:H, compared to the cristalline semiconductors, is inexpensive and there is at present time the possibility to produce the large surface area of the a-Si:H thin films of good optical quality. The involving of this material in devices, based on nonlinear optics effects predicts the estimation of nonlinear optical properties of a-Si:H. In many works the time-resolved photo induced absorption (PA) and light induced grating (LIG) methods was used to estimate photoinduced changes of the optical dielectric function and carrier dynamics in amorphous silicon films. In this letter we employ z-scan technique (ZST) to investigate the third order nonlinear susceptibility of a-Si:H films produced by glow-discharge technique. The excitation of the samples was performed using light pulses produced by Rh6G dye laser pumped with second harmonic light pulses of actively mode-locked Nd:YAG laser. We consider the change of absorption coefficient caused by carriers above optical gap absorption. The influence of the overlapping effects (interference effect and thermal effect) on experimental results is discussed.

FOTOLUMINESCÊNCIA EM LIGAS DE CARBETO DE SILÍCIO AMORFO HIDROGENADO

MAGALHÃES, C. S. DE; ALVAREZ, F.

IFGW/UNICAMP

A alta diluição de hidrogênio na mistura de metano e silana durante o processo de deposição por "glow discharge" permite produzir ligas de Carbetto de Silício amorfo hidrogenado com baixa densidade de estados (10^{16}cm^{-3}) e baixa cauda de Urbach (50-60meV) (1). Estudamos este material através da técnica de fotoluminescência (PL), utilizando um laser de Argônio na linha 5145Å para excitação. Os resultados obtidos foram comparados com aqueles do Silício amorfo e Carbetto de Silício fabricados de modo convencional, isto é, sem diluição de hidrogênio. Observamos a 77K que o comportamento da largura da banda PL, relacionada à recombinação cauda-cauda, escala com a cauda de Urbach. Esta similaridade nos leva a pensar que a largura da banda PL reflete a largura das caudas das bandas de valência e condução.

Assumindo que a dependência da eficiência PL em

função da temperatura segue a relação (2)

$$[(1/y_L) - 1]^{-1} = y_0 \exp(-T/T_L)$$

onde y_L é a eficiência PL e T_L a inclinação da cauda da banda, esta sendo em torno de 25K para a-Si:H. Verificamos que o nosso material se comporta mais proxima-mente ao Silício amorfo do que o convencional. Para o nosso material obtivemos $T_L \approx 50\text{K}$, e para o convencional em torno de 102K.

Finalmente, resultados da dependência da PL com a intensidade de excitação e com a energia de excitação, são apresentados e discutidos.

(1) Alvarez F., Sebastiani M., Pozzili F., Fiorini P. and Evangelisti F., 1992, J. Appl. Phys., 71(1), 267.

(2) R.A. Street, "Hydrogenated amorphous silicon", Cambridge University Press, 1991.

A INFLUÊNCIA DOS PLASMÔNS NO ESPECTRO DE LUMINESCÊNCIA DOS SEMICONDUCTORES DE GAP DIRETO.

SAMPAIO, A. J. DA C.; COSTA FILHO, R. N. DA;
FREIRE, V. N.

*Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará
Campus do Pici - Cx. Postal 6030 Fortaleza - Ceará -
CEP 60451.970*

No trabalho de Valder N. Freire sobre a influência da interação Coulombiana entre portadores no espectro de luminescência de semicondutores de Gap direto, observou-se um pico luminescente na borda do espectro ou seja na região de mais alta energia.

Neste trabalho nos introduzimos um novo Hamiltoniano que leva em consideração a interação Elétron-Plasmon para tentarmos verificar realmente a causa do pico luminescente citado acima.

A razão de introduzirmos os Plasmons vem do fato de que os mesmos surgem quando existe uma forte interação Coulombiana no gás de Elétron-Buraco. Esta é exatamente a situação que ocorre nos semicondutores altamente excitados, proporcionando portanto possíveis processos de recombinação entre os elétrons e os plasmons.

Degradação da Superfície de InGaAs e InP Submetidas a Plasma de H₂

GORRI, A. L.; LAMAS, A. C.

CPqD Telebrás, C.P. 1579, Campinas 13088-061

Plasma de hidrogênio é uma técnica amplamente utilizada na fabricação de dispositivos optoeletrônicos com base em semicondutores III-V para uso em telecomunicações. Esta técnica é empregada na remoção de hidrocarbonos, óxidos nativos, deposição de dielétricos e no ataque químico de ligas semicondutoras. A exposição direta de superfícies de InP a plasmas de H₂,

mesmo que a temperatura ambiente, provoca perda de fósforo devido a criação de fosfina conforme demonstram os resultados de EDX.

Amostras de InGaAs, parcialmente cobertas por fotoresiste, foram submetidas a plasma de H₂ de baixa densidade de potência (0.28 W/cm²). Resultados de mapeamento da intensidade de fotoluminescência do pico de recombinação banda-banda do InGaAs, indicam uma redução na intensidade do sinal detetado na região descoberta da amostra, proporcional ao tempo de exposição ao plasma. A variação temporal na intensidade do sinal de fotoluminescência desta região, apresenta comportamento similar ao de amostras de InGaAs passivadas com nitreto de silício, demonstrando assim a eficácia do fotoresiste como máscara. Análise similar mostra que, a região exposta ao plasma de H₂, apresenta um aumento na eficiência dos mecanismos de recombinação não-radiativa.

RESPOSTA ÓTICA NÃO LINEAR DE FILMES FINOS DE α -Si:H COM DISCRIMINAÇÃO DE EFEITOS ELETRÔNICOS E TÉRMICOS

RIBEIRO, R. M.; MARGULIS, W.

Departamento de Física, PUC-Rio

LEITE, C. A. F.

Instituto de Física, UFF

GUEDES, I.

IFQSC, USP-SC

Com a finalidade de calcularmos a susceptibilidade elétrica de 3a. ordem ($\chi^{(3)}$) e identificar as contribuições eletrônica e térmica. Medimos a eficiência de autodifração de filmes finos de α -Si:H em 532 nm onde a absorção da luz é bastante significativa ($> 10^5 \text{ cm}^{-1}$). Resolvemos temporalmente a rede transiente criada nos filmes por dois feixes de Nd-YAG, operando em "Q-switching" e "mode-locking" utilizando como "probe" um laser CW de HeNe de 10 mW. Foi possível observar a difração do feixe de HeNe para cada trem de pulsos do laser de Nd:YAG. Mostramos assim ser possível discriminar as contribuições eletrônica e térmica para o cálculo de $\chi^{(3)}$ a partir da observação da formação e decaimento da rede transiente.

Z-SCAN WITH TEMPORAL RESOLUTION

MISOGUTI, L.; FRAGALLI, J. F.; ZILIO, S. C.;

BAGNATO, V. S.

IFQSC, USP - São Carlos

KOLENDA, J.

Vilnius University - Vilnius

The z-scan technique (ZST) provides the possibility to investigate optical refractive and absorptive nonlinearities in the simple way. This technique enables to obtain the real and imaginary part of the third or higher orders nonlinear susceptibility. Using ZST one get the

definition of the sign of the optical nonlinearity, what is not possible to determine from light induced grating (LIG) method, because LIG signal is proportional to the square of $\chi^{(3)}$. The ZST provides the possibility to overpower this and other difficulties. In this works we show a like two colours z-scan technique to investigate the magnitude and temporal behavior of the absorption coefficient and refraction index degenerated as well nondegenerated nonlinearities. This method was employed for experimental investigations of optical nonlinearities in CdSSe microcrystals containing glasses (comercial Shott OG550 filters). The estimated value of the real part of $\chi^{(3)} = 1.910^{-8} \text{ esu}$ at time overlap of pump and probe pulses. The experimental results obtained by other groups are in range $10^{-8} - 10^{-12} \text{ esu}$.

LASERS DE POÇÇOQUÂNTICO TENSIONADO EMITINDO EM 980 nm PARA USO EM AMPLIFICADORES ÓPTICOS À FIBRA.

MACHADO, A. M.; BERNUSSI, A. A.; COGHI, C. A.;

MARTINS, R. B.

CPQD-TELEBRÁS

Os lasers semicondutores de potência com emissão em 980nm demonstraram ser uma excelente alternativa como fonte de bombeio altamente eficiente para os amplificadores ópticos a fibra dopada com Érbio^a. Lasers com emissão neste comprimento de onda são obtidos com estruturas utilizando poços quânticos tensionados de GaAs/InGaAs. Em geral os lasers crescidos sobre substrato de GaAs possuem como camadas confinantes ligas à base de GaAlAs. Porém, a aplicação desta liga em dispositivos de potência apresenta características indesejáveis tais como uma menor dissipação térmica e uma maior facilidade de oxidação dos espelhos, o que aumenta a probabilidade de degradação do dispositivo^b. Neste trabalho apresentamos estruturas laser de potência com emissão em 980nm utilizando a liga de GaInP como camadas confinantes, substituindo a liga de GaAl As. Estas estruturas foram crescidas, processadas e caracterizadas no CPQD-TELEBRAS. Mostramos que a utilização desta liga, apesar de não ser tão bem caracterizada quanto a de GaAlAs, permite a obtenção de lasers com características eletro-ópticas equivalentes aos lasers à base de GaAlAs, com promessas de um melhor desempenho do ponto de vista de confiabilidade. Estruturas tipo "broad area" mostraram valores de corrente limiar da ordem de 180A/cm², eficiência quântica diferencial interna de 70%, coeficiente de perdas internas de 20cm⁻¹ e potências ópticas acima de 350mW/face. Os primeiros resultados obtidos com as estruturas tipo "Ridge Waveguide" são também encorajadores: baixa densidade de corrente limiar (320A/cm²), boa eficiência quântica diferencial externa (65%), potência óptica de até 90mW/face e excelente razão entre as aberturas dos campos afastados

nas direções perpendicular e paralela à junção (1.74:1).

^aC.R. Giles, C. A. Burrus, D.J. Di Giovanni, N.K. Dutta, and G. Reyon, *IEEE Photonics Technol. Letters*, 3, 161 (1981).

^bM. Ohkubo, T. Ijich, A. Iketani, and T. Kikuta, *Appl. Phys. Lett.* 60, 1413 (1992).

Bistabilidade ótica sem cavidade em pocos quânticos acoplados

PEREIRA JR, M. F.

PUC-RJ

Os estudos de bistabilidade ótica em geral são efetuados através da combinação de um meio linear com o feedback proporcionado por uma cavidade. Os mecanismos relevantes normalmente são a absorção saturável e a dispersão do índice de refração em função da intensidade da luz no meio. ^aH.M. Gibbs, *Optical Bistability: Controlling Light with Light*, Academic Press (1985). Porém, a renormalização do gap em semicondutores devida aos efeitos de muitos corpos da origem a um tipo de bistabilidade intrínseca que dispensa a cavidade, a bistabilidade absorptiva. Tal efeito já foi estudado em bulk e pocos quânticos idealizados, usando bandas parabólicas, potenciais de confinamento infinitos e, potenciais Coulombianos blindados simplificados nos limites 3D (bulk) e 2D (QW). ^a Nesse trabalho, usamos um modelo mais realístico para as relações de dispersão e o potencial Coulombiano em pocos quânticos acoplados. ^b A dependência das autoenergias ("exchange and Coulomb hole"), responsáveis pela renormalização do gap e discutida em função dos parâmetros materiais e de design de diferentes pocos quânticos. As consequências para a bistabilidade absorptiva do comportamento fortemente não-linear da renormalização do gap em relação aos parâmetros selecionados e discutida nos diferentes exemplos apresentados.

^aS.W.Koch, H.E. Schmidt and H.Haug, *Journal of Luminescence*, 30 232 (1985); S. Schmitt-Rink, C. Ell, S.W. Koch, H.E.Schmidt, and H. Haug.

^bM.F. Pereira Jr., PhD Thesis, University of Arizona.

Otimização da operação de lasers de pocos quânticos através de efeitos de muitos corpos e engenharia de estrutura de banda

PEREIRA JR, M. F.

PUC-RJ

CHOW, W.

Sandia National Laboratories

KOCH, S.

University of Arizona

Estudos recentes indicam uma melhoria nas características de operação de lasers semicondutores de pocos quânticos com strain nas camadas. Neste trabalho discutimos os mecanismos responsáveis por estas características no regime de quase-equilíbrio através de uma

teoria que combina efeitos de muitos corpos com engenharia de estrutura de banda^a. Apresentamos resultados numéricos mostrando melhorias na corrente limiar de operação, no valor de ganho e da capacidade de modulação a alta velocidade, assim como condições para operação com menores largura de linha e chirp do laser. O aumento médio da curvatura da relação de dispersão dos buracos e o maior responsável pela redução da corrente limiar de operação, e dos fatores de ganho absoluto e diferencial. Este último é responsável pela faixa de modulação prevista. A largura de linha e chirp do laser são regidos pelo fator α ("linewidth enhancement factor"), extremamente dependente dos efeitos de muitos corpos, principalmente da renormalização do gap. Além do mais, o fator α apresenta características bastante diversas nos modos TE e TM, além de depender fortemente do número de estados ligados do poço quântico.

^a M.F. Pereira Jr., W.W. Chow, and S.W.Koch, *Appl. Phys. Lett.* 9, 2941 (1991); W.W. Chow, M. F. Pereira Jr., and S.W.Koch, *Appl. Phys. Lett.* 61, 758 (1992).

ESTUDO DA ESTABILIDADE DA INTENSIDADE DE FOTOLUMINESCÊNCIA EM CAMADAS DE SILÍCIO POROSO

BERNUSSI, A. A.

CPQD - Telebras

BASMAJI, P.; ROSSI, J. C.; MATVIENKO, B.

IFQSC - USP

Emissão de luz na região espectral do visível a temperatura ambiente em camadas de silício poroso tem sido objeto de grande interesse nos últimos anos devido a atraente possibilidade de fabricação de dispositivos emissores para eventuais aplicações em optoeletrônica. A origem desta luminescência é objeto de intensa especulação. Efeitos de confinamento quântico e formação de complexos do tipo $Si-H_x$ têm sido sugerido como possíveis explicações para a luminescência nestes materiais. Apesar da obtenção de camadas de silício poroso com boa eficiência de emissão na região do visível, efeitos de degradação da intensidade de luminescência foram observados. Determinar a origem deste tipo de degradação é de fundamental importância no desenvolvimento de futuros dispositivos baseados nestes materiais. Neste trabalho apresentamos os resultados obtidos com a caracterização através da técnica de fotoluminescência em camadas de silício poroso, obtidas sob diferentes condições de preparação. Observamos que a intensidade de fotoluminescência diminui com o tempo. A taxa de decaimento é função da intensidade de iluminação, da temperatura da amostra, do comprimento de onda de emissão e do ambiente onde são realizadas as medidas. Esta diminuição na eficiência de luminescência é tentativamente atribuída à reações fotoquímicas que ocorrem na superfície durante as me-

didadas de fotoluminescência.

EMISSÃO ÓPTICA DO COMPLEXO EXCITON-FÔNON EM SEMICONDUTORES III-V

IKAWA, F.

IFGW-Unicamp, Campinas, SP, Brasil

TRALLERO-GINER, C.

Universidade de Havana, Havana, Cuba

CARDONA, M.

Instituto Max-Planck, Stuttgart, RFA

Uma nova estrutura foi observada nos espectros de emissão óptica em InP na região em torno de um fônon-LO acima do gap. Essa estrutura é observada somente a baixas temperaturas, até em torno de 35 K. Ela foi atribuída a emissão óptica devido ao complexo formado por exciton e o fônon LO. O acoplamento do exciton-1S mais o fônon LO e o estado contínuo do exciton cria

um estado ressonante na região de um fônon-LO acima do nível discreto 1S e com isso ocorre um acúmulo de cargas nessa região modificando a forma da linha de luminescência. Foi desenvolvido um cálculo teórico de emissão óptica para esse sistema baseado no formalismo de função de Green. O cálculo reproduz muito bem a estrutura observada experimentalmente e inclusive os espectros em função da temperatura. O cálculo explica também porque a estrutura similar não tem sido observada nos espectros de luminescência de GaAs e CdTe.

Workshop: Novos Materiais Semicondutores (SEM) - 20/05/93

Semiconductor Doping (Silicon as a doping element in III-V semiconductors)

OLIVEIRA, A. G. DE

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais

The use of a doping element is basic for both fundamental and applied studies dealing with semiconductor science. A strict control of the doping concentrations is basic in the full range of doping concentration. In the lower limit range the concentrations of spurious unwished doped elements are the parameter to be controlled. Following this low limit range one usually has the conventional and so called one to one correspondence regime when every doping atom produce only a specific kind of defect which in turn produces predictable and uniforme material properties. In the upper limit the doping element incorporates in different crystallographic sites giving origin, to a multiplicity of defects. In this case it is usually quite difficult to predict and control the material properties. Using silicon as doping element in MBE grown AlGaAs alloy samples we intend to illustrate how the multiplicity of defects can be handled. Our approach consists first in studing uniformly doped bulk samples and second in studing planar doping structures where difusion and segregation makes the analysis more complex. Electrical, optical and SIMS measurements have been usually used to study the defect itself and its concentrations. The best known and studied simple defects are: silicon incorporated on group III element and group V element sublattices and the DX center. The complex defects are: silicon on one of the sublattices bounded to an intrinsic defect and finally two silicon atoms incorportaed on both group III and V nearest neighbours sublattices.

DINÂMICA MOLECULAR DE PRIMEIROS PRINCÍPIOS COM FORMA DE CÉLULA VARIÁVEL

WENTZCOVITCH, R. M.

Cavendish Laboratory, Cambridge, UK

O advento da dinâmica molecular de primeiros princípios (Car-Parrinello) não somente renovou as nossas técnicas teóricas de investigação de materiais, mas também alterou as perspectivas dentro de ambas as áreas: estrutura eletrônica e dinâmica molecular. Neste seminário eu vou relatar alguns progressos recentes que permitiram incluir variações de forma de célula (rede de Bravais) na dinâmica molecular de primeiros princípios. Este tipo de dinâmica é extremamente importante à física de minerais sob altas pressões. Como exemplo, eu demonstro a sua aplicação à $MgSiO_3$ -perovskite, a fase mineral que constitui aproximadamente 60% da massa do planeta. Esta estratégia também é útil à investigação de problemas nos quais complexidades estruturais estão relacionadas à estrutura eletrônica, como parece ocorrer com a fase semicondutora de VO_2 . Estes são exemplos simples de uma técnica que promete contribuir de forma significativa ao nosso entendimento dos rearranjos atômicos responsáveis por transições de fases estruturais.

Propriedades ópticas e elétricas de silício poroso

BASMAJI, P.; ROSSI, J. C.; GRIVICKAS, V.; SURDUTOVICH, G.; VITLINA, R.; KOLENDA, J.; MATVIENKO, B.
IFQSC-USP - São Carlos - SP

BERNUSSI, A.

CPqD - Telebrás - Campinas - SP

As propriedades eletrônicas e estruturais de silício poroso (PS) têm recebido recentemente atenção considerável, especialmente a observação da Fotoluminescência visível (FLV) a 300 K. Vários modelos foram propostos para explicar a origem da (FLV) em amostras de PS, mas até hoje não existe um modelo definitivo para este fenômeno. Neste trabalho, estamos investigando as propriedades ópticas e elétricas de diferentes amostras de silício poroso (PS-A com porosidade 70%) (PS-B com porosidade 100%) e (PS-C preparado com metal alcalino). Usando as técnicas de Fotoluminescência (FL), reflectividade, absorção, e Fotocondutividade resolvida em tempo.

Os resultados da (FL) podem ser interpretados da seguinte maneira:

Nas amostras tipo PS-A, a luminescência consiste do efeito excitônico devido aos confinamentos quânticos¹⁻³. Nas amostras tipo PS-B a luminescência observada pode ser relacionada ao efeito da superfície dos polímeros (tipo derivativos de polisilano e "siloxene"). As amostras tipo PS-C apresentam luminescências semelhantes as observadas nas amostras de vidros hidrogenados.

- F. Buda et al. *Phys.Rev.Lett.* 69, 1272 (1992)

- P. Basmaji et al. In *MRS-92 - Boston-USA* a ser publicado.

- P. Basmaji et al. In *ICSE'93 - Paris - França* a ser publicado.

Defeitos Impurezas e Dopagem (SEM)

- 20/05/93

REDUÇÃO DA CONCENTRAÇÃO APARENTE DE DOPANTES EM CAPACITORES MOS APÓS EXPOSIÇÃO À RADIAÇÃO IONIZANTE

SILVA JUNIOR, E. F. DA; VASCONCELOS, E. A. DE
Departamento de Física - UFPE

É largamente conhecido que a exposição de dispositivos MOS à radiação ionizante pode em geral causar a geração de defeitos eletrônicos distribuídos através do SiO₂ e na interface SiO₂/Si. Nestes experimentos em geral assume-se que nenhum tipo de defeito é criado no substrato de silício quando a energia da radiação está abaixo do limiar de danos por ruptura da estrutura cristalina, que é da ordem de 70 KeV para radiação de raios-x. Neste trabalho apresentamos resultados recentes indicando que a concentração efetiva de dopantes, em capacitores MOS expostos a doses de radiação (E=40 KeV) de raios-x acima de 10 Mrad (Si), é reduzida. Esta redução se dá numa estreita faixa próxima à interface SiO₂/Si, apesar da profundidade de penetração da radiação ser ordens de grandeza maior. Além disso, esta redução da concentração apresenta um comportamento dinâmico no tempo, e a eficiência de geração dos defeitos que causam tal redução depende fortemente da distribuição interfacial de stress na estrutura MOS. Os resultados experimentais fortemente indicam que a redução observada na

concentração efetiva de dopantes, pode ser uma consequência da criação de níveis profundos de energia no gap do Si em concentrações suficientes para aprisionar portadores majoritários induzindo uma diminuição na dopagem aparente. Estes resultados também sugerem que a existência de ligações cristalinas enfraquecidas no Si desempenham um importante papel no processo de geração destes defeitos. Este trabalho foi desenvolvido com o apoio do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

ESTADOS HIDROGENOÍDES EM FIOS QUÂNTICOS CILÍNDRICOS DE

GaAs - (Ga, Al)As

LATGÉ, A.

UFF

OLIVEIRA, L. E.

UNICAMP

MONTENEGRO, N.

Univ. del Vale - Colombia

Neste trabalho apresentamos resultados da energia de ligação e das transições infravermelhas associadas com o estado fundamental e os primeiros estados excitados de uma impureza hidrogenoidem fio quântico cilíndrico de *GaAs - (Ga, Al)As*. Para cada função de onda correspondente aos estados doadores adotamos um cálculo variacional dentro do contexto da aproximação da massa efetiva. Resultados para a energia de ligação da impureza foram obtidos para fios de vários raios e impurezas em distintas posições dentro do fio quântico. No caso de estados hidrogenoídes do

tipo $2p_{x,y}$ e $3p_{x,y}$, que são estados que se estendem na direção na qual ocorre o confinamento eletrônico observamos que a medida que o raio do fio é reduzido, estes estados se tornam não ligados (no caso do estado $2p_{x,y}$, para a impureza no centro do fio, isto ocorre para raios da ordem de 300 Å). Este resultado é semelhante ao encontrado anteriormente por Greene and Bajaj^a para o caso de impurezas em poços quânticos.

^ar. L. Greene and K. Bajaj, Solid State Commun. 45, 825 1983

**ESPECTRO DE FOTOLUMINESCÊNCIA
RELACIONADO A IMPUREZAS
ACEITADORAS EM POÇOS QUÂNTICOS
DE GaAs-(Ga,Al)As SOB CAMPO
ELÉTRICO APLICADO**

SANTIAGO, R. B.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF

CASTRO, J. A. E

Universidade Federal Fluminense - UFF

OLIVEIRA, L. E.

Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP

É apresentado um estudo sistemático do espectro de fotoluminescência dos aceitadores em poços quânticos de GaAs-(Ga,Al)As sob a influência de um campo elétrico. O método adotado para determinar a energia dos aceitadores e a função de onda envelope é baseado na aproximação da massa efetiva e um processo variacional. O perfil da curva de fotoluminescência das impurezas depende diretamente do campo elétrico longitudinal aplicado, da temperatura, da energia de Fermi do gás de elétrons na subbanda de condução, e da distribuição dos aceitadores ao longo do poço quântico. Foi encontrado que o perfil deste espectro é essencialmente caracterizado pela presença de três estruturas: um pico associado a transições envolvendo os aceitadores cuja energia de ligação estão localizadas no topo da banda de impurezas, e duas estruturas do tipo van-Hove relacionadas com os aceitadores localizados nas bordas do poço quântico.

**Hardness and Softness no estudo de
aglomerados moleculares de GaAs**

PIQUINI, P. C.; FAZZIO, A.

Universidade de São Paulo - IFUSP

DAL PINO JR, A.

Dep. Física ITA, CTA, São José dos Campos, São Paulo

A combinação do princípio de "Maximum Hardness" (MH) com o princípio de "Hard and Soft Acids and Bases" (HSAB) foi recentemente introduzida como instrumento para prever a estabilidade e reatividade de sistemas poliatômicos. Aplicados no contexto da teoria do Funcional Densidade o HSAB descreve as diferenças locais de reatividade enquanto o MH indica a configuração mais estável para o sistema.

Neste trabalho testamos a validade de procedimento análogo quando aplicado em conjunto com o método de Hartree-Fock "ab-initio". Cálculos "all-electrons" de energia total para o aglomerado de Ga_2As_2 foram realizados para obter a "softness" local do sistema. As previsões obtidas foram testadas realizando experimentos teóricos envolvendo a interação com átomo de Alumínio. Nossos resultados se mostram bastante promissores para o estudo de adsorção de átomos em superfícies cristalinas.

Fenômenos de Transporte em Semicondutores e Heteroestruturas (SEM)
- 20/05/93

**FOTOCONDUTIVIDADE PERSISTENTE
EM ESTRUTURAS SEMICONDUTORAS
III-V COM DOPAGEM PLANAR.**

CORRÊA FILHO, J. A.; SILVA, M. I. N. DA;

OLIVEIRA, A. DE

Universidade Federal de Minas Gerais

Estruturas com dopagem planar, preparadas por MBE, estão sendo utilizadas para a realização de medidas elétricas em presença de luz. Silício foi o elemento escolhido para produzir a dopagem planar em GaAs e $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$. A caracterização elétrica a 77 K é realizada utilizando a técnica Hall. O fenômeno de PPC, já amplamente estudado em $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ com dopagem uniforme, consiste na indução de alterações na concentração de portadores livres utilizando a luz (em nossas experiências foi utilizado um LED com energia de 1,32 eV) e o estudo do retorno à condição de ausência de iluminação que ocorre em tempos relativamente longos (horas ou dias). As primeiras medidas por Fotechall têm revelado a presença dos fenômenos de PPC tanto positiva quanto negativa - aumento e redução da concentração de elétrons livres, respectivamente - e até mesmo ambos em uma mesma amostra, indicando que esses fenômenos são fortemente dependentes das condições de crescimento como temperatura de crescimento e concentração nominal de dopagem. Resultados preliminares sugerem que o fenômeno de PPC está associado à presença de centros DX e, eventualmente, à separação espacial de cargas.

Heteroestruturas AlGaAs/GaAs com mobilidade $390 \times 10^3 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ crescidas por MBE
 ROSSI, J. C.; LUBESHEV, D. I.; GUSEV, G.; RUNHO, A.; FERREIRA, J. P.; GONZALES, P.; BASMAJI, P.

IFQSC-USP - São Carlos

OLIVEIRA, J. B.

IFGW - Unicamp - Campinas - SP

Os objetivos destas estruturas são entender as propriedades quânticas tais como "Coulomb blockade" e também para aplicação em dispositivos tipo transistor de alta mobilidade a efeito de campo elétrico (HEMT). Por isto foram realizados vários crescimentos para determinar as condições ótimas.

As amostras crescidas por MBE - MECA 2000, consistem em $0.5 \mu\text{m}$ camada tampão de GaAs, seguida em camada não dopada de $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ com espessura d_s , e finalmente $350/\text{AA}$ camada de $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ dopado de Si e $0.1 \mu\text{m}$ camada topo de GaAs.

Usando a técnica de magneto resistência a 4.2K foram determinadas as mobilidades e as concentrações de elétron nestas estruturas em função da espessura d_s da camada AlGaAs não dopada. Para $d_s = 260 \text{ \AA}$ a mobilidade do elétron chega a $390.000 \text{ cm}^2/\text{v}\cdot\text{s}$. Quando $d_s = 80 \text{ \AA}$ a mobilidade chega a $132.000 \text{ cm}^2/\text{v}\cdot\text{s}$ a 4.2K. A influência da barreira AlAs neste tipo de estrutura foi também investigado e revela que a mobilidade a 4.2k é da ordem de $100.000 \text{ cm}^2/\text{v}\cdot\text{s}$.

A partir destes valores estamos elaborando poços quânticos com dopagem uniforme e planar.

PROPRIEDADES ELÉTRICAS DE ALGAAS/GAAS HETEROESTRUTURAS E POÇOS QUÂNTICOS CRESCIDOS SELETIVAMENTE SOBRE GAAS ORIENTADO (311)A E (3LL)B POR MBE

LUBYSHEV, D. L.; GUSEV, G.; ROSSI, J. C.;

RUNHO, A.; FERREIRA, J. P.; BASMAJI, P.

IFQSC-USP - São Carlos - SP

Recentemente foi demonstrado que os fios e pontos quânticos podem ser fabricados diretamente por crescimento epitaxial usando substrato de GaAs com orientação (311)A, (311)B, (211), (111), etc. Estes substratos com orientação (311), por exemplo, durante crescimento forma fios quânticos de 3nm de periodicidade e 1nm de altura.

Nesta comunicação, apresentamos os resultados preliminares do efeito Hall das heteroestruturas AlGaAs/GaAs.

As amostras foram crescidas por MBE - MECA 2000 sobre substrato GaAs com orientação $\langle 100 \rangle$, $\langle 311 \rangle A$ e $\langle 311 \rangle B$ simultaneamente. Elas consistem de uma camada de GaAs e de AlGaAs não dopado com espessura d_s (de ordem de 40 - 160 Å), finalmente camada de AlGaAs dopada uniforme com silício e algumas com dopagem planar.

Os resultados de efeito Hall mostram que a incorporação do Si na superfície $\langle 100 \rangle$ e $\langle 311 \rangle B$ o Si se incorpora como aceitador. Para $d_s = 40 \text{ \AA}$ foi difícil medir a concentração e a mobilidade porque o sistema $\langle 311 \rangle A$ é anisotrópico, semelhante efeito foi observado nas amostras AlGaAs planarmente dopadas, crescidas sobre $\langle 311 \rangle A$ onde o sistema é completamente anisotrópico.

MAGNETOTRANSPORT IN MULTIQUANTUM WELL SYSTEM.

GUSEV, G. M.; ROSSI, J. C.; LUBYSHEV, D. I.;

BASMAJI, P.

IFQSC-USP

OLIVEIRA, J. B. B.

Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física

PINKSE, P.; PORTAL, J. C.

Service National des Champs Intenses, Centre National de Recherche Scientifique, F-38042, Grenoble,

INSA-Toulouse, 31077, France

Recently the magnetotransport in the systems with 2-3 quantum wells with two-dimensional electron gas separated by tunnel barriers have been studied [1,2]. Fractional quantum Hall effect with even denominator [1], electron-electron drag [3] have been observed in double layer system. In this case the growth and investigation of system with more than two quantum wells has attracted much interest because of the possibility to increase the electron-electron interaction or observe a superlattice effect.

In present work we report the magnetotransport study of the samples with $N=2,3,4,5,6$ GaAs quantum wells with two-dimensional (2D) electron gas separated by thin AlGaAs barriers. The samples were grown by Molecular Beam epitaxy. The width of the each quantum well was 100 Å, the thickness of the barrier AlGaAs - 50 Å. We measured magnetoresistance in Van der Pauw geometry in magnetic fields up to 17 T at temperatures between 1.7 and 4.2 K.

The total Hall concentration at high magnetic field was found to be lower than the electron density extracted from Shubnikov oscillations multiplying by a number of quantum well $n_{H}^{total} < N * n_s^{s, dh}$. Slight decrease of $n_s^{s, dh}$ with increase of N has been found when n_{H}^{total} kept be constant. We suggested, that $n_s^{s, dh}$ is electron density in 1-2 central wells, and other wells have a lower concentration. The features in Shubnikov oscillations because of the contribution to the magnetoconductivity of these wells have been found.

1. J.P.Eisenstein et al, Phys.Rev.Lett., 68, 1383 (1992).

2. J.Jo et al, Phys.Rev.B, 69, 9776 (1992).

3. T.J.Gramila et al, Surf.Sci., 263, 446 (1992).

**FLUTUAÇÃO DA CORRENTE ELÉTRICA
EM SISTEMAS DE BAIXA
DIMENSIONALIDADE FORTEMENTE
CORRELACIONADOS**

LATGÉ, A.; ANDA, E.
UFF

O ruído no transporte dos portadores de cargas em heteroestruturas de dupla barreira unidimensionais é estudado neste trabalho usando-se o formalismo de Keldysh para calcular as funções de Green fora do equilíbrio. Como é bem sabido, o transporte de carga em heteroestruturas de baixa dimensionalidade sofre um bloqueamento (bloqueamento de Coulomb) devido a presença do elétron localizado no poço, o que produz uma fenomenologia muito interessante no transporte elétrico. Propomos um Hamiltoniano tipo impureza de Anderson para descrever este sistema e adotamos a aproximação da analogia de liga. A flutuação da corrente em função da frequência e do potencial externo aplicado a heteroestrutura, e o processo de multiestabilidade produzido pela correlação eletrônica são analisados. Propõe-se também um experimento para o estudo dos resultados teóricos obtidos.

**DETERMINAÇÃO DA VELOCIDADE DE
RECOMBINAÇÃO DOS PORTADORES
MAJORITÁRIO EM FILMES DE a-Si:H
PELA TÉCNICA DE SSPG.**

MISOGUTI, L.; FRAGALLI, J. F.; NAKAGAITO, A.
N.; BAGNATO, V. S.
IFQSC, USP - São Carlos
KOLENDA, J.
Vilnius University - Vilnius

A técnica conhecida como SSPG (Steady State Photo-carrier Grating technique) foi introduzido recentemente por Ritter et al, permite a medida do comprimento de difusão ambipolar dos fotoportadores em filmes finos de silício amorfo hidrogenado (a-Si:H). Esta técnica é baseada na criação em estado estacionário de uma grade de fotoportadores de pequena amplitude sobre um fundo uniforme de fotoportadores. Para produção da grade de fotoportadores utilizamos um laser de He-Ne sintonizável. Esta mesma técnica pode ser utilizada para determinação da velocidade de recombinação superficial em filmes de a-Si:H com a utilização de comprimentos de ondas diferentes para produção da grade de fotoportadores. As considerações teóricas e os resultados são analisados.

**O PROCESSO DE RECOMBINAÇÃO DOS
PORTADORES FOTOGERADOS NAS
LIGAS DE SILÍCIO E GERMÂNIO
AMORFOS HIDROGENADOS**

GRAEFF, C. F. DE O.; CHAMBOULEYRON, I. E.
UNICAMP

BRANDT, S. M.; STUTZMANN, M.
MPI-FKF Stuttgart, Germany

Neste trabalho apresentamos o processo de recombinação dos portadores foto gerados nas ligas de silício e germânio amorfos hidrogenados (a-Si_{1-x}Ge_x:H), elucidados por medidas de Spin Dependent Photoconductivity (SDPC). O estudo compreende todo o espectro de composições das ligas a-Si_{1-x}Ge_x:H (0 < x < 1). As amostras foram crescidas na forma de filmes finos, com espessura típica de 1 μm. A análise dos formatos de linhas (line shapes), e do valores do fator g encontrados, indicam que o processo de recombinação dominante, para 100 K < T < 300 K, é o tunelamento de elétrons da cauda da banda de condução para uma ligação não pendente (dangling bond DB). Os resultados apontam que incorporação mesmo de pequenas quantidades de germânio (11%) provocam grandes mudanças no processo de recombinação, seja pela introdução de DBs do germânio, ou pelo alargamento da banda de condução. As mudanças provocadas pela incorporação do germânio, são responsáveis pela rápida deterioração das propriedades opto-eletrônicas nas ligas a-Si_{1-x}Ge_x:H com o incremento de x.

**Tempo de vida em semicondutores através de
reflectância.**

PIRES, M. P.
Departamento de Física - PUC-Rio
WEID, J. P.; SOUZA, P. L.
CETUC - PUC-Rio

Usando um laser Nd-YAG dobrado em frequência como feixe de bombeio e como feixe de prova um laser semiconductor gain-switched, com o comprimento de onda ressonante com o gap do material, mede-se o tempo de vida dos portadores de uma amostra semicondutora. Este método utiliza o batimento dos dois feixes em baixa frequência para modular, também em baixa frequência, a refletividade na superfície da amostra, de forma a ter a informação do tempo de vida inserida na refletividade. Determina-se, então, o tempo de vida em camadas espessas de AlGaAs e em poços quânticos de Al_xGa_{1-x}As/Al_yGa_{1-y}As e compara-se estes resultados com resultados medidos através de outros métodos.

**Uma nova abordagem para o efeito de
"overshoot" de temperatura dos fonons LO**

REGO, L. G. C.; ALGARTE, A. C. S.
UNICAMP

Estudamos a dinâmica de portadores e fônons quentes gerados por pulsos ópticos de 1 ps no cristal de GaAs. Baseados na blindagem eletrônica da interação polar, propomos um novo modelo capaz de descrever adequadamente o fenômeno de "overshoot" de temperatura dos fônons LO. Esta nova abordagem, distinta da anterior (D.S. Kim e P. Yu, PRL 64 1990) por não levar em

conta o espalhamento intervalas, mostra que durante os primeiros instantes do processo de fotoexcitação de portadores a blindagem é pequena e os fônons quentes são intensamente produzidos. O aumento da densidade do plasma torna o sistema blindado e diminui a intensidade da interação portadores-fônons LO, mantendo-os excitados por mais tempo.

TUNELAMENTO RESSONANTE FOTO-ASSISTIDO

CHITTA, V. A.; BEKKER, R. DE; MAAN, J. C.
Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, HML, B. P. 166, F-38042 Grenoble CEDEX 9, France.

HAWKSWORTH, S.; CHAMBERLAIN, M.; HENINI, M.
Department of Physics, Nottingham University, Nottingham NG7 2RD, UK.

HILL, G.
Department of Electronic and Electrical Engineering, University of Sheffield, Sheffield S1 3JD, UK.

A resposta de um dispositivo semiconductor de barreira dupla à radiação Infra-Vermelho Distante (IVD) é estudada experimentalmente e teoricamente. Estes dispositivos são normalmente caracterizados por uma curva corrente-tensão (I-V) extremamente não-linear. É mostrado que se a energia da radiação é comparável à não-linearidade da curva I-V, a resposta obtida teoricamente, supondo-se que o tunelamento é coerente, depende dessa energia (resposta quântica). Por outro lado, se a energia é muito menor, a resposta é proporcional à derivada segunda da curva I-V (retificação clássica).

Três estruturas são estudadas usando-se IVD (2.5 meV até 13.6 meV) de um laser pulsado (pulso de ≈ 100 ns e ≥ 10 W). As amostras tem barreiras de $\text{Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$ de 5 nm de largura e poços quânticos de GaAs de 5, 60 e 120 nm de respectivamente.

A resposta IVD, medida em função da tensão aplicada, mostra um pico no início e outro no vale da região de RDN. Nos dispositivos de poços largos, essas duas regiões, para RDN consecutivas, se confundem e apenas um pico é observado. Para essas amostras, a resposta IVD não é proporcional à derivada segunda da curva I-V e portanto, não pode ser explicada como simples retificação clássica. Apesar disso, nenhuma dependência com o comprimento de onda da radiação pode ser observada.

A incompatibilidade dos resultados obtidos com a retificação clássica e com a resposta quântica exclui o tunelamento coerente como sendo o mecanismo dominante de transporte. A ausência de dependência da resposta com a energia da radiação, é atribuída ao espalhamento dos portadores durante o tunelamento. Isto destrói a interação coerente entre a radiação e as funções de onda eletrônica, mascarando a dependência da resposta com a energia do IVD. Conclui-se assim que o tunelamento é predominantemente sequencial, e determina-se também

um valor limite para o tempo característico de espalhamento.

Magnetoresist encia negativa de heterojunções n-AlGaAs/GaAs sob campo magnético planar

ALVES, A. R.

Universidade Federal de Viçosa - UFV

CHAVES, A. S.; GUIMARÃES, P. S. S.; OLIVEIRA, A.

DE

Universidade Federal de Minas Gerais - UFMG

HENINI, M.

University of Nottingham, Nottingham, UK

MENEZES, E. A.

IFGW, UNICAMP, Campinas, SP

Estudou-se amostras n-AlGaAs/GaAs de alta mobilidade (crescidas por MBE) sob a ação de campos magnéticos planares à interface dessa heterojunção. Além da esperada assimetria na resistividade do gás de elétrons bidimensional (2DEG) em relação à inversão de sentido do campo magnético, observou-se também a presença de uma magnetoresist encia negativa muito intensa em algumas amostras, para um determinado sentido do campo. Esse fenômeno inesperado foi atribuído à qualidade da interface da heterojunção, isto é, ao ser defletido na direção oposta à barreira, o elétron se afasta dos centros espalhadores oriundos dos defeitos da interface e a resistividade do 2DEG diminui. Para valores não muito elevados do campo, esse efeito concorre vitoriosamente com a magnetoresist encia positiva do GaAs. O efeito tende a desaparecer nas amostras de mobilidade muito elevada podendo então ser utilizado como um indicador da qualidade das interfaces dessas estruturas.

MAGNETO-TRANSPORTE EM SISTEMAS BI-DIMENSIONAIS

OLIVEIRA, J. B. B. DE; MENDONÇA, C. A. C. DE;
PLENTZ, F.; SHULZ, P. A.; MENESES, E. A.

DFESCM - IFGW - UNICAMP

OLIVEIRA JR, A. T.; SAITO, M.

Escola Politécnica (LME) - USP

Medidas de Magneto-Transporte (Oscilações Shubnikov-de Haas, SdH e Efeito Hall Quântico, EHQ) constituem uma poderosa técnica para testar a bidimensionalidade de sistemas confinados e caracterizá-los eletronicamente. Neste trabalho apresentamos resultados relativos a um conjunto de heterojunções tipo $\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}/\text{GaAs}$ (estrutura HEMT) com diferentes espaçamentos entre a camada de $\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ dopada e o gás de elétrons bi-dimensional e também para um sistema de poços quânticos com dopagem δ -Si. Todas as amostras foram crescidas por MBE e as medidas foram realizadas a 2.0 K em campo magnético entre 0 e 13 Tesla. No primeiro conjunto estudamos a localização de estados através da análise das larguras dos platôs Hall.

Quanto ao segundo sistema, estudamos a ocupação das sub-bandas determinando, por meio de transformadas de Fourier, a ocupação de cada uma.

MAGNETOTRANSORTE E CONDUÇÃO ELÉTRICA EM GaAs COM DOPAGEM PLANAR DE Si NO LIMITE DE BAIXAS CONCENTRAÇÕES

MEDEIROS, S. M. DE; GUIMARÃES, P. S. S.; SAMPAIO, J. DE; RIBEIRO, G. M.; DEOLIVEIRA, A. G. DE

Departamento de Física, ICEX, Universidade Federal de Minas Gerais

Sistemas desordenados, tais como semicondutores com baixa concentração de dopantes, apresentam uma grande variedade de fenômenos físicos interessantes. De particular interesse são os processos de condução elétrica nestes sistemas. Em baixas temperaturas, se a desordem e concentração de dopantes são tais que o sistema possa ainda ser considerado como "metálico", é necessário considerar as correções quânticas para a condutividade elétrica devido à localização fraca dos elétrons e à influência da desordem na blindagem da interação elétron-elétron. No caso em que o material é isolante a $T=0K$, processos de saltos eletrônicos são responsáveis pela condução elétrica a baixas temperaturas.

Apresentamos neste trabalho medidas da magnetoresistência até 17 Tesla, condutividade elétrica e concentração de portadores de carga em função da temperatura na faixa 0,3K - 300K em amostras de GaAs com diferentes níveis de dopagem planar de silício. Estes dados são discutidos à luz dos fenômenos descritos acima.

TUNELAMENTO RESSONANTE DE ELÉTRONS ENTRE DOIS POÇOS QUÂNTICOS ASSIMÉTRICOS COM DOPAGEM DELTA.

SOUZA, M. A. R.; LEÃO, S. A.; DEGANI, M. H.
USP-Instituto de física e química de São Carlos

Nos últimos anos o tunelamento ressonante através de poços quânticos tem chamado a atenção devido à sua possibilidade de aplicação a dispositivos eletrônicos de alta velocidade. Nós investigamos o tunelamento de elétrons entre dois poços quânticos assimétricos ($Al_xGa_{1-x}As - GaAs$) com dopagens delta centradas em cada poço. São aplicados campos elétricos longitudinais (direção de crescimento) e campos magnéticos transversais para pesquisar as condições de ressonância. A equação de Schrödinger é resolvida autoconsistentemente com a equação de Poisson na aproximação de Hartree usando-se o "Split Operator Method", onde as funções de onda do sistema são obtidas através da evolução temporal no domínio de tempo imaginário de funções de onda iniciais. São também consideradas

correções de troca e correlação.

TUNELAMENTO DE BURACOS EM HETEROESTRUTURAS SOB A AÇÃO DE CAMPOS MAGNÉTICOS PARALELOS.

TAVARES, M. R. DA S.; MARQUES, G. E.
Departamento de Física Universidade Federal de São Carlos

Tunelamento de buracos em dispositivos de dupla barreira sob a influência de campos magnéticos paralelo ao plano das interfaces, tem sido estudado tanto sob o ponto de vista teórico quanto experimental^a. Recentes medidas da corrente de tunelamento sob a ação de campos magnéticos, tem evidenciado aspectos peculiares da estrutura eletrônica nestes dispositivos semicondutores. Usando o método da matriz transferência associado com o método $k.p$, para os quatro estados degenerados da banda de valência, na aproximação de Luttinger, estamos desenvolvendo um modelo de cálculo dos coeficientes de transmissão nestes dispositivos. Através da dependência das posições dos picos nos coeficientes de transmissão com a intensidade do campo magnético aplicado, podemos determinar as dispersões magnéticas dos estados eletrônicos ressonantes nestas heteroestruturas. Poderemos também obter a corrente de tunelamento através dos coeficientes de transmissão.

^aR.K.Hayden, D.K.Maude, L.Eaves, E.C.Valadares, M.Henini, F.W.Sheard, O.H. Hughes, J.C. Portal, and L.Cury, Phys. Rev. Lett. 66,1749 (1991)

Teoria de Elétrons em Estruturas de Semicondutores (SEM) - 20/05/93

Relaxação atômica e estados eletrônicos em super-redes ultrafinas $(GaP)_n(Ge_2)_n/(Si_2)_n$ e $(InP)_n(Ge_2)_n/(Si_2)_n$.

CASAGRANDE, D.; FERRAZ, A. C.
Instituto de Física da Universidade de São Paulo - IFUSP.

Realizamos neste trabalho, investigações teóricas de relaxação atômica e estados eletrônicos nas super-redes de camadas ultra-finas ($n \leq 3$) de $(GaP)_n(Ge_2)_n/(Si_2)_n$ e $(InP)_n(Ge_2)_n/(Si_2)_n$, considerando cristais com crescimento nas direções [001] e [110]. Os cálculos são baseados na teoria do funcional densidade, com aproximação local para a função de correlação-troca e formalismo de pseudopotencial "ab-initio" autoconsistente. As posições atômicas foram ainda relaxadas, de acordo com a força existente nos átomos, utilizando o método "optimized steepest descent" acoplado ao método de Car-Parrinello. O tamanho das ligações para interfaces relaxadas está de acordo com o conceito de

raio covalente de Pauling. A interface não-polar foi encontrada como sendo mais estável do que a interface polar. A entalpia de formação e estrutura de faixas de energia das super-redes polares e não-polares são discutidas em termos dos diferentes arranjos espaciais dos "nonocted wrong-bonds" nas interfaces.

DEGENERACY EFFECTS IN THE CLASSICAL APPROXIMATIONS TO FREE CARRIER ABSORPTION

CRUZ, J. M. R.; AMATO, M. A.

Departamento de Física, Universidade de Brasília 70910 Brasília DF

Infrared optical properties of semiconductors are very well described by the classical Drude model of free carriers. In applying this model it is generally assumed that the average over the carrier distribution of the corresponding complex dielectric function can be transferred to the momentum relaxation time with negligible error. In fact this has been demonstrated by Schumann and Philips [1] in the case of ionized impurity scattering. Their work, however, assumed Boltzmann statistics, even at carrier densities where degenerate statistics should be used. In this work the effects of degenerate statistics to the infrared reflectivity are examined. It is shown, in the spherical band approximation, that even when degenerate statistics is used the transfer of the average from the overall expression of the dielectric function to the momentum relaxation time indeed results in negligible error, not only for ionized impurity scattering but for acoustic phonon scattering as well. At high carrier densities, however, major differences are observed in the reflectivity between the non-degenerate and degenerate models, since the momentum relaxation time becomes density dependent as the system becomes degenerate. The importance of these results to experiments of time-resolved reflectivity of highly excited semiconductors is discussed.

[1] P.A.Schumann Jr. and R.P. Phillips, *Solid-State Electron.* 10, 943 (1967).

ESTADOS DE WANNIER-STARK EM NANOESTRUTURAS

FAGOTTO, E.; SCHULZ, P. A.; BRUM, J. A.

Instituto de Física "Gleb Wataghin" - UNICAMP

Combinando técnicas de crescimento epitaxial e litografia é possível, hoje, construir nanoestruturas de semicondutores que apresentam confinamento dos portadores livres em mais de uma dimensão, dando origem a gases de elétrons unidimensionais ou mesmo 0-dimensionais. Graças a alta mobilidade das amostras, é possível observar efeitos de transporte balístico. Recentemente, foi possível observar a formação de uma superrede através de uma estrutura unidimensional formada por uma série de "caixas" conectadas. Resultados

experimentais evidenciaram a existência de gaps nestas estruturas^a. A existência de dois tipos de gaps foi demonstrada teoricamente^b. Um desses gaps origina-se na periodicidade da superrede. O outro é uma manifestação da quantização nas caixas quânticas: quando um estado quase confinado (virtual) da caixa é degenerado com um estado unidimensional da estrutura há um efeito de interferência destrutiva, formando um gap na transmissão.

Neste trabalho nós calculamos os efeitos de um campo elétrico aplicado na direção da superrede. Três estruturas são consideradas: uma constrição simples, uma constrição com uma caixa quântica e uma superrede de caixas quânticas. No caso da constrição simples, o campo elétrico tende a destruir a quantização da transmissão^c. Quando uma caixa quântica está inserida na constrição, observa-se o efeito Stark nos estados confinados e virtuais da caixa quântica: no primeiro caso isto se manifesta com uma variação para menores energias do pico de transmissão. No segundo caso, observamos uma variação no gap de transmissão. Finalmente, os efeitos do campo elétrico na superrede de caixas quânticas cria estados de Wannier-Stark^d. Estes estados são responsáveis pela quebra da estrutura de banda em uma série de estados discretos. Isto leva ao desaparecimento dos gaps de transmissão, os quais são preenchidos pelos estados discretos.

^aL. P. Kouwenhoven et al., *Phys. Rev. Lett.* 65, 361 (1990).

^bJ. A. Brum, *Phys. Rev.* B43, 12082 (1991).

^cB. J. van wees et al., *Phys. Rev. Lett.* 60, 848 (1988).

^dJ. Bleuse et al., *Phys. Rev. Lett.* 60, 220 (1988).

Amostras de GaAs com dopagem planar de Si (δ -doping) e o poço de potencial de Pöschl-Teller

ALVES, A. R.

Universidade Federal de Viçosa - UFV

O poço de potencial de Pöschl-Teller apresenta solução analítica para os seus níveis de energia. Este poço pode ser feito tão profundo ou estreito quanto se deseje, possibilitando então uma boa aproximação para o poço presente em amostras semicondutoras de GaAs com dopagem planar de Si (crescidas por MBE), cuja determinação dos níveis de energia envolve cálculos numéricos bastante complexos.

Neste trabalho, mostra-se que essa aproximação torna-se possível mediante um modelo que relaciona a profundidade e a largura daquele poço com a densidade eletrônica bidimensional da amostra semicondutora e o tempo de abertura da célula de Si (MBE), respectivamente. Sendo esses parâmetros de fácil determinação, o resultado torna-se uma interessante ferramenta para os cálculos dos níveis de energia dos poços presentes nas referidas amostras.

Estruturas Eletrônicas das Super-redes $Ga_{1-x}In_xAs/GaAs(InAs)$

SILVA, R. C. DA; FERRAZ, A. C.

Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Estudamos o comportamento das estruturas eletrônicas das ligas ordenadas $Ga_{1-x}In_xAs$ e as estruturas de equilíbrio das super-redes de liga $(Ga_{1-x}In_xAs)_3(GaAs)_3$ e $(Ga_{1-x}In_xAs)_3(InAs)_3$, em função das concentrações (x) e dos parâmetros de rede. Utilizamos nesse trabalho o método do pseudopotencial autoconsistente dentro da aproximação de cristal virtual (VCA) com cálculo da energia total, no esquema de densidade local (LDA), e forças de Hellmann-Feynman. Nas super-redes de liga, crescidas sob vários substratos ao longo da direção [001], as configurações relaxadas foram obtidas a partir da minimização de forças significativas existentes, adicionalmente ao cálculo da energia total dos sistemas. Analisamos a dependência das faixas de energia em relação aos parâmetros de rede e concentrações (x). Observamos uma pequena variação nos comprimentos de ligação das estruturas relaxadas e também uma transição direta entre faixas para todas as configurações estequiométricas.

Propriedades Eletrônicas das Super-redes $(Ga_{1-x}In_xP)_3(Ga_{1-y}In_yP)_3$

MIWA, R. H.; FERRAZ, A. C.

** Instituto de Física da Universidade de São Paulo*

As propriedades eletrônicas das super-redes compostas por ligas semicondutoras $(Ga_{1-x}In_xP)_3(Ga_{1-y}In_yP)_3$, onde x e y são as concentrações estequiométricas, são analisadas utilizando-se do método do pseudopotencial local autoconsistente com o cálculo de força e energia total. Os resultados mostram uma pequena variação nos comprimentos de ligação entre os átomos de $Ga_{1-x}In_xP$ e $Ga_{1-y}In_yP$, para diferentes valores de concentrações x e y. Também verificamos que as faixas de energia e o tipo de transição (direta ou indireta) são regidos pelo material de maior densidade de estados no fundo da faixa de condução e pelo parâmetro de rede no qual é crescido a super-rede. Observamos também que as super-redes crescidas com o parâmetro de rede dos materiais puros, do GaP (5.452 angstroms) ou do InP (5.870 angstroms), têm um ordenamento nos primeiros autovalores da faixa de condução calculados em alguns pontos especiais na primeira zona de Brillouin (ZB). Através da estrutura de faixas de energia verificamos a atuação do potencial de ordenamento (perturbação) na formação das super-redes, observando-se a quebra da degenerência no ponto Z da ZB. Observando-se a energia total do sistema verificamos o comportamento da estabilidade quanto a formação de algumas super-redes.

Dependência das faixas de energia de BP, AIP, GaP e InP com a pressão hidrostática

WATARI, K.

Instituto de Física da Universidade de São Paulo

ALVES, J. L. A.

*Fundação de Ensino Superior de São João Del Rei**DCNAT - Caixa Postal 110 São João Del Rei MG Brasil*

FERRAZ, A. C.

Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Considerando a possibilidade atual de se realizar medidas ópticas em cristais sob altas pressões hidrostáticas (acima de 25GPa), tem sido de considerável interesse, as investigações de dependência dos "gaps" ópticos de semicondutores com a pressão hidrostática. Nos semicondutores III-V, essa dependência das energias de transição com a pressão, tem demonstrado um comportamento não-linear ou sub-linear. Esta não linearidade está relacionada as interações elétron-fônon e é de grande interesse se comparar os coeficientes experimentais (linear e quadrático) com aqueles obtidos de cálculos teóricos. Tem sido ainda observado, o cruzamento dos mínimos das faixas de condução dos pontos Γ e X em compostos III-V sob pressão. Isto significa por exemplo uma mudança de transição direta para indireta, com um correspondente decréscimo da eficiência em luminescência. Os cálculos destes compostos semicondutores foram baseados na teoria do funcional densidade com aproximação local para o termo de correlação e troca, onde os autovalores resultantes da solução das equações de Kohn-Sham, são tomadas diretamente para se interpretar o espectro de excitação dos sólidos. Usamos então neste formalismo, o método de Car-Parrinello condicionando as funções de onda à autoconsistência, método este que aumenta significativamente a eficiência computacional dos cálculos com ondas planas e pseudopotenciais. Desta forma analisamos a dependência com a pressão dos seguintes compostos semicondutores: BP, AIP, GaP e InP.

DINÂMICA DE PORTADORES QUENTESNA LIGA $Al_{0.48}Ga_{0.52}As$

REGO, L. G. C.; ANDRADE, L. H. F.; CRUZ, C. H. B.

UNICAMP

Desenvolvemos um modelo teórico que descreve a geração, e subsequente dinâmica, de portadores fotoexcitados por pulsos ópticos de femtossegundos em uma amostra de $Al_{0.48}Ga_{0.52}As$. Para esta composição da liga o gap do material é indireto. A taxa de ocupação dos vales laterais e a evolução de algumas das propriedades termodinâmicas dos portadores foi calculada como função do tempo. Calculamos também a curva de transmissão diferencial da amostra em função do tempo e obtivemos um bom acordo com as medidas experimentais realizadas pela técnica de "excitação e prova", de modo

que estabelecemos valores para as constantes de acoplamento entre elétrons do vale Γ e os vales laterais X e L .

Trabalho financiado pelo CNPq, Fapesp e Finep.

ESTABILIDADE E DIAGRAMAS DE FASE DE NOVAS LIGAS SEMICONDUTORAS

OSÓRIO, R.

Universidade de Brasília

Desenvolvimentos recentes na mecânica estatística de ligas semicondutoras cristalinas serão apresentados.

(1) *Diagramas de fase de ligas pseudobinárias*. Ligas do tipo III-V/III'-V (como GaP/InP) ou do tipo III-V/III-V' (como InAs/InSb) não apresentam fases ordenadas em equilíbrio no estado sólido.^a Mecanismos ligados a fenômenos de *superfície* são portanto prováveis agentes de ordenamentos observados em ligas epitaxiais deste tipo.

(2) *Uma teoria de ordem induzida por efeitos de superfície*. Conseqüências energéticas da dimerização de cátions na superfície de GaP/InP conduzem a parâmetros de ordem coerentes com o arranjo atômico do tipo "cobre-platina", que é observado experimentalmente.^b

(3) *Separação de fases em ligas ternárias III-V/IV*. Cálculos de interações efetivas entre átomos de GaAs e Ge, baseados no método de pseudopotenciais na aproximação da densidade local, levam a um estado de equilíbrio segregador.^c Isto mostra que situações de não-equilíbrio prevalecem em ligas GaAs/Ge.^d

(4) *Soluções sólidas em ligas pseudoternárias I-III-VI/II-VI*. Por outro lado, novos diagramas de fase de primeiros princípios conduzem às primeiras soluções sólidas em equilíbrio de semicondutores com estruturas diferentes.^e Isto acontece para ligas calcopirita/zincblende, como CuInSe₂/ZnSe, de grande interesse na tecnologia fotovoltaica. Uma nova fase metaestável intermediária é prevista para este material.

^aS.-H. Wei, L. G. Ferreira, and A. Zunger, Phys. Rev. B **41**, 8240 (1990).

^bR. Osório, J. E. Bernard, S. Froyen, and A. Zunger, Phys. Rev. B **45**, 11173 (1992).

^cR. Osório, S. Froyen, and A. Zunger, Phys. Rev. B **43**, 14055 (1991).

^dR. Osório and S. Froyen, Phys. Rev. B **47**, 1889 (1993).

^eR. Osório, Z. W. Lu, S.-H. Wei, and A. Zunger, Phys. Rev. B (no prelo).

EFEITO DA SUSCEPTIBILIDADE NAO-LINEAR DE ALTA ORDEM NO DESEMPENHO DE ACOPLADORES DIRECIONAIS CONSTRUÍDOS A PARTIR DE VIDROS SEMICONDUTORES
SOMBRA, A. S. B.; FEITOSA, C. A. C.
LABORATORIO DE OTICA NAO LINEAR E LASERS
DEPARTAMENTO DE FISICA UNIVERSIDADE

FEDERAL DO CEARA

Semicondutor dopando vidro tem despertado grande interesse nos últimos anos para aplicação em novos dispositivos óticos com aplicação em processamento de dados óticos, chaveamento não linear, modulação de fase e biestabilidade. Comparado com cristais, vidros são materiais atrativos para muitos destas aplicações tecnológicas por causa do baixo custo e relativa facilidade de fabricação. Neste trabalho estudamos o efeito da susceptibilidade não linear de alta ordem no caráter (estabilidade) do soliton que se propaga neste tipo de material (1,2,3). Realizamos simulações numéricas para estudar a estabilidade destes solitons e o desempenho de acopladores direcionais não lineares construídos a partir destes materiais. Observamos o aparecimento de regiões de biestabilidade nestes solitons. Regiões de valor único também foram observadas. O estudo completo da estabilidade destas soluções será apresentado. O critério de estabilidade de Kaplan foi utilizado e mostrou-se bastante efetivo. Partindo-se de um material com estas características estudei o comportamento de um acoplador direcional construído a partir deste material. As consequências destes efeitos em futuros desenvolvimentos destes dispositivos são discutidos. Os efeitos de propagação de solitons de alta ordem nestes tipos de materiais são discutidos. Efeitos de saturação no índice de refração e efeitos absorptivos foram também estudados. (1) A. S. B. Sombra, Optics Communications, 94,92(1992) (2) A. S. B. Sombra, Solid State Comm., 82,805(1992) (3) A. S. B. Sombra, Opt. and Quantum Elect., 22,335(1990) Trabalho financiado pela CAPES

Ultrasonic attenuation in semiconductor quantum heterostructures under a high magnetic field.

RODRIGUES, C.; NUNES, A. C.

Departamento de Física - Universidade de Brasília

A theory of ultrasonic attenuation in a quasi-two-dimensional electron gas in quantum well semiconductor heterostructures in the presence of a quantizing magnetic field is presented. The effect of the high magnetic field on the ultrasonic attenuation coefficient is studied in the extreme quantum limit, when all the electrons are accommodated in the lowest Landau level and the lowest electron subband. Although considerable work has been done on electron-phonon interaction in these confined systems to our knowledge the effects of a high magnetic field on the electron-acoustic phonon interaction in quantum wells and superlattices in connection with the problem of ultrasonic attenuation has so far received little attention and it is this aspect which concerns us here. A magnetic field applied parallel to the growth direction as an additional confining effect on electrons in the quantum well in that the in-plane motion of the electrons is quantized into Landau

levels and it is expected to modify the ultrasonic attenuation in these materials. Together with the effects of the confinement we have an interesting physical situation in which these competing factors influence those electron characteristics determining the electron acoustical properties. With the applications of the external quantizing magnetic field the electron energy spectrum quantizes completely, leading to the zero-dimensional quantization responsible for instance for the well known quantum Hall effect. Numerical examples are shown and discussed.

SOBRE O DESACOPLAMENTO DOS NÍVEIS DE LANDAU NO LIMITE DE CAMPO MAGNÉTICO FORTE.

CAVALCANTI, R. M.; CARVALHO FILHO, C. A. A.
DE

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

Segundo a explicação usual do efeito Hall quântico inteiro (EHQI), a existência de platôs na condutividade Hall em função do campo magnético ou da densidade de portadores é resultado da localização de Anderson devido à presença de impurezas e imperfeições nas amostras em que o efeito é observado. Além disso, necessitam-se de estados delocalizados que possam conduzir a corrente Hall. É geralmente aceito, contudo, que, na ausência de campo magnético, todos os estados eletrônicos num meio desordenado bidimensional são localizados^a. Por este motivo, grande esforço tem sido feito na tentativa de se justificar teoricamente tal situação. Uma aproximação feita freqüentemente neste contexto é o desacoplamento dos níveis de Landau no limite de campo magnético forte, isto é, quando $\hbar\omega_c \gg \langle (\Delta V)^2 \rangle^{1/2}$, onde ω_c é a freqüência de ciclotron e $\langle (\Delta V)^2 \rangle^{1/2}$ é a flutuação do potencial aleatório. Baseados em resultados exatos^b, contudo, apresentamos fortes evidências de que tal aproximação não é capaz de justificar a explicação do EHQI usualmente aceita.

^aE. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello and T.V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. 42, 673 (1979).

^bA. Klein and J.F. Perez, Nucl. Phys. B251 [FS13], 199 (1985).

Efeitos de correlações em estruturas semicondutoras altamente dopadas

BORGES, A. N.

*Departamento de Física, Universidade Federal de Goiás,
Goiânia, Go*
HIPÓLITO, O.

*Departamento de Física, Instituto de Física e Química de
São Carlos, São Carlos, SP*

CAMPOS, V. B.

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

Estudamos o gás de elétrons tridimensional originário de impurezas doadoras em silício e germânio. O fator de estrutura $S(\vec{q})$ foi calculado juntamente com a correção de campo local $G(\vec{q})$ de forma autoconsistente. A partir da correção de campo local, determinamos a função dielétrica estática na aproximação STLS (Singwi-Tosi-Land-Sjölander) e blindamos o potencial de Coulomb elétron-íon de impureza, a fim de determinar o potencial efetivo. A densidade crítica N_c em que a transição semicondutor-metal ocorre é calculada através da análise da energia de ligação do elétron ao íon, determinada por uma aproximação variacional. Comparamos os resultados obtidos para a densidade crítica com outros resultados teóricos, em particular com a aproximação RPA, também obtidos neste trabalho, e com medidas experimentais da transição de Mott em germânio e silício. Verifica-se que nossos resultados demonstram uma boa concordância com os resultados experimentais e uma sensível melhoria em relação aos demais resultados teóricos.

Energia de ligação de impurezas em poços quânticos, segundo o modelo $\Gamma - X$.

SANTANA FILHO, L. C.; EMMEL, P. D.

UFSCar

LIMA, I. C. DA C.; SILVA, E. A. DE A. E

INPE

O sistema em estudo é o de um poço quântico formado pelos materiais GaAs e GaAlAs, contendo impurezas rasas no poço (GaAs), sob a ação de um campo magnético orientado segundo a direção de crescimento da hetero-estrutura. Usa-se aqui o formalismo da massa efetiva, expandindo-se a função de onda na base formada pelas funções de Bloch dos pontos Γ e X , da primeira zona de Brillouin. A conexão entre as funções envelopes é feita através de uma matriz unitária. Para conectar as derivadas das funções envelopes usa-se a conservação da densidade de corrente de probabilidade normal às interfaces dos materiais. A obtenção das energias do sistema é feita utilizando-se o cálculo variacional.

CORRELAÇÕES DINÂMICAS DE UM GÁS QUASI-BIDIMENSIONAL

SILVEIRA, H. V. DA; STUDART, N.

DF-UFSCar

Neste trabalho estamos investigando as correlações dinâmicas de um gás de polarons quasi-bidimensional, usando a teoria auto-consistente de Singwi-Tosi-Land e Sjölander (STLS). Em 1989 Holas e Singwi apresentaram um modelo para o fator de campo local $G(\vec{k}, \omega)$ em duas dimensões, dependente da freqüência e propuseram uma forma simples para este interpolando entre o comportamento de ω grande e pequeno para qualquer potencial arbitrário. O interesse principal consiste na

determinação do fator de campo local $G(k, \omega)$ e do potencial de correlação e troca $f_{xc}^h(k, \omega)$ para o potencial $V(k)$ que leva em conta a espessura finita da camada do elétron.

ESPECTRO RAMAN RESSONANTE DE FLUTUAÇÃO DE SPIN EM SUPERREDES Δ -Si:GaAs.

ANJOS, V. DE C. DOS; ANJOS, V. DE C. DOS;
IORIATTI JR, L.
IFQSC-DFCM-USP

Recentemente foram apresentados resultados experimentais [A.C. Maciel et al., Surface Science 228,251(1990)] envolvendo espalhamento inelástico da luz via flutuações de densidade de spin em superredes δ -Si:GaAs para energias incidentes em torno do gap de split-off do GaAs. Idealmente, estas estruturas consistem em planos de impurezas doadoras de átomos de Si localizados em monocamadas atômicas periodicamente introduzidos durante o crescimento epitaxial de um cristal de GaAs homogêneo. Para estruturas de curto período o espectro depolarizado é similar aquele de materiais uniformemente dopados. Porém novas linhas apresentando um comportamento ressonante complexo surgem no espectro de estruturas de períodos maiores. Esse comportamento é atribuído a transições inter-minibandas devido ao potencial periódico associado à distribuição espacial de cargas. Por meio de cálculos da estrutura eletrônica da superrede através da teoria do funcional densidade apresentamos um cálculo da seção de choque de espalhamento que está em excelente concordância com os dados experimentais.

RESSONÂNCIAS DE FANO EM HETEROESTRUTURAS DE SEMICONDUCTORES

SCHULZ, P. A.
Instituto de Física "Gleb Wataghin" - UNICAMP

Ressonâncias de espalhamento, devidas ao acoplamento entre estados discretos com estados de um ou mais contínuos, são conhecidas como ressonâncias de Fano^a em Física Atômica. Essas ressonâncias são caracterizadas por formas de linha assimétricas. Embora existam predições para sua detecção ótica^b, essas ressonâncias ainda não foram observadas no contexto, completamente diferente, de heteroestruturas de semicondutores. Por outro lado, em heteroestruturas de semicondutores, ressonâncias de espalhamento são observadas em medidas de tunelamento ressonante. Em sistemas com barreiras de tunelamento, ressonâncias de Fano devem se manifestar nas probabilidades de tunelamento, caso exista um acoplamento entre diferentes perfis de extremos de banda. Essa situação remete ao problema de tunelamento de elétrons através de barreiras indiretas da AIAs entre contatos de GaAs. Aqui os estados Γ e X se acoplam, levando a ressonâncias assimétricas de Fano na probabilidade de transmissão^c. As características gerais dos estados espalhados dessa maneira nesses sistemas ainda não foram bem entendidos, embora tais ressonâncias em probabilidades de tunelamento, obtidas numericamente, venham sendo anunciadas nos últimos anos na literatura. O objetivo do presente trabalho é de discutir mais detalhadamente a natureza desses estados de espalhamento e as condições, sob as quais, a forma da ressonância possa mudar. Esse é um ponto de partida para estudar a viabilidade de observação das ressonâncias de Fano, usando o mecanismo de acoplamento $\Gamma - X$ em heteroestruturas de semicondutores.

Localização de Estados em Super-redes Finitas

WAKI, M.
E.F.E.I
WATARI, K.
IFUSP

Recentes publicações dão conta do surgimento de estados localizados quando, em uma super-rede unidimensional finita, um dos poços tem sua largura ligeiramente alterada. A controvérsia surgida em torno da dependência ou não da localização, em termos da simetria do sistema, levou-nos a um estudo sistemático do efeito de variações na largura ou profundidade dos poços, ou na largura ou altura das barreiras. Nossos cálculos foram feitos usando dados referentes a super-redes de 9 ou 10 poços compostos por $\text{In}_{0.754}\text{Ga}_{0.346}\text{As}_{0.536}\text{P}_{0.456}/\text{InP}$, para comparação com a literatura. Os resultados obtidos mostram que o efeito dessas alterações é quebrar a super-rede em dois ou mais blocos, quase que independentes. A localização de estados em um único poço ocorre somente em algumas situações, tal como o alargamento de um poço, ou o aumento na sua profundidade. Sendo assim, não nos parece que as alterações observadas previamente dependam diretamente da simetria (ou sua quebra) da super-rede. Concluimos também que, apesar da quebra da super-rede, as mini-bandas de energia continuam a existir, no entanto com sua largura alterada.

Ressonâncias e Tunelamento (SEM) –
21/05/93

^aU. Fano, Phys. Rev. 124, 1860 (1961).

^bK. Maschke et al., Phys. Rev. Lett. 67, 2646 (1991)

^cD. K. K. Ko and J. C. Inkson, Semicond. Sci. Technol. 3, 791 (1989)

MODEL CALCULATION OF THE NOISE CHARACTERISTIC IN DOUBLE BARRIER HETEROSTRUCTURES

YEYATI, A. L.; FLORES, F.

*DFMC, Fac. de Ciencias, Univ. Aut. de Madrid - Madrid
- Spain*

ANDA, E. V.

UFF - Niterói - RJ - Brasil

Using a non-equilibrium Green's functions formalism we perform model calculations for the current noise characteristic of a double barrier heterostructure. A simple scheme is proposed to include self-consistency between the electronic charge inside the well and the electrostatic potential along the device. We obtain a general expression for the frequency dependent current fluctuations that reduces to well known results given by the transmission approach in the zero frequency limit. Our numerical results are in good agreement with recent experimental data. The correlation between the multistable solution and the current noise is studied in detail. By means of an approximate calculation we show, introducing a phenomenological life-time to describe the moving electrons, that phase coherence has negligible effect in the noise characteristic of a double barrier heterostructure.

TUNELAMENTO RESSONANTE EM DISPOSITIVOS DE BARREIRA DUPLA SOB O EFEITO DA INTERAÇÃO ELÉTRON-FÔNON

ANDA, E. V.; MAKLER, S. S.; TUYAROT, D. E.

UFF - Niterói - RJ - Brasil

PASTAWSKI, H. M.

INTEC - Santa Fé - Argentina

BARRERA, R. G.

UNAM - México - DF - México

Neste trabalho calculamos a curva característica de um dispositivo de barreira dupla trabalhando no regime de transporte quântico. Foi desenvolvido um formalismo adequado para o tratamento de efeitos de muitos corpos e em particular para a interação elétron-fônon. O sistema é descrito por um hamiltoniano de ligações fortes onde a interação elétron-fônon é descrita por um termo de Frölich. Para o caso dos dispositivos de barreira dupla nossos resultados concordam com os experimentos. O formalismo foi também aplicado ao estudo de um sistema de perfil plano mas com diferentes intensidades de acoplamento elétron-fônon, como por exemplo uma camada de GaAs numa liga de SiGe. Neste caso a curva característica é do tipo escada revelando a aber-

tura de canais de fônon a medida em que aumentamos o potencial aplicado. Neste trabalho discutimos também dispositivos de barreira dupla ou de múltiplos poços quânticos desenhados para possibilitar a produção de ultrassom coerente.

TUNELAMENTO RESSONANTE EM ESTRUTURAS DE BARREIRA DUPLA COM IMPUREZAS

GORNSZTEJN, T.; DAVIDOVICH, M. A.

Departamento de Física, PUC-Rio

As propriedades eletrônicas e de transporte de diodos de barreira dupla podem ser modificadas pela presença de impurezas. Neste trabalho estudamos a corrente de tunelamento em função da voltagem aplicada (curva I-V) quando camadas planas de impurezas são introduzidas perpendicularmente à direção de crescimento de heteroestruturas constituídas por um poço quântico e duas barreiras. O sistema é descrito por um Hamiltoniano tight-binding de uma banda e as propriedades de transporte são obtidas utilizando o formalismo de Keldysh para funções de Green fora de equilíbrio. Estudamos os efeitos nos valores dos picos de intensidade e nas razões entre pico e vale das curvas características I-V quando uma ou mais camadas de impurezas estão localizadas em uma ou nas duas barreiras da estrutura. O acoplamento entre os níveis de impurezas e os do poço quântico resulta no deslocamento destes e no aparecimento de novas ressonâncias dentro do poço. Essas mudanças na estrutura eletrônica se refletem na corrente de tunelamento. Tanto os picos de intensidade como as razões pico-vale das correntes podem ser amplificadas ou reduzidas dependendo do nível de energia das impurezas, do número de camadas de impurezas introduzidas e de sua localização nas barreiras. Como esses parâmetros podem ser facilmente variados a introdução de impurezas nos diodos de tunelamento possibilita um certo grau de controle de suas propriedades de transporte. Discutimos alguns resultados experimentais.

TUNELAMENTO SEQUENCIAL RESSONANTE ASSISTIDO POR FÓTONS EM SUPER-REDES SEMICONDUTORAS

GUIMARÃES, P. S. S.

Departamento de Física, ICEX, Universidade Federal de Minas Gerais

KEAY, B.; KAMINSKI, J.; ALLEN, J.; HOPKINS, P.; GOSSARD, A.

Quantum Institute, University of California, Santa Barbara, CA 93106, USA

FLOREZ, L. T.; HARBISON, J. P.
Bellcore, USA

As propriedades de transporte elétrico de super-redes e multi-poços quânticos sob campos elétricos intensos vem sendo intensivamente investigadas desde o trabalho original de Esaki e Tsu, de aproximadamente 20 anos atrás. O estudo experimental destes sistemas sob campos elétricos *estáticos* intensos já se encontra bem desenvolvido. Em contraste, a grande variedade de fenômenos (geração de harmônicos, condutividade absoluta negativa, transparência auto-induzida) prevista teoricamente em super-redes submetidas a campos intensos de alta frequência permanece sem investigação experimental. A necessidade simultânea de campos intensos (da ordem de alguns kV/cm) e altas frequências (terahertz) ajuda a explicar a falta de resultados experimentais.

Este trabalho apresenta os resultados de uma inves-

tigação experimental de transporte elétrico no regime de tunelamento sequencial ressonante em super-redes de GaAs/AlGaAs submetidas a campos elétricos intensos com frequências entre 200 GHz e 5 THz. Mostra-se que essa radiação no infravermelho distante introduz um novo canal de condução eletrônica, tunelamento sequencial assistido por fótons. Este mecanismo é análogo ao observado anteriormente em junções supercondutoras. Este trabalho descreve a primeira observação do fenômeno em materiais semicondutores.

Interfaces e Superfícies (SEM) -
21/05/93

RUGOSIDADE EM INTERFACES DE InP/InAs

BRASIL, M. J. S. P.

Instituto de Física "Gleb Wataghin" - UNICAMP

NAHORY, R. E.; TAMARGO, M. C.

City College of New York, Chemistry Dept., New York, USA

As características da heterointerfaces são fundamentais não só para o funcionamento e eficiência de dispositivos baseados em heteroestruturas, como para a investigação de propriedades físicas fundamentais. A visão ideal de interfaces atômicamente abruptas tem sido bastante contestada recentemente por modelos baseados em rugosidade de diferentes frequências.

As heterointerfaces entre semicondutores contendo As e P compreendem vários sistemas tecnologicamente importantes, baseados em substratos de InP. Essas interfaces apresentam, no entanto, alguns problemas específicos, como uma forte reação de troca entre o As e o P.

Nós investigamos a rugosidade de interfaces de poços quânticos de InP/InAs, crescidos por CBE, usando fotoluminescência em diferentes temperaturas e condições de excitação. As camadas de InAs foram obtidas por dois métodos: (i) crescimento direto nominal de 1-2 monocamadas de InAs, (ii) exposição da superfície de InP a um fluxo de As² por alguns segundos. Em ambos os casos, medidas de SIMS e TEM mostraram que obtivemos poços quânticos estreitos de InAs.

Os espectros típicos de PL consistem de múltiplos picos, atribuídos à recombinação em ilhas com diferentes espessuras médias de InAs. O modelo tradicional de ilhas com números inteiros de monocamadas não explica adequadamente os resultados observados, pois tanto a energia dos picos, quanto a separação entre picos adjacentes variam significativamente de amostra para amostra. Nós discutimos esses desvios baseados em questões como rugosidades de diferentes extensões relativas ao diâmetro do exciton e confinamento lateral de ilhas. Além disso, discutimos a possível interligação das ilhas e a dinâmica dos portadores entre ilhas.

Finalmente, discutimos a formação da interface de InP/InAs com base na dinâmica de crescimento deste sistema. Observamos que a rugosidade da interface formada é extremamente sensível a parâmetros como a temperatura de crescimento, a orientação do substrato e o tratamento da superfície de InP com exposição a diferentes elementos.

CARACTERIZAÇÃO ÓTICA DE INTERFACES SEMICONDUTORAS CRESCIDAS PELO MÉTODO MOVPE GUIMARÃES¹, F. E. G.

*Institut of Semiconductors, RWTH-Aachen, Aachen,
Germany*

Muitas das propriedades das interfaces semicondutoras dependem consideravelmente dos menores detalhes

da tecnologia empregada para produzi-las, bem como das propriedades físicas dos materiais usados na sua fabricação. Nessa contribuição, será feita uma correlação entre o método de crescimento MOVPE, os materiais usados (III-V) e as propriedades das interfaces em heteroestruturas semicondutoras, dopadas ou não, tais como, AlGaAs/GaAs, InGaP/GaAs e InGaAs/InP. Ênfase será dada à incorporação de defeitos e interdifusão

dos componentes atômicos durante o crescimento das interfaces, bem como de sua estrutura eletrônica.

¹endereço atual: IFQ São Carlos, São Carlos - SP

Estrutura atômica e propriedades eletrônicas das superfícies [110] de ZnS, ZnSe e ZnTe

ALVES, J. L. A.

Fundação de Ensino Superior de São João Del Rei

WATARI, K.; FERRAZ, A. C.

Instituto de Física da Universidade de São Paulo Caixa Postal 20516 - telefax (11)814-0503 CEP 01498-970 São Paulo SP Brasil

Nesse trabalho descrevemos um estudo sistemático das propriedades atômicas e eletrônicas das superfícies [110] dos compostos semicondutores ZnS, ZnSe e ZnTe. Analisamos as estruturas atômicas de equilíbrio, as faixas de energia das superfícies e o "threshold" fotoelétrico, considerando que estas duas últimas propriedades tem sido recentemente objeto de estudos experimentais através da técnica de "angular-resolved photoemission". Os cálculos são baseados na teoria do funcional densidade, na aproximação de densidade local (LDA) para as funções de correlação e troca considerando o modelo de Ceperlay-Alder-Perdew-Zunger. A interação elétron-íon é descrita por pseudopotenciais "ab-initio" com conservação da norma e completamente separável. Desta forma eles são baseados em cálculos relativísticos de todos os elétrons em átomos livres, resolvendo-se a equação de Dirac autoconsistentemente. As camadas de superfície foram relaxadas de acordo com a intensidade das forças nos átomos, usando o método "steepest descent" otimizado, em conjunto com o procedimento de Car-Parrinello. Nossos valores calculados para o ângulo de relaxação dos átomos da superfície, são sistematicamente menores que os resultados experimentais mas indicam que tais relaxações dependem da conicidade, fato este aparentemente insensível pelas análises experimentais de LEED. As superfícies relaxam de tal maneira que o cátion se move na direção do "bulk" em uma aparente tri-coordenação planar, e o ânion vizinho se move em direção contrária correspondendo a uma configuração piramidal com seus três cátions vizinhos. Desta forma esta relaxação pode ser interpretada em termos de uma rehibridização das ligações da superfície. Este efeito de ionicidade ainda pode ser verificado no "photothreshold", que decresce com o aumento da ionicidade.

Crescimento, Caracterização e Defeitos em Semicondutores (SEM) - 21/05/93

ESTADOS ELETRÔNICOS DE COMPLEXOS ENVOLVENDO COBRE E LÍTIOS EM GERMÂNIO

ORELLANA, W. M.; ASSALI, L. V. C.
Universidade de São Paulo

Cristais de Germânio ultra-puros e com alto controle de impurezas têm sido obtidos recentemente e essa tecnologia tem sido utilizada na aplicação de detectores de radiação. No entanto, sabe-se que estados eletrônicos são introduzidos na banda proibida dessas amostras, de maneira não intencional, quando o material é resfriado rapidamente ("quenched") desde temperaturas elevadas. Desse modo, a presença desses níveis profundos eletricamente ativos é responsável pela degradação do dispositivo. Quando o tratamento térmico é acima de 600°C os níveis profundos são devidos, principalmente, às impurezas de Cobre e Lítio. Tem sido amplamente aceito que o Cobre introduz três níveis aceitadores profundos na banda proibida do Germânio quando ocupa um sítio substitucional (Cu_s). Sabe-se, também, que a impureza de Lítio posicionada em um sítio intersticial (Li_i) introduz um nível doador raso, apesar de sua posição na banda proibida ainda não ter sido determinada. Recentemente, usando técnicas de DLTS e medidas Hall^a foram observados dois níveis aceitadores os quais foram identificados como sendo devidos à impureza de Cobre intersticial (Cu_i) e ao complexo Cobre intersticial-Cobre substitucional (Cu_iCu_s). Também usando DLTS^b foram observados níveis aceitadores associados ao complexo Lítio intersticial-Cobre substitucional (Li_iCu_s). Neste trabalho, são reportados resultados dos estados eletrônicos das impurezas isoladas de (Cu_s), (Cu_i) e (Li_i) e os complexos (Cu_iCu_s) e (Li_iCu_s) em Germânio. O método utilizado é o do Espalhamento Múltiplo X_α com o tratamento dos orbitais de superfície através da esfera de Watson. Nossos resultados para os estados eletrônicos confirmam algumas interpretações experimentais, levando-nos a propor um modelo microscópico para descrever a formação dos estados eletrônicos dos complexos a partir dos orbitais moleculares associados às impurezas isoladas.

^aY.Kamiura and F.Hashimoto, Mater. Sci. Forum 38-41, 537 (1989).

^bI. M.Kotina, V.V.Kurytov, S.R.Novikov and T.I.Prokofeva, Sov.Phys.Semicond.22, 1936 (1989).

“Softness” e Segregação de Impurezas em Semicondutores

DAL-PINO JR, A.

Instituto Tecnológico de Aeronáutica - ITA

Nós analisamos o processo de segregação de impurezas em interfaces como uma reação química entre impurezas e a interface⁽¹⁾. Deste ponto de vista, testamos a habilidade dos conceitos de “local softness” e “hardness” para prever os sítios mais prováveis para a acumulação de impurezas. Investigação a nível de primeiros princípios da $\Sigma = 5$ tilt[310] “grain boundary” em Ge é apresentada e a energia de acumulação de dopantes nessa interface é estudada. Nossos resultados mostram que a análise de problemas de matéria condensada pode ser enriquecida pela aplicação dos conceitos químicos de “softness” e “hardness”.

(1) A. Dal Pino Jr. et al, Journal of Chemical Physics (1993), aceito para publicação

Wire Crystals GaAs and InAs Grown by MBE on Porous Silicon

LUBYSHEV, D. L.; ROSSI, J. C.; GUSSEV, G.; BASMAJI, P.

IFQSC-USP - São Carlos - SP.

Epitaxial layers of GaAs or (InAs) on porous Si (PS) have been grown at different substrate temperatures $T_s = 200 - 500^\circ C$ by molecular beam epitaxy (MBE). The dependence of the surface morphology on the growth conditions has been investigated. The possibility to grow GaAs (or InAs) nano-scale wire crystals with lengths of $5\mu m$ and diameter between 75 and 100 nm has been also demonstrated. We believe that the germ formation of nano crystal begins on the output of the dislocation into the GaAs growing layer. The substrates used were $\langle 111 \rangle$ oriented to ohm.cm resistivity boron-doped p-type silicon. The anodization was carried out using 25% HF solution in water, at current density of 30 mA/cm^2 . After electrochemical preparation, porous silicon was introduced in MBE machine and GaAs (or InAs) was grown in two steps. Our results show two possible mechanisms of growth. The first mechanism we suggest is the anomalous long diffusion length of Ga adatoms on the lateral surface of the growing crystals. The second mechanism, we suppose the existence of associates and microclusters of Ga and As atoms on the surface semiadsorbational layer.

NOVO MÉTODO PARA DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS ÓPTICOS DE FILMES FINOS ANISOTRÓPICOS.

FRAGALLI, J. F.; MISOGUTI, L.; SURDOVICH, G.; VITLINA, R.

IFQSC, USP - São Carlos

É proposto um método para a determinação das componentes superficiais paralelas N_x e perpendicular N_z

do índice de refração de filmes anisotrópicos sobre substratos isotrópicos. O método é baseado na medida das oscilações na refletividade da luz polarizada S e P, variando-se o ângulo de incidência. Para a polarização S o padrão de interferência depende apenas da componente N_x , ao passo que para a polarização P ele depende também da componente N_z . Variando-se o ângulo de incidência ϕ , a diferença de caminho óptico γ_P e γ_S serão diferentes e dependerão do grau de anisotropia $\beta = (N_z/N_x) - 1$. Para $\beta \ll 1$ esta diferença toma a forma $\gamma_P - \gamma_S = \beta \text{sen}^2(\phi)\gamma_S/(N_x^2 - \text{sen}^2(\phi))$. Para filmes com espessuras da ordem de $2-3\lambda$, onde λ é o comprimento de onda da luz incidente, e anisotropia β entre 0.1 e 0.2 o número de oscilações das polarizações S e P podem diferir por 20 a 30% quando se varia ϕ de 0 a $\pi/2$. Uma estimativa deste efeito em filmes de silício poroso sobre substratos de silício cristalino demonstra uma excelente oportunidade para observar o efeito, mesmo com medidas simples de refletividade, sem usar dados de elipsometria. O efeito se torna mais claro para casos onde $N_x - 1 < 1$ que é típico em filmes de silício poroso com porosidade suficientemente grande.

COMPORTAMENTO DE NÍVEIS PROFUNDOS METAESTÁVEIS COM O CAMPO ELÉTRICO EM AMOSTRAS DE GaAs-n SUBMETIDAS A RTA

PASCOAL, H. B.; COSTA, J. A. P. DA

UFRN

PUDENSI, M. A. A.

UNICAMP

É sabido que alguns níveis profundos no arseneto de gálio e no fosfeto de índio são afetados por campos elétricos. O presente trabalho foi realizado em amostras de arseneto de gálio dopados com silício a uma concentração de $10^{16}/\text{cm}^3$. As amostras foram submetidas a RTA (Rapid Thermal Annealing) a uma temperatura de $870^\circ C$ durante 60 seg. com duas coberturas diferentes: dióxido de silício e spin-on-glass dopado com estanho (SOG:Sn). Os espectros obtidos por DLTS (Deep Level Transients Spectroscopy) revelaram na amostra recozida com dióxido de silício, a existência de quatro níveis, dos quais dois mostraram-se ser eletricamente controláveis. Na amostra recozida com spin-on-glass foram observados dois níveis, sendo que apenas um mostrou-se sofrer influência do campo elétrico. Devido à reversibilidade desses níveis, foram sugeridos alguns modelos como sendo constituídos por defeitos pontuais, defeitos complexos e impurezas rasas.

IMPLANTAÇÃO DUAL DE ÍONS DE BORO E CARBONO EM SILÍCIO.

SOUZA, J. P. DE; BOUDINOV, H.

UFRGS

Estão em progresso estudos dos efeitos sobre a ativação elétrica de elemento dopante tipo *p* (Boro) provocados pela co-implantação de um elemento isoeletrônico (Carbono) em cristais de Silício de orientação (100). Foram realizadas implantações de B^{++} com dose de $5.0 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ e energia de 50 keV seguidas de implantações de C^+ com doses de 5.0×10^{13} e $5.0 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ e energia de 55 keV. Medidas de ativação elétrica realizadas em dispositivos Van der Pauw recozidos isocronicamente por 30 minutos em ambiente inerte na faixa de temperatura de 450 a 500 °C revelaram as seguintes características: (i) o recozimento reverso do B ocorre também nas amostras co-implantadas com C^+ porém com menor intensidade, (ii) a porcentagem da dose de B eletricamente ativa cresce com a dose de C^+ na faixa de temperatura de 500 ° a 800 °C e (iii) a mobilidade das lacunas não é significativamente afetada pela co-implantação de C. A discussão destes resultados será apresentada com base em modelo que considera interação de defeitos pontuais intrínsecos com átomos de Boro.

IMPLANTAÇÃO IÔNICA DE MAGNÉSIO EM ARSENETO DE GÁLIO

HERNANDES, C. S.
LPD/IFGW/UNICAMP
SWART, J. W.
DSIF/FEE/UNICAMP
SOUZA, J. P. DE
IF/UFRGS

Estamos realizando Implantação Iônica de Magnésio em Arseneto de Gálio para a obtenção de camadas *p*. Estas camadas podem ser empregadas na fabricação de transistores MESFET como camada *p* enterrada e JFET como porta. O Magnésio possui certas vantagens sobre os outros dopantes tipo *p* em GaAs, tais como o Zinco ou Cádmio. Ele é um átomo leve e portanto pode atingir distâncias mais profundas dentro do cristal com menor energia de implantação, além de produzir menos danos na rede. Os recozimentos estão sendo feitos em um forno de processamento térmico rápido. Estamos estudando a difusão do Magnésio durante o recozimento, variando temperatura e tempo. A caracterização é feita através de medidas de Efeito Hall e C-V Eletroquímico. Realizamos também dupla-implantação de Magnésio + Fósforo com o objetivo de melhorar a ativação para altas doses ($> 1.10^{15} \text{ cm}^{-2}$). A co-implantação de Fósforo diminui as vacâncias de Arsênio, alterando a redistribuição de Mg durante o recozimento. Mostraremos os resultados obtidos para a dupla-implantação e para a implantação simples, onde obtivemos camadas bem localizadas e de boa qualidade.

MEDIDAS DE $n(T)$ PARA AlGaAs COM ALTA DOPAGEM DE Si.

SOARES, D. A. W.

Esc. Fed. de Engenharia de Itajubá
RIBEIRO, G. M.; OLIVEIRA, A. G. DE
Universidade Federal de Minas Gerais

Amostras de $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ altamente dopadas com silício, crescidas por MBE, estão sendo medidas pela técnica de Foto-Hall e determinadas as concentrações de portadores *n* em função da temperatura *T* e de diversas condições de iluminação, usando um LED de energia 1,32 eV. Por serem estas amostras fortemente dopadas, os átomos do dopante silício geram vários outros defeitos, além do silício doador, ou seja, substitucional no sítio do elemento do grupo III e do silício gerando o centro DX. O centro DX é um centro profundo do tipo aceitador, para AlGaAs dopado com silício em concentrações de alumínio maior que cerca de 22%. Os outros defeitos são: silício aceitador, substitucional no sítio do arsênio; o par de mais próximos vizinhos $Si_{Ga}-Si_{As}$; $Si_{Ga}-X$ e $Si_{As}-Y$ onde, X e Y são defeitos intrínsecos da rede. A ênfase deste trabalho será no entendimento dos parâmetros associados aos defeitos clássicos, Si_{Ga} e DX, como por exemplo, as suas concentrações e energias de ativação. Procuramos estabelecer a eventual influência destes dois defeitos sobre os demais. Medidas de $n(T)$ para diversas concentrações iniciais de DX foram realizadas. Foi observada a presença de uma alteração abrupta na inclinação de $n(T)$ para $T = 132K$, que foi associada à mudança de regime das cinéticas do DX e do nível raso, contrariando a proposição colocada na literatura que associa a alteração abrupta ao estado neutro metaestável do centro DX.

UTILIZAÇÃO DO EFEITO PPC NO ESTUDO DA DISTRIBUIÇÃO DE Si em AlGaAs/GaAs COM DOPAGEM PLANAR.

CARVALHO, A. T. G. DE
Universidade Federal de Viçosa
BEZERRA, J. C.; OLIVEIRA, A. G. DE
Universidade Federal de Minas Gerais

Na aplicação de heteroestruturas semicondutoras de AlGaAs/GaAs na microeletrônica e na optoeletrônica é relevante o conhecimento e controle da distribuição de impurezas intencionais no material. Estudamos amostras de poços quânticos de barreiras assimétricas formadas por interfaces $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ com diferentes concentrações de alumínio e com uma dopagem planar de Si no centro do poço, crescidas por MBE. Em condições ideais, a dopagem planar consiste de uma monocamada de GaAs dopada. Entretanto, efeitos de difusão e segregação estão sempre presentes e, na prática, o perfil da distribuição de Si difere daquele idealizado. O fenômeno de PPC (Fotocondutividade Persistente) em AlGaAs foi utilizado para investigar a distribuição de dopantes nestas heteroestruturas, uma vez que o alargamento do perfil de impurezas em relação ao plano original não é simétrico, as contribuições devidas às interfaces normal e invertida são diferentes. O efeito PPC

está associado à existência de centros DX na liga (para $x \leq 0,22$) e são responsáveis pela captura de elétrons a temperaturas abaixo de 100 K. Resultados de medidas foto-hall, realizadas a 300 e a 77 K, como função da intensidade de luz serão apresentados.

CARACTERIZAÇÃO ELÉTRICA E ÓTICA DE UMA DOPAGEM PLANAR DE Si NAS PROXIMIDADES DE UMA

HETEROJUNÇÃO $Al_{0,3}Ga_{0,7}As/GaAs$

MEDEIROS-RIBEIRO, G. DE; OLIVEIRA, A. G. DE
Universidade Federal de Minas Gerais

A utilização de heterojunções em optoeletrônica é fundamental para que se atinja uma boa eficiência quântica, seja em detectores ou lasers. Os processos de difusão e segregação de dopantes em ligas $Al_xGa_{1-x}As$ não são ainda bem compreendidos, o que dificulta o modelamento de dispositivos.

Caracterizamos heterojunções $Al_{0,3}Ga_{0,7}As/GaAs$ em presença de uma dopagem planar na camada de GaAs. A motivação deste trabalho é colocar a dopagem planar próxima à interface de forma que eventuais correlações entre interface e dopagem possam ser detetadas. A estrutura foi crescida por MBE, e uma fina camada de Al foi depositada na superfície da amostra, de modo a propiciar a formação de um contato Schottky mas ao mesmo tempo manter sua transparência à luz. Medidas de CV foram efetuadas em uma frequência de 1MHz, e a distribuição de portadores em função do eixo de crescimento foi assim levantada.

Medidas de fotoluminescência foram realizadas nesta mesma amostra para diversas potências do laser. Os espectros obtidos são apresentados.

DEPOSIÇÃO DE SULFETO DE CÁDMIO VIA SOLUÇÃO QUÍMICA: PREPARAÇÃO E ANÁLISE

ASSUMPÇÃO, R. DE T.; RABELO, A. P. B.
UNICAMP-DEMA/FEM

Filmes finos de CdS foram preparados a partir de solução (eletrodeposição e deposição química) sobre substratos de ITO ("Indium Tin Oxide"). A preparação dos substratos foi realizada através de "Sputtering"-RF Reativo.

Utilizamos Tiosulfato de Sódio como fonte de Enxofre e como fonte de Cádmio o Cloreto ou Acetato deste metal. Os banhos empregados na Eletrodeposição foram preparados tanto com solventes orgânicos como aquosos, ao passo que as amostras crescidas por Deposição Química foram preparadas somente a partir de soluções aquosas.

O objetivo de utilização destas duas técnicas de preparação e também dos dois sais de Cádmio é analisar detalhadamente os estágios iniciais do processo de

formação do filme de CdS, usualmente limitado por difusão, devido ao transporte iônico através do filme em crescimento.

Deste modo, tanto processos catódicos em eletrólitos ácidos como, muito provavelmente, a deposição química direta, requerem primeiro a redução do composto calcogênio para posterior combinação com seu diânion. Isto ocorre através de diversos passos intermediários de redução, resultando frequentemente em depósitos amorfos não estequiométricos precedendo uma segunda fase policristalina.

Apresentamos resultados referentes à estequiometria, morfologia dos grãos e concentração de impurezas tendo por objetivo estabelecer uma correlação entre o processo de crescimento e as propriedades optoeletrônicas dos filmes obtidos.

As principais técnicas de análise empregadas foram Microscopia Óptica, Microscopia Eletrônica de Varredura-MEV (EDS-RX, SEI) e Espectroscopia de Absorção Atômica.

CARACTERIZAÇÃO DE SEMICONDUCTORES POR ESPALHAMENTO RAMAN

SILVA, S. W. DA; PIZANI, P. S.; GALZERANI, J. C.
Depto. de Física Univ. Federal de São Carlos

O espalhamento Raman tem se mostrado uma técnica não destrutiva de grande potencialidade na investigação das vibrações da rede e suas interações com outras excitações. Como consequência, fornece informações sobre propriedades tais como orientação do cristal, qualidade estrutural, composição de cristais mistos, presença e valores de tensões mecânicas, interdifusões em estruturas de multi-camadas e concentração de portadores no caso de amostras dopadas. Estas propriedades podem ser exploradas tanto em materiais na forma de monocristais, como em filmes finos. Vimos desenvolvendo uma série de estudos visando a caracterização de materiais e de estruturas semicondutoras, em sistema para espalhamento Raman recém-instalado, sendo alguns destes aqui apresentados. No caso de filmes de GaAs crescidos sobre Si e CaF_2 pôde-se observar a influência dos parâmetros de crescimento sobre a qualidade cristalina e os efeitos dos coeficientes de expansão térmica e do descasamento das redes sobre as tensões residuais nos filmes de GaAs. As recristalizações de filmes amorfos de GaSb (estequiométrica e não estequiométrica) sobre Si puderam ser acompanhadas como função do tratamento térmico. Verifica-se que amostras de GaSb crescidas por Czochralski têm qualidade cristalina e orientações que dependem das posições no tarugo dos quais são extraídos.

Modelo Microscópico do Aglomerado Complexo Mn_4 em Silício

LINO, A. T.

Universidade Federal de Uberlândia
ASSALI, L. V. C.; LEITE, J. R.
Universidade de São Paulo

O complexo de Mn_4 em silício foi identificado pela primeira vez por experimentos de EPR, tendo sido associado um spin efetivo $S=2$ para o complexo. Em experiências mais recentes foi obtido $S=6$ para o mesmo complexo. Os resultados controversos não tiveram explicação satisfatória. O valor de alto spin $S=4$ também foi observado para o cluster de Fe_4 usando as mesmas experiências de EPR. Neste trabalho nós apresentamos cálculos de estrutura eletrônica autoconsistentes com polarização de spin para os clusters Mn_4 e Fe_4 em silício usando o modelo de cluster molecular e a teoria do Espalhamento Múltiplo $X\alpha$. De modo a explicar os resultados experimentais controversos, nós realizamos nossos cálculos usando uma configuração diferente daquela prevista pelas medidas de EPR e já utilizada por nós em cálculos anteriores.

Theory of Non-Steady State Electrical Characteristics of Metal-Insulator-Metal Structures with Schottky Barriers and Distributed Interface Impurity States.

GUPTA, H. M.

Departamento de Física, IGCE - UNESP, Rio Claro

The metal-insulator or metal-amorphous semiconductor blocking contact is still not well understood. In the present paper, we discuss the non steady state characteristics of Metal-Insulator-Metal Structures with non-intimate blocking contacts (i.e. Metal-Oxide-Insulator-Metal Structures). We consider distributed surface states in addition to impurity states at a single energy level within the depletion region. We discuss thermal as well as Isothermal characteristics and present expressions for temperature of maximum current (T_m) and a method to calculate the density of distributed impurity states. The variation of mobility with electrical field has also been considered. Finally we plot the theoretical curves for various set of parameters showing the effect of variation of the dielectric constant, mobility variation with electrical field, applied potential, etc., on characteristics. The present results are closing into available experimental results.

MÉTODO SIMPLES PARA INVESTIGAÇÃO DE DISCORDÂNCIAS α e β POR DLTS.

HÜMMELGEN, I. A.
UFPR

A investigação de propriedades eletrônicas de discordâncias em semicondutores compostos como CdTe, torna necessária a distinção entre discordâncias α e β . Indentações efetuadas em CdTe (100) produzem dis-

cordâncias α e β que se deslocam em direções perpendiculares entre si, permitindo que ambas as espécies de discordâncias sejam investigadas separadamente. Utilizando uma solução que consiste de uma mistura 1:1:1 de HNO_3 , HF e ácido acético, pode-se distinguir as faces $\{111\}_{Cd}$ de $\{111\}_{Te}$ e como consequência, localizar ambos os tipos de discordâncias. A aplicação de contatos Schottky de geometria adequada permite que somente um tipo de discordância se encontre sob o contato. Dessa maneira, a investigação de níveis profundos associados a ambos os tipos de discordância pode ser efetuada utilizando-se de DLTS.

METAESTABILIDADES DE IMPUREZAS TIPO IV EM GaAs

SCHMIDT, T. M.; VENEZUELA, P. P. M.; FAZZIO, A.; CALDAS, M. J.

Instituto de Física - USP - SP

Impurezas do grupo IV quando entram no sítio do Ga em GaAs normalmente apresentam comportamento metaestáveis, como é o caso do Si e Sn. Investigamos a estrutura eletrônica do Ge_{Ga} , C_{As} e C_{Ga} em GaAs, usando uma supercélula de 54 átomos numa base de ondas planas com pseudopotenciais *ab initio* de norma conservada. Neste cálculo permitimos relaxação dos primeiros vizinhos e também calculamos a energia total para a impureza deslocada nas direções $\langle 111 \rangle$ e $\langle 010 \rangle$. O Ge_{Ga} tem comportamento U negativo e a posição tetraédrica é seu estado fundamental. Já o C pelo cálculo da energia de formação prefere o sítio do As e neste caso não há deslocamento da impureza. Para o C_{Ga} , cujo nível doador está próximo a banda de valência, há uma posição metaestável quando o C desloca-se na direção $\langle 111 \rangle$. Acreditamos que este comportamento não esperado da posição do nível seja a razão porque esta impureza não é detectada experimentalmente.

VARIAÇÃO DA INTENSIDADE RHEED COMO MÉTODO DE OTIMIZAÇÃO "IN SITU" DOS PARÂMETROS DE CRESCIMENTO DO GaAs PELA TÉCNICA DE MBE.

MOREIRA, M. V. B.

Departamento de Física, ICEX, UFMG

Apresentamos um estudo do comportamento da intensidade do feixe especular do padrão de difração da técnica RHEED durante os primeiros estágios do crescimento homoepitaxial de GaAs, logo após a desabsorção da camada óxida, e sua correlação com os parâmetros de crescimento MBE (T_S , P_{As_4} , r_{GaAs}). A morfologia da superfície foi estudada por microscopia Nomarski após o crescimento de uma camada de 1 a 2 μm . Comparando os padrões de intensidade RHEED e os resultados de microscopia Nomarski podemos, para cada temperatura de crescimento, encontrar uma taxa de cres-

cimento τ_{GaAs} e uma pressão de As_4 ideais que implicam numa rugosidade mínima da superfície. Constatamos que no máximo os primeiros 400 angstroms do crescimento são críticos e que, se esta fase de crescimento é realizada nas condições não ideais, a superfície estará irreversivelmente comprometida. Encontramos que o comportamento da intensidade do feixe especular do padrão de difração da técnica RHEED dá uma indicação direta da suavidade da superfície em crescimento.

DEFEITOS DE ANTI-SÍTIO E TIPO ANTI-SÍTIO EM GaP

VENEZUELA, P. P. M.; SCHMIDT, T. M.; FAZZIO, A.; CALDAS, M. J.

Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Apresentamos resultados sobre a estrutura eletrônica e propriedades estruturais de impurezas de anti-sítio e tipo anti-sítio em GaP. Utilizamos a Aproximação da Densidade Local (LDA) e Pseudopotenciais *ab initio* não locais e supercélulas de 54 átomos com energias de corte de 8 Ry. Os defeitos introduzem, como esperado, um orbital a_1 no *gap*, e um orbital t_2 em energias mais altas. O orbital a_1 é ocupado por 2 elétrons no estado de carga neutro e apresenta caráter anti-ligante. Isto torna o sistema muito susceptível a efeitos de relaxação. Encontramos que a amplitude da relaxação não depende apenas da diferença entre os tamanhos do hospedeiro e das impurezas, mas também do estado de carga do defeito. Para todos os defeitos encontramos comportamento metaestável, no estado de carga neutro, quando deslocados na direção $\langle 111 \rangle$ do cristal. Nestes processos mostramos que a forma da superfície de energia total em função do deslocamento da impureza envolve 4 níveis e não 3 como proposto por outros autores. A interação do nível a_1 do *gap* com o orbital a_1 ligante ressonante com a Banda de Valência influencia fortemente a superfície de energia. Discutimos os efeitos de relaxação da rede sobre as propriedades eletrônicas do sistema.

ESTUDO ESTRUTURAL DE FILMES DE a-Ge:H

MULATO, M.; TORRIANI, I. L.; CHAMBOULEYRON, I.
Instituto de Física - UNICAMP

O estudo estrutural de filmes finos de germânio amorfo hidrogenado é de particular importância para a compreensão de suas propriedades opto-eletrônicas. Essas propriedades possuem interesse para aplicações tecnológicas tais como dispositivos eletrônicos e células solares. O método de deposição utilizado é RF Sputtering onde têm-se uma atmosfera de $H_2 + Ar$ cuja pressão total é de $14,7 \cdot 10^{-3} \text{ mbar}$ e pressão relativa $P_{H_2}/P_{H_2} + P_{Ar}$ igual a 9.5%. Distintas amostras foram depositadas em diferentes temperaturas de subs-

trato (348K a 613K) sendo que para sua caracterização utilizou-se basicamente duas técnicas: espectroscopia de infravermelho (FTIR) e espalhamento de raios-X a baixos ângulos (SAXS). As curvas de SAXS indicam que à medida em que diminui-se a temperatura de deposição obtém-se um alargamento da função de distribuição de tamanhos dos microvoids assim como uma maior quantidade dos mesmos; observa-se também maiores valores de raio de giro sendo que o maior encontrado foi $R_g=94\text{Å}$. Relacionados a esses parâmetros estão os resultados de infravermelho de onde: i) calculamos a concentração de hidrogênio ligado (13.5 a 4.8 %) a qual é maior para menores valores de temperatura de deposição, ii) estimamos a provável forma de ligação dos átomos de hidrogênio (em voids do tamanho de uma vacância - bulklike ou na superfície interna de voids maiores - surfacelike). Calculamos o parâmetro de microestrutura $R = \int_{\text{bulklike}} \alpha/\omega \, d\omega / \int_{\text{surfacelike}} \alpha/\omega \, d\omega$ (α = coef. absorção, ω = frequência), o qual é menor para menores temperaturas de deposição indicando uma maior contribuição do modo surfacelike.

FAPESP, CNPq.

OTIMIZAÇÃO DE FILMES DE a-Ge:H.

FAJARDO, F.; ZANATTA, A. R.; MULATO, M.;
CAMPOMANES, R.; CHAMBOULEYRON, I.
UNICAMP, IFGW.

Filmes de Germânio Amorfo Hidrogenado (a-Ge:H) de qualidade opto-eletrônica são necessários para o estudo de propriedades estruturais, dopagem e fabricação de dispositivos. Neste trabalho apresentamos um estudo da influência das condições de preparação nas propriedades opto-eletrônicas dos filmes de a-Ge:H. Os filmes de a-Ge:H foram preparados num reator de r.f. sputtering, bombardeando um alvo de Ge cristalino (99.999 %) numa atmosfera de $Ar + H_2$. A pressão base antes da deposição é da ordem de $1 \cdot 10^{-6} \text{ mbar}$. Dentre os parâmetros de deposição a que se têm controle foram variados: temperatura do substrato, pressão parcial de H_2 , pressão parcial de Ar, potência de r.f. e volume da câmara. Os filmes foram caracterizados mediante medidas de transmissão na faixa de NIR-VIS para obtenção das constantes ópticas (índice de refração, espessura e *gap* óptico pelo método de Tauc), medidas de IR para determinação de hidrogênio ligado e seu provável sítio de ligação, além de medidas de condutividade no escuro em função da temperatura para determinação da energia de ativação e σ_{RT} . Variações nas propriedades opto-eletrônicas e estruturais, em função dos parâmetros de deposição serão apresentadas e discutidas.

Apoio: FAPESP, CNPq.

INVESTIGAÇÃO DOS ESTADOS DO ÁTOMO DOADOR EM n-AlGaAs

SCALVI, L. V. DE A.

UNESP - Bauru

LI, M. S.; MINAMI, E.; OLIVEIRA, L. DE

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

A presença dos chamados centros DX em ligas de Arseneto de Gálio e Alumínio do tipo n é um fato que tem sido amplamente investigado e divulgado. Também tem sido investigada a presença de outros estados relacionados às impurezas doadoras como o estado hidrogênico ligado à banda X que seria responsável pela captura de elétrons a temperaturas menores que 60 K, em AlGaAs de bandgap indireto¹, ou de um estado de simetria A₁ que dominaria as propriedades de trans-

porte a temperaturas em torno de 10 K². Medidas elétricas e óticas de amostras de AlGaAs a temperaturas baixas devem fornecer informações fundamentais ao estudo desses defeitos. O grande problema desse tipo de caracterização é a criação de estados de transporte metaestáveis que poderiam mascarar a presença de outros, devido à geração da chamada fotocondutividade persistente. Nesse trabalho nós realizamos medidas espectroscópicas em AlGaAs de diferentes composições e discutimos a presença de possíveis estados do átomo doador. [1]-J.E.Dmochowski et al. Phys. Rev. B **40**, 9671 (1989) [2]-J.E.Dmochowski et al. Semic. Sci. and Technol. **6**, 476 (1991)

SUPERCONDUTIVIDADE

Sistemas Supercondutores (SUC) -
19/05/93

INTERFACES IN HIGH- T_c SUPERLATTICES

GUIMPEL, J.

Centro Atômico Bariloche - CNEA, (8400) Bariloche, Argentina

FULLERTON^a, E. E.; NAKAMURA^b, O.; SCHULLER, I. K.

Physics Dept.0319, University of California-San Diego, La Jolla 92093-0319, USA

The good lattice matching between the non-superconducting $\text{PrBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ (PrBCO) and the superconducting RBCO compounds has motivated the use of that material as buffer and/or separator layer in the growth of thin films and superlattices. Due to this fact it is very important to quantitatively understand the PrBCO/RBCO interface structure and its possible effects on the superconductivity. Using an x-ray diffraction spectrum refinement technique for superlattices we obtain quantitative information on the disorder mechanisms present at the interfaces showing that these are non-negligible. The possible influence of this non-ideality on the superconductivity will be discussed.

Work supported by CONICET PID 300390088 (JG), Fundación Antorchas Project 12215/1 (JG), and the Office of Naval Research grant #N00014-91J-1438 (JG, EF, ON, IKS). We thank Prof. K. Kitazawa and Dr. T. Isumi for arranging the Tonen-UCSD collaboration.

^a Present address: Materials Science Division, Argonne National Laboratory, Argonne, IL 60439, USA. ^b Permanent address: Tonen Corp., 1-3-1 Nishi-Tsurugaoka, Ohi-Machi, Iruma-Gun, Saitama 354, Japan.

SUPERCONDUTIVIDADE SUPERFICIAL EM SISTEMAS GRANULARES

LIMA, O. F. DE

UNICAMP

A possibilidade de ocorrência de supercondutividade superficial nos óxidos de alta T_c , bem como em qualquer outro sistema granular, será discutida. A parte arredondada que aparece nas curvas de magnetização ($MvsT$) próximo a T_c é interpretada como uma resposta universal de qualquer sistema granular, associada com a grande razão superfície/volume [O. F. de Lima, Solid State Commun.,81(5), 411(1992); R. Andrade Jr., M. A. Avila, S. P. de Campos, O. F. de Lima, IEEE Trans. Appl. Superc. 3(1993), em impressão]. Expressões distintas para magnetização superficial e volumétrica, como função de H e T , foram derivadas e ajustadas em dados existentes na literatura, para monocristais de $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ ($\vec{H} // \vec{c}$). Os ajustes, com erros entre 2% e 3%, forneceram valores bem concordantes com a literatura para os seguintes parâmetros: $\xi_o \sim 16\text{Å}$; $\lambda_o \sim 1325\text{Å}$; $H_{c0} \sim 11.32\text{KOe}$; $T_{c2}(H=0) = 91.5\text{K}$. Parâmetros nunca antes determinados para os High- T_c são: $T_{c3}(H=0) = 94.5$; $L \sim 1930\text{Å}$; $\beta \sim 1.19$, onde T_{c3} é a temperatura de nucleação superficial [T. Giamarchi, M. T. Méal-Monod, Oriol T. Valls, Physical Review B41,11033(1990)], $2L$ é a distância

média entre os planos de "twins" e β é uma constante da teoria de Abrikosov, associada com a simetria da rede de fluxóides. Procedimentos simples para localizar H_{c2} e H_{c3} nas curvas de magnetização ($MvsT$), ou susceptibilidade ($\chi vs T$), serão apresentados. (Agradeço o apoio financeiro da FAPESP e CNPq)

EFEITOS DA CORRELAÇÃO ELETRÔNICA EM FULLERENOS DOPADOS.

MARTÍNEZ, G.

Univ. Federal do Rio Grande do Sul

Os efeitos da correlação eletrônica nas propriedades físicas dos fullerenos dopados com átomos alcalinos são, no momento, uma grande interrogante. Desde a descoberta destes notáveis compostos a caracterização experimental revelou-se muito complexa, envolvendo diversas fases: semicondutora, metálica, isolante, com desordem rotacional e supercondutora. A temperatura crítica da fase supercondutora destes materiais é duas ordens de grandeza maior que o esperado se comparados com compostos de grafite intercalado. A explicação deste fato pode ser devido à influência da correlação eletrônica entre os orbitais moleculares tipo π que conformam a banda ativa deste material. Argumentos a

favor desta idéia serão discutidos na proposta de um modelo tipo Hubbard para explicar as possíveis fases destes compostos.

TORQUE MAGNÉTICO EM SUPERCONDUTORES NO REGIME DE CADEIAS DE VÓRTICES.

DORIA, M. M.

Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Caixa Postal 38071

OLIVEIRA, I. G. DE

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Neste trabalho obtemos o torque magnético intrínseco nos supercondutores anisotrópicos no regime onde o comprimento de penetração de London é muito maior do que o comprimento de coerência. Considera-se a situação tal que o campo magnético externo não está alinhado com os eixos principais do supercondutor e existe um ângulo θ entre a indução magnética e o eixo de anisotropia do cristal. Nossos resultados aplicam-se para quaisquer valores de indução magnética generalizando a expressão obtida por Kogan^a no limite de induções magnéticas elevadas. Para induções magnéticas suficientemente baixas que permitam o surgimento das cadeias de vórtices^b ao longo do plano θ , obtemos novas propriedades do torque magnético.

^aV.G.Kogan, Phys. Rev. B 38(1988)7049

^bC.A. Bolle et al., Phys. Rev. Lett. 66 (1990) 112

TEORIA DE APRISIONAMENTO COLETIVO DE VÓRTICES APLICADA A SUPERCONDUTORES DE ALTOS CAMPOS.

NUNES, C. B.

Centro de Materiais Refratários-FAENQUIL, CP 16, 12600-000 Lorena, SP

PINATTI, D. G.

Centro de Materiais Refratários-FAENQUIL - Lorena SP e Instituto de Física Gleb Wataghin-UNICAMP - Campinas, SP

Este trabalho propõe uma modificação à Teoria de Aprisionamento Coletivo onde é considerada a presença de linhas de discordâncias na rede de vórtices. A variação da energia total do sistema vórtices - centros de aprisionamento, δW_T , é calculada. No cálculo de δW_T são consideradas as energias próprias de uma rede triangular de discordâncias em cunha da rede de vórtices e duas redes de discordâncias em hélice da rede de vórtices. A energia de interação entre cunhas paralelas, hélices paralelas, cunhas e hélices perpendiculares e hélices perpendiculares também é considerada. Na expressão para δW_T , além da energia das discordâncias, consideramos a energia elástica dos vórtices deformados que não participam da formação de discordâncias.

A partir da minimização de δW_T com respeito ao volume de coerência $V_c \Theta$ possível obter através de simulação computacional, curvas de densidade de força de aprisionamento F_p em função do campo magnético reduzido $b=B/B_{c2}$. Apresentamos uma comparação dos dados simulados com resultados experimentais para o composto com centros de aprisionamento artificiais (Cu/NbTi/Nb). Observa-se que a situação de menor energia é aquela para a qual todos os vórtices participam da formação de discordâncias, confirmando que a rede de vórtices é muito desordenada em sistemas tridimensionais. Este estado de alta desordem da rede de vórtices é denominado na literatura de "spaghetti state".

Óxidos Supercondutores (SUC, SEM) - 19/05/93

ESTRUTURA LOCAL DO ⁵⁷Fe E ¹¹⁹Sn EM ÓXIDOS SUPERCONDUTORES E SEMICONDUTORES (La, Gd)_{1.85}Sr_{0.15}CuO₄

BAGGIO-SAITOVITCH, E.; JÁCOME, M. M.;

CANDELA, D. S.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

O ⁵⁷Fe e ¹¹⁹Sn tem sido utilizados para substituir o Cu em vários óxidos supercondutores, o que conduz a degradação das propriedades supercondutoras. A ordenação dos átomos de oxigênio e os defeitos locais podem influenciar este processo. A informação de tais níveis locais de defeitos podem ser obtidos por espectroscopia Mössbauer no ⁵⁷Fe e no ¹¹⁹Sn.

A série de óxidos (La_{1-x}Gd_x)_{1.85}Sr_{0.15}CuO₄ é um sistema adequado para o estudo do efeito da substituição de Cu por Fe ou Sn, já que esta série mostra três estruturas (T, T* e T') a longo de todo intervalo da concentração de Gd (0.0 < x < 1.0), com ordenação do oxigênio com o Cu, octaédrica, piramidal e planar. Estas estruturas são comuns para diferentes óxidos supercondutores e aqui elas são formadas na mesma série de compostos. Os estudos estão sendo feitos a temperatura ambiente.

Espectroscopia Mössbauer do ⁵⁷Fe e do ¹¹⁹Sn no La_{1.25}Nd_{0.60}Sr_{0.15}CuO₄: evidência de ordenamento magnético local abaixo de $\approx 32K$

BAGGIO-SAITOVITCH, E.; AZEVEDO, I. S.;

SCORZELLI, R. B.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

BREUER, M.; BÜCHNER, B.; MICKLITZ, H.

Univ. zu Köln - Köln

ABD-ELMEGUID, M. M.

Univ. zu Ruhur - Bochum

Estudos de efeito Mössbauer do ^{57}Fe e do ^{119}Sn em amostras de $\text{La}_{1.25}\text{Nd}_{0.60}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$, dopadas com 0.5at.% de ^{57}Fe (^{119}Sn) em substituição ao Cu, na região de temperatura $300\text{K} > T > 4.2\text{K}$ revelam um ordenamento magnético local a $T_{\text{M}} \approx 32\text{K}$ em ambas as amostras dopadas com ^{57}Fe e ^{119}Sn . O ordenamento magnético local é evidenciado pela presença de um alto campo hiperfino transferido ($B_{\text{sim}} \approx 11\text{T}$) nos núcleos de ^{119}Sn . Tendo em vista, que esse campo não está presente no La_2CuO_4 antiferromagnético, nem no $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$ supercondutor, nem mesmo no $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ com alta concentração de Sr, a ocorrência de tais correlações locais de spin pode ser uma indicação da existência de uma fase tetragonal não supercondutora de baixa temperatura do $\text{La}_{1.25}\text{Nd}_{0.60}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$.

SUPERCONDUCTIVIDADE NOS SISTEMAS $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Bi}_{1-y}\text{Pb}_y\text{O}_{3-\delta}$ e $\text{Bi}_{2-x}\text{Pb}_x\text{Sr}_{2-y}\text{Pr}_y\text{CuO}_{6+\delta}$

DOMÍNGUEZ, A. B.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

EL-SHAZLY, O. M. M.; KAPUSTA, S.; LI, J.;

MAHMOOD, A.; REGGIANI, L.

International Centre for Theoretical Physics

Atualmente já são conhecidos e estudados muitos compostos diferentes na família dos óxidos perovskitas que são supercondutores a temperaturas mais altas que os supercondutores convencionais. Seria interessante também pesquisar outras famílias de perovskitas que tenham temperatura de transição supercondutora mais baixa.

Posto que um conhecimento adicional acerca dos compostos de baixa T_c pode dar informações sobre os mecanismos da supercondutividade em toda a família de compostos, várias substituições com Pb no sistema $(\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x)\text{BiO}_3$ e com Pb e Pr no sistema $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_{6+\delta}$ têm sido estudadas.

Neste trabalho apresentamos a preparação e a caracterização básica de duas amostras: $(\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4})(\text{Bi}_{0.95}\text{Pb}_{0.05})\text{O}_3$ preparada em ar (amostra G2A) e em atmosfera de nitrogênio (amostra G2D) e $(\text{Bi}_{1.7}\text{Pb}_{0.3})(\text{Sr}_{1.5}\text{Pr}_{0.5})\text{CuO}_{6+\delta}$ preparada em ar (amostra G2B) e em atmosfera de nitrogênio (amostra G2C). A caracterização foi feita por meio de difração de raios-X, espectroscopia infravermelha, resistividade, suscetibilidade a.c. e medidas da corrente crítica. O conteúdo total de oxigênio das amostras foi determinado por titulação iodométrica.

RESISTÊNCIA NEGATIVA OBSERVADA EM CURVAS $V_{\text{vs}}I$ DE UM FILME EPITAXIAL DE $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\gamma}$ RECOBERTO COM Au

ANDRADE JR, R. DE; LIMA, O. F. DE

UNICAMP

SHI, D.

Argonne National Laboratories

Medidas de $V_{\text{vs}}I$ realizadas em filme epitaxial de $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\gamma}$, com aproximadamente 1200 \AA de espessura, eixo \vec{c} ortogonal à superfície e com uma corrente crítica de $3.8 \cdot 10^4 \text{ A/cm}^2$ a 77.0 K , passaram a apresentar um comportamento anômalo após este ser parcialmente revestido com um filme de Au de aproximadamente 2000 \AA . As medidas foram realizadas pelo método de 4 pontas convencional (DC), com contatos de Ag e uma resistência de contato de $1 \text{ m}\Omega$. O filme de Au foi depositado, por meio de Sputtering, entre os contatos para leitura de potencial ocupando toda a área entre estes. Após a deposição do Au as curvas V vs I passaram a apresentar uma região de inclinação negativa onde inicialmente $V=0.0 \mu\text{V}$. Esta característica é linear representando uma resistência negativa de aproximadamente $80.0 \mu\Omega$ sobreposta às características originais do filme, a subtração desta leva a curvas $V_{\text{vs}}I$ similares as do filme não revestido, com os mesmos valores de corrente crítica. A 77.0 K o coeficiente linear do trecho de inclinação negativa das curvas (Resistência Negativa) aparentemente não apresenta dependência com \vec{B} (no intervalo de $0.0-7.0 \text{ T}$), para \vec{B} aplicado tanto paralela quanto ortogonalmente ao eixo \vec{c} do filme e perpendicular à direção da corrente. (R.A.J. agradece ao CNPq-RHAE pelo suporte financeiro).

Supercondutores: Experimentos (SUC) - 19/05/93

FLUTUAÇÕES TERMODINÂMICAS NA MAGNETOCONDUTIVIDADE DO

$\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$

COSTA, R. M.; PUREUR, P.; SCHAFF, J.

Instituto de Física - UFRGS

A transição resistiva sob campo magnético do YBaCuO policristalino é estudada no limite de campos fracos ($H < 600\text{G}$) aplicados paralelamente à corrente. A presença do campo magnético acentua o caráter em duas etapas da transição, conforme análises detalhadas dos resultados usando a derivada da resistividade em função da temperatura e a derivada logarítmica da condutividade em relação à temperatura. Na fase normal evidenciamos o papel de flutuações Gaussianas e críticas, sendo que o campo magnético favorece o aparecimento de flutuações de baixa dimensionalidade porém suprime o caráter fractal observado em campo nulo. No limite estudado, os efeitos do campo são mais importantes no regime de aproximação ao estado de resistência nula, onde predominam processos percolati-

vos ligados à natureza granular do sistema. A análise destes resultados sugere que este regime corresponde a um intervalo crítico em campo magnético nulo, o qual é severamente afetado pela aplicação do campo. Estes resultados também nos permitem discutir a relação entre as linhas de irreversibilidade obtidas por magnetização e magnetoresistência.

CALOR ESPECIFICO Y TRANSICIONES DE FASE DE OXIDOS METALICOS SUPERCONDUCTORES

MONDRAGÓN, J. C. T.

Universidad Popular del Cesar, Valledupar, Colombia

ZAPATA, R. A. V.

Universidad del Valle, Cali, Colombia

Se presentan resultados de medidas calorimétricas efectuadas a muestras policristalinas superconductoras de las series Y-M-Cu-O y Bi-Sr-Ca-Cu-O (M=Ba, Sr, Ca) que preparamos por reacción de estado sólido. Dichas medidas fueron hechas utilizando la técnica ac en el rango de 80 a 750 K. En las mismas muestras se realizaron medidas de resistencia eléctrica en la región cercana a la temperatura de transición superconductora.

Los resultados evidencian un comportamiento anómalo en el estado normal, entre las temperaturas 200 a 250 K. atribuible a inestabilidades estructurales de los sistemas basados en CuO. Además se observó la transición al estado superconductor como un salto gradual de una pendiente a otra en el comportamiento del calor específico. También se observaron los cambios en el calor específico por encima del ambiente, evidenciando las pérdidas de oxígeno de los compuestos.

ESTUDO DA SUPERCONDUTIVIDADE SUPERFICIAL EM HTSC

TELLEZ, D. L.; OLIVEIRA, A. C. DE; AGUIAR, A.

UnB

O estudo da absorção de micro-ondas e radiofrequência por cerâmica supercondutora a alta temperatura tem sido registrada desde a descoberta do YBaCuO. Essa curva de absorção aparece em campo magnético zero, mas é independente da frequência. Alguns autores tem sugerido como causa a flutuação térmica como origem dessa curva de absorção, outros tem vagamente atribuído a esse efeito, não homogeneidade na amostra. Outra proposta considerada foi que essa absorção seja devido a influência do campo magnético nas correntes Josephson intergranular na amostra. As idéias principais sobre esse tema já foram revistas, mas ainda não são conclusivas. Sem se preocupar com a natureza da amostra, um magnetômetro foi desenvolvido utilizando essa propriedade dos HTSC. Neste trabalho pretendemos estudar o efeito da absorção não ressonante em função da compactação da amostra supercondutora em monocristal e filme fino. Os indicativos são que essa

absorção é um efeito de superfície.

COMPORTAMENTO UNIVERSAL DA RAZÃO H_{C3}/H_{C2} PARA SISTEMAS SUPERCONDUCTORES GRANULARES

AVILA, M. A.; ANDRADE JR, R.; LIMA, O. F. DE

Instituto de Física - UNICAMP

Utilizando-se as expressões para magnetização superficial e volumétrica pode-se demonstrar que na vizinhança da transição supercondutora vale:

$$h(t) = 1.7 \times \{[(1-t)^{-8/9} + A((1-t^4)^{1/4}/(1+t^2)^2(1-t)^{3/2})] \times (1-t(T_3(0)/T_2(0)))\}^{-1}$$

onde $h(t) = H_{C3}(t)/H_{C2}(t)$, $t = T/T_3(0)$; sendo $H_{C3}(t)$ e $T_3(H)$ o campo crítico e a temperatura crítica para a nucleação superficial e $H_{C2}(t)$ e $T_2(H)$ o campo crítico e a temperatura crítica para a nucleação volumétrica. O parâmetro de ajuste A está associado diretamente ao nível de granularidade da amostra e ao critério de definição para $T_3(H)$, sendo proporcional ao produto $\mu L^{3/2}$, onde μ é o menor valor detectável de magnetização e $2L$ é a espessura média dos grãos supercondutores na direção transversal ao campo aplicado H . Nesta comunicação mostraremos que, conforme já previsto anteriormente [O. F. de Lima, Solid State Commun. 81, 411 (1992)], há uma boa concordância no ajuste de $h(t)$ para diferentes sistemas granulares, tanto os convencionais como os novos óxidos supercondutores de alta T_C . Apresentaremos dados obtidos em nosso laboratório para três amostras: barra sinterizada de YBaCuO; pó de YBaCuO ($\leq 37\mu m$); e pó de Nb ($\leq 37\mu m$). Agradecemos o apoio financeiro da FAPESP e CNPq.

Estudo da Distribuição dos Acoplamentos Intergranulares em Amostra Policristalina de

$YBa_2Cu_3O_{7-y}$

MOREIRA, F. M. A.; CARVALHO JÚNIOR, J. S. DE; ORTIZ, W. A.

Grupo de Supercondutividade e Magnetismo - DF/UFSCar

LIMA, O. F. DE

Instituto de Física Gleb Wataghin - UNICAMP

É bem sabido que nos óxidos supercondutores de alta T_c os efeitos causados pela granularidade são bastante realçados, produzindo uma distribuição de correntes críticas nas regiões intergranulares. Este problema é especialmente relevante em amostras policristalinas (ex. sinterizadas) onde é maior a fração de regiões intergranulares. Recentemente foi proposto um modelo (O.F.Schilling et al. Phys. Rev. B47, April/93) que permite determinar a forma da distribuição, $N(h)$, de correntes críticas intergranulares, a partir de medidas das

componentes real ($4\phi\chi'$) e imaginária ($4\phi\chi''$) da susceptibilidade AC, em função do campo excitador, h . Nesta comunicação apresentaremos os resultados das medidas de χ' e χ'' em função de T , h , e do campo externo H ($77K \leq T < 90K$; $0 \leq h \leq 10e$; $10e \leq H \leq 4000e$). Os resultados foram obtidos para uma amostra de $YBa_2Cu_3O_{7-y}$ produzida pelo método de difusão na fase sólida. A análise preliminar dos dados nos permite concluir que apesar da amostra utilizada ser bastante pura ($T_c \simeq 92K$) ela apresenta um fraco acoplamento intergranular, com a distribuição $N(h)$ confinada entre $0 \leq h < 0.10e$. //

Agradecemos o apoio financeiro do CNPq/RHAE, CAPES e FAPESP.

OTIMIZAÇÃO DA TEMPERATURA E DO TEMPO DE TRATAMENTO TÉRMICO PARA A FORMAÇÃO DA FASE Bi-2223 EM FITAS SUPERCONDUTORAS

SUZUKI, P. A.; FANTINI, M. C. A.

Instituto de Física, USP, São Paulo, SP

MEDUGNO, A. C.

Pirelli S.A., São Paulo, SP

O composto supercondutor Bi-2223 ($(Bi, Pb)_2Sr_2Ca_2Cu_3O_y$) apresenta uma região de estabilidade bastante estreita no diagrama de fases. A formação da fase Bi-2223 ocorre através de um processo peritético que envolve a decomposição dos precursores contendo Pb, Ca e Cu e da fase Bi-2212 ($(Bi, Pb)_2Sr_2CaCu_2O_y$), cuja presença garante a conexão intergrãos durante a preparação de fitas supercondutoras. Neste trabalho, pós supercondutores comerciais de duas procedências foram encapsulados em tubos de Ag e submetidos a ciclos de esforço mecânico (prensagem ou laminação) e tratamento térmico. O processo de sinterização ocorreu em temperaturas que variaram de 838C a 859C, por períodos de tempo entre 25h e 175h, a fim de se otimizar as condições de obtenção da fase única Bi-2223, associada à uma máxima corrente crítica. As fitas produzidas foram caracterizadas por difração de raios-X, microscopia eletrônica de varredura e medidas de densidade de corrente crítica. O melhor intervalo de tratamento térmico foi determinado através da análise da razão entre as intensidades integradas das fases Bi-2223 e Bi-2212. Verificou-se que a otimização das condições de sinterização para a obtenção de fase única depende da procedência do pó comercial de partida. Portanto não é possível generalizar as condições de preparação de fitas supercondutores produzidas com material comercial de diferentes origens.

ESTUDO DE PROPRIEDADES MECÂNICAS EM CERÂMICAS SUPERCONDUTORAS COM BASE EM

Bi-Sr-Ca-Cu-O DOPADAS COM CHUMBO

JURELO, A. R.; DUMKE, V. R.

Laboratório de Materiais - Departamento de Física - UFPR

Foram realizados estudos em cerâmicas supercondutoras com base em Bi-Sr-Ca-Cu-O, de acordo com a fórmula $Bi_{2-x}Pb_xSr_2Ca_2Cu_3O_y$, na qual x assume valores de $x = 0,0$ a $x = 1,0$. Destes, observamos que a introdução do chumbo produziu alterações nas propriedades mecânicas, em particular na microdureza Vickers e no processo de supercondução. Através de medidas de susceptibilidade e observações em microscopia ótica e eletrônica, foi possível perceber as alterações produzidas pela substituição do bismuto pelo chumbo nesta base, mostrando que na amostra com concentração $x = 0,0$ e $x = 1,0$, duas regiões apresentaram proporções aproximadamente iguais (conhecidas como supercondutoras e isolantes), enquanto na concentração $x = 0,4$, observou-se apenas a região com propriedades supercondutoras. Na medida da microdureza Vickers, utilizando um microdurômetro Vickers, observou-se alterações na plasticidade. Através da medida da microdureza, observou-se que a amostra com concentração de chumbo $x = 0,4$ possui a maior microdureza. Acredita-se que o aumento desta, deve-se ao aumento da região supercondutora bem como da diminuição da região com propriedades isolantes. Utilizando um porosímetro de mercúrio, obtivemos informações a respeito da porosidade. Apesar da amostra com concentração de chumbo $x = 0,4$ apresentar a menor faixa em que se encontram 80 % dos poros, acredita-se que a influência deste sobre a medida da microdureza tenha sido pequena, já que o diâmetro dos cristais, em média, foram sempre muito menores do que o diâmetro das identificações. Com relação ao processo de supercondução, medidas de resistividade realizadas nestas cerâmicas por outros pesquisadores, com a mesma base e com a mesma estequiometria, mostraram que a temperatura em que a resistência vai a zero é mínima na amostra com concentração de chumbo em torno de $x = 0,4$. Os resultados deste estudo mostraram claramente que isto é devido ao fato de que, nesta concentração houve uma redução drástica da porosidade, aumentando a adesão entre os grãos, além da diminuição da região escura com propriedades isolantes, diminuindo portanto a resistência intergranular.

ON THE MAGNETIC AND ELECTRICAL PROPERTIES OF THE $RB_2Fe_3O_x$ CERAMIC OXIDES (R=La,Nd,Sm,Eu,Gd,Tb,Dy,Ho,Y): FE BASED ISOMORPHS OF THE $RB_2Cu_3O_x$ SUPERCONDUCTORS

ELZUBAIR*, A.; ELMASSALAMI*, M.

Physics Department, University of Khartoum, P.O.Box

321, Khartoum, SUDAN.

BAGGIO-SAITOVITCH, E.

CBPF

The $RB_2Fe_3O_x$ (R=La,Nd,Sm,Eu,Gd,Tb,Dy,Ho,Y) ceramic oxides are Fe based isomorphs of the $RB_2Cu_3O_x$ HTc tripervoskite superconductors. Resistivity and magnetic studies as well as Mossbauer investigation have been employed so as to characterize these compounds. For the temperature region between 1.2K and 300K, these compounds, except for the case wherein R=La,Nd,Sm and Gd, are found to be antiferromagnetic semiconductors. Moreover, when R=La,Nd,Sm and Gd, the temperature dependence of the obtained physical parameters can be explained by the onset of the charge disproportionation effects wherein, at low temperature, $2Fe^{+4} = Fe^{+5} + Fe^{+3}$. Finally, as it is expected, most of the physical properties are found to be sensitive to the sample history.

SUBSTITUIÇÃO DE CuO POR NiS EM CERÂMICAS DE $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ ANALISADA POR ESPECTROSCOPIA DE EMISSÃO DE RAIOS-X

AGUIAR, J. A.; FERREIRA, J. M.

Departamento de Física - UFPE

PAVÃO, A. C.

Departamento de Química Fundamental - UFPE

KURMAEV, E. Z.

Institute of Metal Physics, Russian Academy of Sciences-Ural Division, 620219 - Ekaterinburg GSP-170 - Russia

O efeito da substituição de CuO por NiS na estrutura eletrônica de cerâmicas de $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ é analisado através de espectroscopia de emissão de raios-X. Resultados experimentais do espectro de emissão $SK_{\alpha_{1,2}}$ (transição $1S \rightarrow 2p$) em amostras de $YBa_2[(CuO)_{1-x}(NiS)_x]_3O_{4-\delta}$ com $x = 0,01$ e $0,03$ são comparados com os espectros obtidos em amostras de NiS , CuS , $BaSO_4$ e $NiSO_4$. É observado que a energia do pico da transição $1S \rightarrow 2p$ nas amostras de $YBa_2[(CuO)_{1-x}(NiS)_x]_3O_{4-\delta}$ coincide com o obtido em $BaSO_4$ e $NiSO_4$ e difere do observado em NiS e CuS . Estes resultados indicam que os íons de S têm valência S^{6+} associada com a formação de sulfato. Trabalho financiado pelo CNPq, FINEP e the Russian State Programme on High- T_c Superconductivity.

SUPERCONDUTIVIDADE NO SISTEMA

$YBa_2[(CuO)_{1-x}(AS)_x]_3O_{4-\delta}$ ($A = Fe$ e Zn)
AGUIAR, J. A.; FERREIRA, J. M.; RAMOS, A. S.;
BARBOSA, M. V.

Departamento de Física - UFPE

GOMES, A. K. B.; SÁ, P. C. A.; PAVÃO, A. C.

Departamento de Química Fundamental - UFPE

MARTÍNEZ, E. C.

Dep. Técnico de Estado Sólido y Criogenia, Instituto de Investigacione em Materiales, U.N.A.M. Mexico - D.F.

Amostras

cerâmicas do tipo $YBa_2[(CuO)_{1-x}(AS)_x]_3O_{4-\delta}$, com $A = Fe$ e Zn e $x = 0,01; 0,02; 0,05; 0,1$ e $0,15$ foram preparadas por reação sólida dos óxidos e sais constituintes. A caracterização foi feita através de medidas de susceptibilidade magnética ac , resistividade e difração de raios-x. Para pequenas dopagens de FeS observa-se uma transição diamagnética estreita com um pequeno decréscimo na temperatura de transição supercondutora (T_c) quando comparada com a da amostra pura ($x = 0$); para dopagens de FeS mais elevadas há uma redução apreciável em T_c e a transição se alarga. Para toda faixa de concentração estudada as amostras são ortorrômbicas e não é observado a presença de outras fases nos difratogramas de raios-x. Quando o dopante usado é ZnS observa-se um apreciável decréscimo em T_c mesmo em pequenas dopagens. No entanto, como no caso da dopagem, com FeS este decréscimo é menor que o observado quando se dopa com Fe_2O_3 * 3923. ou ZnO **

*I.Felner, I. Nowik and Y. Yeshurum, Phys. Rev. B. **36**(1987)

R. Liang, T. Nakamura, H. Kawaji, M. Itoh and T. Nakamura, Physica C **170 (1990) 307.

Lower Critical Magnetic Field, Penetration Depth and Coherence Length of Superconducting Rb_3C_{60} .

BUNTAR, V. A.

CIFMC - UnB

SOKOLOV, A. I.

Electrical Engineering Institute, St. Petersburg, 197376 Russia

POLITIS, C.; ECKERN, U.

KfK, IFNP, POB 3640, Karlsruhe, Germany

The penetration depth λ and the coherence length ξ in Rb_3C_{60} fullerene are determined by means of magnetic measurements in fields up to 50 kOe. For Ginzburg-Landau coherence length the estimate $\xi_{GL}(0)=23$ Å is obtained, while the magnitude of $\lambda_{GL}(0)$ extracted from the high-field data turns out to lie between 1200 and 1400 Å, with the upper value being more likely. Non-superconducting diamagnetic susceptibility is also measured and found to be equal to $-(0.60 \pm 0.02) \times 10^{-5}$ which is an order of magnitude higher than that of undoped fullerene. The lower critical magnetic field H_{c1} is estimated by different methods. The zero temperature value is found to be given by $H_{c1} = 162 \pm 10$ Oe, and penetration depth is $\lambda_L = 2150 \pm 100$ Å. The Bean model analysis leads to threshold fields of 53 Oe for $T = 5$ K, and 40 Oe for $T = 17$ K. The big influence of intergranular connections on H_{c1} is demonstrated. Good agreement between the low- and the high-field analysis

is found.

CRITICAL CURRENTS IN HIGH- T_c THIN FILMS

FERNANDES, A. A. R.

IME

CHAN, I. N.; GUIMPEL, J.; LEDERMAN, D.;
SCHULLER, I. K.

Univ. of California - San Diego

The anisotropic layered structure of the high T_c superconductor results in a strong anisotropy of the critical current, resistivity, and critical fields. In recent years, there has been a growing interest in the measurements of critical currents in high T_c films, since they may aid in the understanding of high temperature superconductivity and because of their possible future technological applications. In this work, we report the measurement of transport critical current densities in a wide variety of high T_c superlattices and thin films. We find that the temperature dependence of the critical current density J_c for all samples may be collapsed into a single curve through the scaling relation $J_c = J_c(0)(1 - t)^{1.6}$. This scaling relation is found to remain valid for all fields up to 5 Tesla and field directions with respect to the c -axis of the sample, with the field kept perpendicular to the current.

EXPANSÃO TÉRMICA DE COMPÓSITOS YBaCuO/Ag

HAETINGER, C. M.; KUNZLER, J. V.; PUREUR, P.

Instituto de Física - UFRGS

GHIVELDER, L.

Instituto de Física - UFRJ

REICH, S.

Weizmann Institut of Sciences - Israel

Construímos um dilatômetro linear, cujo princípio baseia-se num capacitor de placas paralelas, para desenvolver estudos de expansão térmica em compostos supercondutores de alta temperatura crítica. O dilatômetro é descrito em detalhe, assim como seu princípio de operação. A partir de uma calibração realizada com uma amostra de cobre, obtivemos uma sensibilidade em $\delta l/l$ da ordem de 10^{-7} . Medimos a expansão térmica do YBaCuO na forma policristalina e de seus compostos YBaCuO/Ag x wt% (x=6, 11 e 23) em temperaturas entre 4.2 e 120 K. Os dados permitem a obtenção de informações relevantes sobre os graus de liberdade eletrônico e da rede cristalina na fase supercondutora destes materiais.

Supercondutores de Alta Temperatura (SUC) - 20/05/93

PROPRIEDADES SUPERCONDUTORAS DE YBaCuO-Ag

GHIVELDER, L.; CASTILLO, I. A.

Instituto de Física - UFRJ

RODRIGUES JR, P.; PUREUR, P.

Instituto de Física - UFRGS

COHEN, L.; DHALLE, M.; CAPLIN, D.

Blackett Laboratory, Imperial College, London, UK

Foi realizado um estudo experimental das propriedades supercondutoras de compostos cerâmicos de YBaCuO-Ag. No processo de fabricação destes materiais (no Instituto Weizmann, Israel) cada grão de YBaCuO é recoberto individualmente com metal Ag, formando um composto supercondutor com interface entre grãos bem definida. Foram investigadas amostras com 6, 11 e 23% Ag, e uma amostra referência de YBaCuO. Medidas de calor específico indicam que a transição calorimétrica tende a desaparecer com a introdução de prata no material. No YBaCuO-23%Ag não há salto de calor específico, e a transição é detectada apenas na derivada dC/dT . Resultados de resistividade elétrica revelam que a corrente crítica aumenta em função da concentração de Ag, e a temperatura crítica de transição é a mesma em todas amostras investigadas quando as medidas são feitas com correntes suficientemente baixas. Mais recentemente vem sendo realizadas medidas de susceptibilidade e magnetização nestes materiais. Os resultados são fundamentais para determinar a corrente crítica intra-grão, e estabelecer sem ambiguidade o papel desempenhado pela prata nas propriedades supercondutoras dos compostos investigados.

IRREVERSIBILIDADE MAGNÉTICA EM COMPÓSITOS NÃO-RANDÔMICOS Ag/YBaCuO (d)

SCHAF, J.; RODRIGUES JR, P.; PUREUR, P.

Instituto de Física - UFRGS

GHIVELDER, L.

Instituto de Física - UFRJ

REICH, S.

The Weizmann Inst. of Science, Israel

Estudamos as propriedades de expulsão de campo magnético (Efeito Meissner), de blindagem magnética, de bloqueio de fluxo magnético e de irreversibilidade magnética em função de temperatura e de campo aplicado, para compostos não-randômicos Ag/YBa₂Cu₃O₇, contendo aditivamente 0,6, 11 e 23 % do peso em prata. Os resultados mostram, que a prata afeta drasticamente o Efeito Meissner e de bloqueio de

fluxo, porém, seu efeito satura aos 10%. A linha de irreversibilidade no plano H - T é deslocada 2 K para o lado de T menores nas amostras de 11 e 23%, evidenciando também o efeito de saturação. O deslocamento não é dramático se comparado aos deslocamentos provocados por desoxigenação do $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$. O que é notável é que os deslocamentos produzidos pela Ag ou pela desoxigenação são qualitativamente idênticos. Sabemos que a irreversibilidade magnética dos óxidos supercondutores é dominada pelos efeitos intragranulares, que as interfaces de prata pouco devem contribuir. Isto nos reconduz à conclusão de outros autores, a de que a prata absorve e retém algum oxigênio, liberado pelo supercondutor, durante o tratamento em alta temperatura. Portanto os grãos supercondutores apresentam, nos compósitos, deficiência de oxigênio e isto explica a semelhança entre o comportamento magnético dos compósitos e dos $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ desoxigenados.

Superconducting glass behavior and frustration in polycrystalline $Sm_{2-x}Ce_xCuO_{4-y}$

JARDIM, R. F.

INSTITUTO DE FÍSICA, UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

ANDRADE, M. C. DE; MAPLE, M. B.

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

EARLY, E. A.

NIST, Gaithersburg, Maryland, USA

STROUD, D.

Department of Physics, The Ohio State University, Columbus, USA

A magnetic field was used to separate contributions to superconductivity from islands and inter-island Josephson coupling in polycrystalline samples of $Sm_{2-x}Ce_xCuO_{4-y}$ ($0.14 \leq x \leq 0.17$). The electrical resistivity below the Josephson coupling temperature T_{cj} is significantly larger in zero-field-cooled state than in the field-cooled state up to 1 kOe, implying metastable configurations. As the field is increased, T_{cj} decreases rapidly up to 1 kOe and saturates at higher fields. These observations indicate a superconducting glass state in a disordered Josephson array. The picture is sufficient to give a qualitative explanation for several physical properties of these materials: 1) a broadening of the resistive transition at small applied fields; 2) a strong enhancement of the resistively determined apparent $H_{c2}(T)$ curve below T_{cj} ; 3) a plateau in $J_c(H)$ curves; 4) the absence of a specific heat jump at T_{ci} ; 5) an insignificant diamagnetic signal at T_{ci} , and 6) the observed "anomalies" in the irreversibility line.

Preparation, formation kinetics, and properties of polycrystalline $Ln_{2-x}Ce_xCuO_{4-y}$; Ln = Nd, Sm; ($0 \leq x \leq 0.17$); obtained from a sol-gel precursor

JARDIM, R. F.

INSTITUTO DE FÍSICA, UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

BEN-DOR, L.

Department of Inorganic Chemistry, Hebrew University, Jerusalem, Israel

MAPLE, M. B.

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

Polycrystalline samples of $Ln_{2-x}Ce_xCuO_{4-y}$ (Ln=Nd,Sm; $0 \leq x \leq 0.17$) obtained from a sol-gel precursor were sintered and reduced under different conditions and studied by high-resolution X-ray powder diffraction, electrical resistivity, and magnetic susceptibility. X-ray diffraction measurements showed that the precursor, which is non-crystalline at temperatures as high as 300°C, undergoes several decomposition steps up to $\approx 500^\circ\text{C}$, where the beginning of $Ln_{2-x}Ce_xCuO_{4-y}$ ($x \approx 0$) formation is observed. At 700°C, the predominant phase is $Ln_{2-x}Ce_xCuO_{4-y}$ which coexists with CuO and CeO₂. Single-phase $Ln_{2-x}Ce_xCuO_{4-y}$ ($0 \leq x \leq 0.17$) is obtained by heat treating the precursor in air at 1000°C for 20 hours. Electrical resistivity measurements on samples sintered below and above the eutectic temperature and reduced under different conditions, reveal a semiconductor-like temperature dependence of the normal-electrical resistivity. In addition, a striking double resistive superconducting transition with a Josephson-like lower temperature transition seems to be a common characteristic of these polycrystalline samples. Magnetic susceptibility measurements reveal a significant diamagnetic contribution at 5 K which occurs only below the Josephson-coupling temperature. These features are discussed within the framework of a granular superconducting model.

Medidas Eléctricas e Magnéticas em Supercondutores I (SUC) - 21/05/93

LOSS OF INTERPLANE CORRELATION IN $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ SINGLE CRYSTALS BELOW THE IRREVERSIBILITY LINE

ARRIBÉRE, A. A.; PASTORIZA, H.; GOFFMAN, M. F.; CRUZ, F. DE
Centro Atómico Bariloche - CNEA, 8400 S. C. de Bariloche, Argentina
 MITZI, D. B.; KAPITULNIK, A.
Department of Applied Physics, Stanford University, Stanford, CA 94305

DC magnetization and the AC susceptibility measurements on $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ single crystals show that at the dc irreversibility line there is no long range order in the c direction. The dissipation peak measured at 7 Hz for interplane current takes place at a temperature well below the irreversibility line. Within this frame, the irreversibility line marks the temperature where quasi-two dimensional vortices start to be pinned while the long range correlation in the c axis is only reached at a much lower temperature. The experimental data clearly show the different nature of two dissipation peaks in the susceptibility: One related to the interplane currents and the other associated with the intraplane ones.

Análise de medidas de susceptibilidade magnética ac em supercondutores de alta T_c com base em distribuições de correntes críticas de blindagem.

SCHILLING, O. F.

Unicamp

AIHARA, K.; SOETA, A.; KAMO, T.; MATSUDA, S.
Hitachi Research Laboratory, Hitachi Ltd.

Medidas de susceptibilidade ac foram realizadas numa amostra de supercondutor tipo $(\text{Tl}/\text{Pb})(\text{Ba}/\text{Sr})_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ com $T_c(\text{in.})=119\text{K}$. Temperatura (T) entre 30 e 100K, campos magnéticos estáticos (H) entre 26 Oe e 80000Oe, e campos excitadores ac (h) entre 0 e 4.2 Oe foram utilizados nas medidas. Observou-se que, a T e H fixos, as partes real e imaginária da susceptibilidade podem ser reproduzidas teoricamente utilizando-se o modelo de Bean para o estado crítico, associado à introdução de uma distribuição de valores para as densidades de correntes críticas intergranulares. Mesmo a temperaturas próximas do pico na parte imaginária da susceptibilidade efeitos devidos a "flux creep" parecem desprezíveis. Os resultados do modelo são consistentes com distribuições alargadas para baixos H e T, e concentradas abaixo de 10 A/cm² para H e T próximos das condições de reversibilidade. Comparações são feitas com distribuições obtidas pela segunda derivada de curvas V-I obtidas em medidas dc. Esse trabalho foi realizado no Hitachi Research Laboratory, Hitachi, Ibaraki, Japão.

COMPORTAMENTO DA CORRENTE CRÍTICA NOS COMPOSTOS SUPERCONDUTORES DE

$\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}(\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x)\text{O}_8$

GROSS, G.; TORIKACHVILI, M.

San Diego State University
 MOEHLECKE, S.; TORRES, J. H. S.
 UNICAMP
 WESTPHAL, C. H.
 USP

Fizemos um estudo das propriedades supercondutoras em compostos de estequiometria $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}(\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x)\text{O}_8$, onde $0.00 \leq x \leq 0.25$. Este estudo constou de medidas de difração de raio-x, resistividade elétrica e susceptibilidade magnética ac e dc. Os valores da densidade de corrente crítica, J_c , inferimos das curvas de magnetização, usando o modelo de Bean, revelam que a substituição de Cu por Zn aumenta o valor de J_c abaixo de 30 K, e diminui acima de 40 K, para todas as concentrações estudadas. Estes resultados são discutidos em termos de modelos recentemente propostos para o diagrama de fase de rede de vórtices. Estes modelos levam em conta a alta anisotropia da massa efetiva e o valor muito pequeno do comprimento de coerência nestes materiais.

3D-2D Crossover in Flux-Lattice-Melting in Untwinned YBaCuO Crystals

KRYLOV, I. P.

CIFMC-Universidade de Brasilia

FARRELL, D. E.

Case Western Reserve University, Cleveland, Ohio, USA

A low-frequency pendulum oscillator was used to monitor flux-lattice melting up to magnetic fields $B=11\text{T}$. Damping of the oscillator was measured as a function of temperature to give the transition line. It was shown that the position of the transition line agrees with the results for resistance got by other authors. It was discovered that the damping peak which was observed in low fields transformed to a step-like transition at $B \approx 5.6\text{T}$.

It was shown that this line-shape changeover depended on vortex density but not on temperature or defects of the samples. The results give an experimental evidence for 3D-2D crossover in the melting transition which was predicted theoretically.

Susceptibilidade ac em supercondutores eletrônicos $Sm_{2-x}Ce_xCuO_{4-y}$

JARDIM, R. F.; WESTPHAL, C. H.; COHENCA, C. H.
INSTITUTO DE FÍSICA, UNIV. DE SÃO PAULO
BEN-DOR, L.

Department of Inorganic Chemistry, Hebrew University,
Jerusalem, Israel

MAPLE, M. B.

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

STROUD, D.

Department of Physics, The Ohio State University,
Columbus, USA

Um estudo sistemático das propriedades magnéticas via susceptibilidade ac em compostos policristalinos de $Sm_{2-x}Ce_xCuO_{4-y}$, $0.14 \leq x \leq 0.17$ revela fortes evidências de granularidade nestes sistemas. Enquanto medidas de resistividade elétrica revelam duas transições supercondutoras, apenas a transição que ocorre em baixas temperaturas, associada ao acoplamento Josephson, é observada nas componentes em fase e fora de fase da susceptibilidade ac. A componente fora de fase apresenta um pico na transição que é tremendamente modificada com a variação do campo de modulação e também com a presença de um campo dc externo. A magnitude da componente em fase no limite de baixas temperaturas cresce rapidamente com o aumento do campo de modulação e satura para campos maiores. O comportamento da componente fora de fase revela uma fraca dependência como função do campo de modulação. Estes resultados são discutidos em um modelo baseado em um sistema desordenado de junções Josephson.

Medidas Elétricas e Magnéticas em Supercondutores II (SUC) - 21/05/93

Flutuações Diamagnéticas no sistema

$YBa_2Cu_3O_7 - x$ com $H \parallel bfab$ para Campos de até 5 T

SALEM-SUGUI JR, S.; LIMA, O. F. DE; SILVA, E. Z.
DA

Instituto de Física "Gleb Watagin", UNICAMP, CP 6185,
Campinas, SP

Foram realizadas medidas magnéticas em um monocristal de $YBa_2Cu_3O_7 - x$ ($T_c = 92.3$ K) com "twin

boundaries" alinhados. Os diagramas M vs T foram determinados para campos de 0.05 T a 5 T, entre 80 K a 200 K, com o campo aplicado paralelo aos planos ab. Os dados obtidos para altos campos ($H > 1T$) se mostraram em acordo com a teoria de flutuações de Ginzburg-Landau para um sistema com dimensão $D = 3$ (1). As flutuações diamagnéticas mostram uma forte dependência com o campo aplicado, para $H > 1T$ na região de temperaturas $T > T_c(H)$. Para $T < T_c$, os diagramas M vs T mostram uma transição bem definida em $T_c(H)$, ao contrário do arredondamento presente em medidas com $H \parallel c$ neste sistema (2).

1. U. Welp et al. Phys. Rev. Let. 67, 3180 (1991). 2. U. Welp et al. Phys. Rev. Let. 62, 1908 (1989). Agradecemos o suporte financeiro da Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado de São Paulo, e do CNPq.

FLUTUAÇÕES CRÍTICAS E GAUSSIANAS NA CONDUTIVIDADE ELÉTRICA DO

$YBa_2Cu_3O_7$

PUREUR, P.

Instituto de Física - UFRGS

COSTA, R. M.; RODRIGUES JÚNIOR, P.;

SCHAF, J.; KUNZLER, J. V.

INSTITUTO DE FÍSICA - UFRGS

Determinando experimentalmente a derivada logarítmica da condutividade em função da temperatura, mostramos que a transição normal-supercondutora no $YBaCuO$ é um processo a duas etapas. Na fase normal, evidenciamos a ocorrência de flutuações genuinamente críticas e flutuações Gaussianas. Os expoentes Gaussinos, que caracterizam regimes bem acima de T_c , indicam que o espectro de flutuações é definido num espaço de geometria fractal. A medida que a temperatura se aproxima de T_c , observamos um crossover para um regime Gaussiano homogêneo e tridimensional. Ainda mais próximo de T_c , pela primeira vez numa experiência de paracondutividade, identificamos o expoente 0.33 predito pela teoria de scaling dinâmico aplicada às flutuações críticas supercondutoras.

POSSIBILIDADE DA EXISTÊNCIA DE SUPERCONDUTIVIDADE INDUZIDA POR CAMPO MAGNÉTICO EM CERÂMICAS

DE $YBa_2[(CuO)_{1-x}(FeS)_x]_3O_{4-\delta}$

RAMOS, A. S.; FERREIRA, J. M.; AGUIAR, J. A.

Departamento de Física - UFPE

Apresentamos medidas de resistividade em função da temperatura em amostras cerâmicas do tipo $YBa_2[(CuO)_{1-x}(FeS)_x]_3O_{4-\delta}$ na presença de campos magnéticos estático de baixa intensidade ($\leq 5,5K Gauss$). É observado que para pequenos valores de campos magnéticos ($\sim 100 Gauss$) a transição resistiva desloca-se para temperaturas maiores que aquela

observada na ausência de campo. Para campos mais intensos (~ 700 Gauss) a transição desloca-se para valores de temperaturas menores que os observados a campo nulo. É observado também que a temperatura na qual a resistividade se anula sempre decrece na presença de campo magnético. Estes resultados sugerem a possibilidade de ocorrência de supercondutividade induzida por campo magnético com a existência de uma fase supercondutora reentrante no diagrama $H - T$.

Trabalho financiado pelo CNPq e FINEP.

Experimental Investigation of Mixed State Peculiarities in a Rb_3C_{60} Fullerene Superconductor

BUNTAR, V. A.
CIFMC - UnB

Properties of the mixed state of a Rb_3C_{60} fullerene superconductor are experimentally investigated. Hysteric magnetization curves have been measured. From these curves the magnetic field dependences of a critical current density are found. Explanation of the obtained experimental results is given in terms of the nonequilibrium transition in a vortex solid between short range and long range vortex order. This transition occurs at a characteristic magnetic field \tilde{H} . From the hysteric magnetization curves values of the irreversibility magnetic fields at the different temperatures are obtained. The "phase diagram" $H(T)$ of the vortex solid regimes for Rb_3C_{60} fullerene in a superconducting state is constructed.

Teoria (SUC) - 21/05/93

EFEITOS DA ANISOTROPIA NO CAMPO CRÍTICO DE SUPERFÍCIE H_{c3}

D'ALMEIDA, F. M. R.; DORIA, M. M.

Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Caixa Postal 38071

Através das equações de Ginzburg-Landau descreve-se uma placa supercondutora anisotrópica de espessura variável submetida à presença de um campo magnético externo paralelo à superfície. Existe uma anisotropia de massa ao longo de um eixo cuja direção forma um ângulo arbitrário com a superfície da placa. Mantendo a invariância de gauge, discretiza-se a teoria de Ginzburg-Landau, resolvendo as equações correspondentes através do método de resfriamento simulado.^a A implementação da condição de contorno responsável pelo campo crítico de superfície é discutida no contexto da teoria discretizada. As implicações da existência de uma anisotropia de massa nos fenômenos de superfície são analisadas e comparadas com os resultados

de Saint-James, Sarma e de Gennes.^b

^aM.M. Doria, J.E. Gubernatis, and D. Rainer, Phys. Rev. B 41, 6335 (1990)

^bD. Saint-James, G. Sarma, and E.J. Thomas, Type II Superconductivity, Pergamon Press, New York, 1969

TRATAMENTO APROXIMADO DO MODELO DE HUBBARD DE TRÊS BANDAS

BANDAS

BERNHARD, B. H.; GUSMÃO, M. A. C.; IGLESIAS, J. R.

Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)

Um tratamento aproximado do hamiltoniano de Hubbard de três bandas é apresentado para estudar as propriedades eletrônicas dos óxidos supercondutores. As funções espectrais nos planos de CuO_2 são derivadas auto-consistentemente em conjunto com as concentrações de lacunas em ambos orbitais e a amplitude da magnetização de subrede. A rede é dividida em *clusters* CuO_2 (trímeros), sobre os quais o hamiltoniano pode ser diagonalizado. A parte de interação do hamiltoniano contém os *hoppings* entre trímeros diferentes. Uma banda estreita, com proeminente caráter *p*, correspondendo à banda singlete de Zhang-Rice, é encontrada aproximadamente na mesma posição descrita em diagonalizações exatas de *clusters* maiores, o mesmo acontecendo com toda a estrutura de bandas.

CÁLCULOS DE SEGUNDA ORDEM NA FASE DESORDENADA DE SPINS DO MODELO DE EMERY PARA SUPERCONDUTORES DE HIGH- T_c .

MARTÍNEZ, G.; IGLESIAS, J. R.

Univ. Federal do Rio Grande do Sul

ANDA, E. V.

Univ. Federal Fluminense

Incluimos correções de segunda ordem na interação de Hubbard para dupla ocupação nos sítios de Cobre nos planos de Cu-O de materiais supercondutores de alta temperatura crítica usando o modelo bidimensional de Emery na teoria de desordem de fases magnéticas ferro-antiferro. Estas correções foram estimadas incorporando o diagrama de criação partícula-buraco completamente renormalizado numa aproximação local na formulação de rede de Bethe para os propagadores dos sítios de Cobre e de Oxigênio. Os resultados são comparados com a aproximação de primeira ordem, de Hartree-Fock, obtida por um dos autores (Yndurain-Martínez, Phys. Rev. B 43 (1991) 3691). A comparação mostra que as flutuações de spin incorporadas na teoria mantém a fase isolante antiferromagnética da banda semicheia, com uma redução de 20% do gap de transferência de carga. A fase desordenada, mistura de configurações ferro e antiferro, aparece com uma pequena dopagem ($\sim 3\%$) de buracos adicionais.

GENERALIZED GINZBURG LANDAU THEORY FOR A SPIN GLASS SUPERCONDUCTOR

KISHORE, R.

INPE, S. J. Campos

SINGH, P.

G. B. Pant University, India

Recent experimental observation of spin glass ordering in Fe doped high T_c superconductor, $YBa_2Cu_3O_{7+y}$ has renewed interest in the study of the coexistence of superconductivity and spin glass ordering which was first observed by Davidov et al. in Gd doped $ThRu_2$, $CeRu_2$, La , $LaTn$, and La_2Al_2 superconductors. It looks that at present there is no satisfactory theory for the spin glass ordering in superconductors except some preliminary attempts.

We present a phenomenological theory for the spin glass ordering in superconductors, based on a generalized Ginzburg Landau free energy functional depending on superconducting and spin glass order parameters. It is found that the mutual interaction between the superconducting and the spin glass order assist in freezing of spins by enhancing the spin glass order parameter but acts as a pair breaking effect for superconducting order by decreasing the superconducting order parameter. Analytical expressions and thereby the schematic graphs of several thermodynamic and electromagnetic quantities are obtained. All these quantities show either cusps or discontinuities at the superconducting and/or spin glass transition temperatures.

EFEITOS DINÂMICOS NA DESORDEM MAGNÉTICA DOS PLANOS DE Cu-O DEVIDOS A CORRELAÇÃO ELETRÔNICA.

SIMÕES, A. S. DA R.; MARTÍNEZ, G.

UFRGS

Estudamos as fases magnéticas dos planos de Cu-O dos compostos supercondutores de alta temperatura crítica dopados com buracos na fase normal usando modelos de Hubbard de três bandas (Modelo de Emery- V.J. Emery, Phys.Rev.Lett.58, 2794 (1987)). Desenvolvemos uma teoria que usa técnicas de desordem para descrever a competição de configurações ferro e antiferromagnéticas em função da dopagem de buracos. Calculamos os propagadores dos orbitais -d do cobre e dos orbitais -p do oxigênio numa aproximação de acoplamento forte para os sítios de cobre e de campo médio para os sítios de oxigênio. Obtemos densidades de estados, transferência de carga, magnetização e energia total na fase ordenada para dopagens fora da fase estequiométrica. Os resultados são comparados com cálculos prévios na aproximação de campo médio (F.Yndurain and G. Martínez, Phys.Rev.B 43, 3691 (1991)) e com correções de segunda ordem.

ON THE \vec{k} -DEPENDENCE OF THE HYBRIDIZATION IN TWO-BAND SUPERCONDUCTORS

JAPIASSÚ, G. M.; CONTINENTINO, M. A.

UFF

TROPER, A.

CBPF

We study the influence of a \vec{k} -dependent hybridization on superconductivity of a two-band systems through an sp-d model of overlapping bands close to the Fermi level^a. Within an extended BCS theory^b, we describe the interband effects through a one-electron mixing term, differently from the standard many body approaches^c. Considering intraband d-d pairing and using homothetic relations for the bands and for the hybridization, we calculate the energies and the gap of the quasiparticles, the order parameter and the critical temperature T_c . We verify that T_c vanishes at a critical hybridization which depends on the ratio of the effective band masses. Numerical results and possible applications are also presented.

^aG.M.Japiassú, M.A.Continentino, and A.Troper, to be published in J. Appl. Phys. 73 (10), 15 May (1993).

^bG.M.Japiassú, M.A.Continentino, and A.Troper, Phys. Rev. B45, 2986 (1992).

^cH.Suhl, B.T. Matthias, and L.R. Walker, Phys. Rev. Lett. 3, 552 (1952); J.Kondo, Prog. Theor. Phys. 29, 1 (1963).

ESTUDO DAS CONSTANTES UNIVERSAIS BCS PARA A SUPERCONDUTIVIDADE.

COELHO, A. L.; AGUILERA-NAVARRO, V. C.

Instituto de Física Teórica (IFT - UNESP)

A partir da teoria BCS da supercondutividade, cujo postulado básico é a interação atrativa entre elétrons mediada por fônons, resultam algumas constantes universais, válidas para os supercondutores de acoplamento fraco. Essas constantes estão relacionadas com o "gap" de energia no zero absoluto ($2\Delta(0)/k_B T_c$) e com as propriedades termodinâmicas dos supercondutores (calor específico e campo magnético crítico). Neste trabalho mostramos que essas razões, adimensionais, comportam-se como números não universais, dependentes da temperatura de Debye (Θ_D) e da temperatura crítica (T_c) que são funções características de cada material. Reafirmamos a importância do mecanismo de acoplamento elétron-fônon nos materiais de alta T_c , considerando a existência de um acoplamento "moderado", resultado dos princípios da teoria BCS. Com uma abordagem relativamente simples, é possível generalizar essa teoria obtendo resultados concordantes com outros trabalhos ^a. Evitamos com isso teorias mais complicadas, como a teoria de Eliashberg de acoplamento forte, a qual não tem se mostrado de todo satisfatória ^b.

^aH. C. Gupta, Solid State Commun. 82, 559 (1992).

^bJ. P. Carbotte, Rev. Mod. Phys. 62, 1027 (1990).

RELAÇÕES DE ESCALA EM TEORIA DE GINZBURG-LANDAU

DORIA, M. M.; ANDRADE, S. C. B. DE

Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Caixa Postal 38071

Dentro do contexto da teoria de Ginzburg-Landau que descreve um supercondutor em presença de um campo magnético externo, nós discutimos um método geral que a partir de transformações gerais de escala, obtém relações envolvendo o parâmetro de ordem e o campo magnético local que extremizam a energia livre de Gibbs. O método é facilmente aplicável a qualquer princípio variacional incluindo assim a Mecânica Clássica e a Teoria Clássica de Campos. Recentemente um método baseado em mudança de escala foi utilizado para derivar um teorema Virial para a teoria de Ginzburg-Landau ^a e também para uma teoria de Landau de cristais líquidos sméticos em presença de campo magnético externo. ^b A comparação entre os dois métodos é apresentada neste trabalho.

^aM.M. Doria, J.E. Gubernatis, and D. Rainer, Phys. Rev. B 39, 9573 (1989)

^bA.E. Jacobs and L. Benguigui Phys. Rev. A 39, 3622 (1989)

Supercondutividade em Modelos de Gauge Planares Generalizados

DÓRIA, R. M.

UNIVERSIDADE CATÓLICA DE PETRÓPOLIS

HELAYËL-NETO, J. A.

Universidade Católica de Petrópolis

Modelos de Gauge Abelianos são generalizados mediante a introdução de potenciais eletromagnéticos extra em concomitância com o campo usual de Maxwell. As teorias de Gauge podem ser generalizadas através de transformações polinomiais dependentes de um mesmo parâmetro de gauge. Dentro desta generalização estuda-se o fenômeno da Supercondutividade. Campos-elétricos e magnéticos são obtidos com um "cut-off" em seu alcance. Analisando-se para $D = 3$, introduz-se termos topológicos de massa mistas. A Supercondutividade é realizada mediante a obtenção do efeito Meissner através da integração funcional sobre alguns dos potenciais introduzidos. O resultado final é que através deste modelo de gauge generalizado pode-se obter o efeito Meissner sem sequer a quebra espontânea de simetria.

SUPERFÍCIES E FILMES FINOS

Filmes de Metais e Semicondutores (SUF) - 19/05/93

Estudos de Interações Hiperfinas e de
Quimisorção em Catalisadores Bimetálicos
SAITOVITCH, H.; SILVA, P. R. DE J.; WEBERSZPIL,
J.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas
PASSOS, F. B.
Universidade Federal Fluminense

Este trabalho apresenta os resultados dos estudos de interações hiperfinas (IH) e reduções a temperatura programada (RTP) em sistemas catalisadores bimetalicos do tipo $Pt - In/Al_2O_3$. Foram determinadas as frequências de interação Quadrupolar elétrica (FIQE), nas temperaturas entre ambiente e $450k^{\circ}C$, medidas através da correlação angular perturbada tempo-diferencial (CAPTD) no ^{111}In difundido no catalisador, sob fluxo de uma mistura de hidrogênio (H_2) e n-heptano ($n - C_7H_{16}$), por impregnação. As medidas RTP, que se baseiam nas diferenças da condutividade térmica de um gás antes e após seu consumo a partir da redução de um metal, consistiram no monitoramento do consumo de H_2 de uma corrente gasosa por aquele catalisador, enquanto a temperatura era variada a uma taxa constante. Os padrões das medidas CAPTD indicaram uma distribuição de FIQE até $\% \sim 150^{\circ}C$; acima desta temperatura apareceram, sobrepostos aos anteriores, também padrões correspondentes a interações dinâmicas, traduzindo um aumento da difusão da fração de In não ligado a Pt (as medidas CAPTD em Pt/Al_2O_3 , para efeito de comparação, apresentaram apenas um padrão de distribuição de FIQE, em qualquer temperatura). Os resultados das medidas RTP mostraram que aproximadamente 60% do In está presente na forma metálica (número de oxidação nulo); além disto, a presença de In não alterou a temperatura de taxa de redução máxima dos catalisadores. Uma interação entre o In e a Pt também foi constatada pelo decréscimo da capacidade de adsorção da Pt quando da presença do In . O conjunto dos resultados permite concluir que frações de In estão ligadas à Pt e à Al_2O_3 , com o restante do In móvel nas condições reacionais, além de reforçar a hipótese da diluição das partículas de Pt pelos átomos de In . Estes resultados favorecem o "modelo geométrico" como a descrição mais adequada para as estrutura e atuação dos catalisadores bimetalicos.

Ligas Trimetálicas Estudadas por Espectroscopia Auger

LANDERS, R.; VINHAS, R. DE C. G.; KLEIMAN, G.
G.

IFGW-UNICAMP
NASCENTE, P. A. DE P.
DEMA-UFSCAR

Os deslocamentos das energias de ligação de ligas metálicas refletem a ocupação da banda de valência. Contudo, a exploração dessa propriedade dos deslocamentos é prejudicada pela incerteza sobre os níveis de Fermi que são a referência a partir da qual é medida a energia de ligação. Recentemente, demonstramos, usando o modelo quase atômico [1], que para o átomo de metal nobre N , na ausência de transferência de carga, $\Delta\epsilon_N \cong -\Delta E_{FN}$, onde $\Delta\epsilon_N$ é o deslocamento de energia Auger e ΔE_{FN} é a energia de Fermi relativa àquela do metal puro N . A aplicação desse resultado a uma série de ligas [1,2] demonstra a sua validade, permitindo concluir pequena transferência de carga e, para Pd-Au [2], determinar mudanças na ocupação da camada de valência. Usando esses resultados na investigação da energia de Fermi relativa numa liga desordenada qualquer, verificamos que, para uma impureza de metal nobre, $\Delta\epsilon \cong -\Delta E_{FN} + W_C \delta_N$, sendo δ a carga transferida à impureza e W , uma integral de Coulomb envolvendo a banda de condução [1]. O deslocamento Auger observado é uma média sobre a contribuição de todos os sítios de impureza. Como a impureza pode estar com igual probabilidade em qualquer sítio, a média sobre δ deve ir a zero. Assim, o deslocamento de energia Auger de uma impureza de metal nobre pode medir a energia de Fermi relativa numa liga com transferência de carga. Relatamos medidas Auger e XPS de ligas trimetálicas com baixa concentração do metal N ($N=Ag$ ou Cu). Os deslocamentos Auger de Ag , Cu e Au em $Au_xPd_yN_z$ são mutuamente consistentes com as idéias acima expostas e com resultados anteriores [1,2]. São discutidas as consequências da medida de ΔE_{FN} na interpretação dos dados.

Referências: 1. G.G.Kleiman, R. Landers, S.G.C. de Castro e J.D.Rogers, Phys.Rev.,B44 (1991) 8529.
2. P.A.P.Nascente, S.G.C. de Castro, R.Landers e G.G.Kleiman, Phys. Rev.,B43 (1991) 4659.

Satélites Shake up e os Espectros Auger $L_{2,3}M_{4,5}M_{4,5}$ dos Metais 4d

KLEIMAN, G. G.; CASTRO, S. C. DE; LANDERS, R.
IFGW-UNICAMP
NASCENTE, P. A. DE P.
DEMA-UFSCAR

Espectros Auger dos níveis de caroço de metais nobres e de transição mereceram até aqui pouca atenção por

serem geralmente bastante largos. Além disso, carregam pouca informação direta sobre a banda de valência. Recentemente, porém, foram publicados [1-4] espectros $L_{2,3}M_{4,5}M_{4,5}$ da série de metais 4d que além de estreitos são relativamente simples. A energética desses espectros guarda relevante informação sobre a estrutura eletrônica dos estados fundamental e excitado desses metais. A comparação com cálculos atômicos ilustra a validade da teoria. Os espectros $L_{2,3}M_{4,5}M_{4,5}$ de In, Sn, Sb, por exemplo, são razoavelmente descritos no limite atômico. Já Pd e Ag, que possuem camada aberta, apresentam satélites abaixo das linhas Auger características. Contrariamente ao que acontece para os metais 3d, esses satélites têm a mesma forma tanto para a transição L_2 quanto para a L_3 , dentro do erro experimental, não parecendo envolver transições Coster-Kronig do tipo L_2L_3X , que são energeticamente proibidas na sua maioria. Identificamos os satélites como consequência de shake up envolvendo os buracos na banda de valência. Os espectros calculados descrevem bem os dados experimentais, havendo acordo entre as posições dos satélites e cálculos teóricos simples. Não é do nosso conhecimento que estruturas desse tipo tenham sido relatadas na literatura.

REFERÊNCIAS: 1. G.G.Kleiman, R. Landers, S.G.C. de Castro e P.A.P. Nascente, Phys.Rev.,B44 (1991) 3383. 2. G.G.Kleiman, R. Landers, P.A.P. Nascente e S.G.C. de Castro, Phys.Rev.,B46 (1992) 4405. 3. G.G.Kleiman, R. Landers, P.A.P. Nascente e S.G.C. de Castro, Phys.Rev.,B46 (1992) 1970. 4. R. Landers, P.A.P. Nascente, S.G.C. de Castro e G.G.Kleiman, J. Phys.: Condens. Matter, 4 (1992) 5881.

DO GERMÂNIO AMORFO HIDROGENADO AO GERMÂNIO MICROCRISTALINO

GRAEFF, C. F. DE O.

UNICAMP

EBERHARDT, K.

Universitat Stuttgart, Germany

STUTZMANN, M.

MPI-FKF Stuttgart, Germany

Neste trabalho estudamos o processo de microcristalização do germânio amorfo hidrogenado, através de tratamentos térmicos isocrônicos (30min.). As amostras foram crescidas na forma de filmes finos com espessura típica de 1 μm . O processo foi monitorado pelas medidas de Photothermal Deflection Spectroscopy (PDS), Electron Spin Resonance (ESR) das ligações não satisfeitas (dangling bonds DB) do germânio, Raman, transmissão no visível e infravermelho próximo (VIS-NIR) e condutividade no escuro. O processo de microcristalização começa a ser observado a partir de tratamentos térmicos acima de 350 $^{\circ}\text{C}$ por PDS, mas a completa microcristalização só ocorre acima de 425 ± 5 $^{\circ}\text{C}$ (Raman, ESR). Ao contrário do a-Si:H, o processo envolve uma grande reconstrução das DBs. Uma com-

paração com estudos semelhantes no a-Si:H será apresentada.

SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE CRISTALIZAÇÃO DO SILÍCIO AMORFO HIDROGENADO INDUZIDO POR OURO.

PASA, A. A.; LOSCH, W.

Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais - COPPE

NEUGEBAUER, M.; BAUER, G. H.

Institut fuer Physikalische Elektronik, Universitaet Stuttgart, Alemanha

A interação química entre o Au e o Si amorfo (a-Si) promove a formação de cristais de Si a temperaturas de cerca de 130 C. Esta temperatura é bem inferior a temperatura necessária para a cristalização do a-Si. A cristalização, neste caso, ocorre pela formação de núcleos e pelo posterior crescimento destes, resultando nos grãos cristalinos. Neste trabalho será apresentada a simulação do processo de cristalização do a-Si considerando o sistema de bicamadas Au/a-Si. O modelo físico de simulação utiliza conceitos da teoria de percolação e uma rede aleatória de resistores para representar a camada de metal. A partir do fato experimental de que os cristais de Si crescem no interior do filme de Au e em apenas duas dimensões, foi utilizado o seguinte procedimento: inicialmente, são gerados aleatoriamente na rede de resistores, pela substituição de resistores de Au por resistores de Si, os núcleos de cristalização. Posteriormente, são gerados novos núcleos e permitido que os núcleos surgidos previamente sofram um processo de crescimento. O cálculo da resistência equivalente da rede de resistores foi realizado empregando o método de matrizes de transferência. Esta simulação permite que parâmetros como taxa de nucleação e taxa de crescimento dos grãos sejam testados. Os resultados de simulação estão em concordância com resultados obtidos por microscopia eletrônica de varredura e medidas elétricas in-situ.

OXIDAÇÃO TÉRMICA DO SILÍCIO EXPLICADA VIA O MODELO DE AGREGAÇÃO LIMITADA POR DIFUSÃO

SILVA JUNIOR, E. F. DA; AGUIAR, J. A.

Departamento de Física - UFPE

A teoria de oxidação do silício para a formação de SiO_2 é estudada usando-se conceitos em geral aplicados a estruturas fractais. Propomos um método alternativo para interpretar os fenômenos de crescimento de SiO_2 observados durante a oxidação térmica do silício baseado em conceitos de cinética da difusão em estruturas fractais. O modelo sugere que a oxidação térmica da superfície do silício origina-se através da difusão de moléculas de oxigênio numa rede fractal determinando uma lei de potência que relaciona a espessura do

óxido x com o tempo de oxidação t através da relação $x(t) = at^b$, em concordância com resultados fenomenológicos obtidos recentemente^a. Os valores do expoente b , na faixa 0.50 a 0.72 em nosso modelo estão em boa concordância com os resultados obtidos matematicamente através de fitting de dados experimentais para a oxidação^b. Enquanto o modelo apresenta evidências de que o expoente b na lei de potência está relacionado com a dimensão espectral durante a difusão de oxigênio através de agregados de percolação, o processo certamente envolve agregação limitada por difusão num sistema aleatório, que poderá nos fornecer evidências sobre a origem física das constantes a e b na lei de potência. Os possíveis mecanismos responsáveis pelos valores observados experimentalmente para estas constantes estão sendo investigados. Este trabalho foi financiado em parte pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

^aE. H. Nicollian and A. Reisman, *J. Electr. Mat.* **17**, 263 (1988)

^bA. Reisman, et. al., *J. Electr. Mat.* **16**, 45 (1987)

Filmes e Superfícies: Propriedades Óticas (SUF) - 19/05/93

Modificações na Estrutura da Superfície de Vidros Observadas por Espectroscopia no Infravermelho e Micro-Espectroscopia Raman.

ZIEMATH, E. C.

Departamento de Física, IGCE - UNESP, Rio Claro

AEGERTER, M. A.

DFCM-IFQSC-USP, São Carlos

Superfícies de vidros de óxidos sofrem alterações estruturais e químicas devido ao ataque químico de soluções ácidas e básicas, e pela ação da atmosfera ambiente. Estas alterações foram estudadas nas superfícies de um vidro de metasilicato ($2Na_2O.1CaO.3SiO_2$) empregando espectroscopia de reflexão no infravermelho, micro-espectroscopia Raman e microscopia eletrônica de varredura. Espectros de infravermelho mostraram que ataques químicos com soluções ácidas produzem uma camada superficial rica em sílica, visto que há uma tendência dos espectros se aproximarem ao do vidro Vycor poroso com o tempo de ataque. Micro-espectros Raman mostraram que há um aumento da concentração de sódio na superfície muito tempo após o ataque químico, possivelmente devido à difusão deste ion do volume para a superfície. A ação da água da atmosfera ambiente sobre a superfície do vidro resulta da formação de cristais de silicato de sódio hidratado, como verificado por difração de raios-X. Estes cristais foram observados através de microscopia eletrônica de

varredura.

Apoio financeiro: FAPESP e CNPq/RIAE-NM.

CRESCIMENTO DE FILME DE DIAMANTE PARA APLICAÇÕES ÓPTICAS.

LEITE, N. F.; TRAVA-AIROLDI, V. J.

LAS/INPE

SALGADO, E. G. C.

AMR/IAE - CTA

RUBIM, J. C.

IQ - USP

Filmes finos ópticamente transparentes são importantes quando usados como camada anti-refletora (AR) bem como camada protetora quando a superfície óptica é exposta a ambiente hostil. O objetivo deste trabalho é obter filmes de diamante transparente numa região espectral maior possível para serem usados como camada protetoras de superfícies, para isto filmes de diamantes estão sendo crescidos usando a técnica de deposição de vapor químico assistido por filamento quente (HP-CVD). Um estudo inicial da deposição de diamante em substrato de quartzo está sendo desenvolvido. O tamanho do grão de diamante apresenta um dependência forte com a maneira de preparação do substrato e com os parâmetros de crescimento. Análise morfológica varia desde fração de μm até cerca de $100\mu m$. Espectros Raman mostram que houve uma melhora na qualidade do filme, quando gás CF_4 é usado como dopante na mistura gasosa.

CRESCIMENTO DE FILME DE DIAMANTE USANDO A TÉCNICA ASSISTIDA POR TOCHA DE OXI- ACETILENO.

TRAVA-AIROLDI, V. J.; CORAT, E. J.; LEITE, N. F.

LAS/INPE

NOBREGA, B. N.

Coordenadoria de Projetos Especiais - COPESP

BARANAUSKAS, V.

Faculdade de Engenharia Elétrica - UNICAMP

O presente trabalho apresenta os resultados do estudo de crescimento de filmes finos e auto-sustentados de diamante a partir da técnica assistida por tocha de oxiacetileno. Esta técnica é particularmente muito importante por não utilizar fonte de ativação, isto é, a queima do oxigênio e acetileno fornece a energia necessária para a produção dos produtos precursores do diamante. A característica mais importante desta técnica de crescimento é a elevada taxa de crescimento possível de se alcançar, que aliada às características de baixo custo e nenhum consumo de energia externa, torna-se uma das técnicas muito pesquisada para aplicações industriais. Determina-se a taxa de crescimento do filme como função do fluxo gasoso de cada componente precursor. Taxa de crescimento de até cerca de $60\mu m/h$ foi medida. O filme é caracterizado via microscopia

eletrônica de varredura e microscopia de força atômica para análise morfológica e via espalhamento Raman para análise de qualidade do filme. A influência de vários parâmetros de crescimento foi determinada como função das características do filme.

Gravação Estabilizada de Microestruturas nas Amostras de InP, Usando um Processo de Ataque Fotoeletroquímico.

SOLTZ, D.; CESCATO, L.

Laboratório de Óptica, Departamento de Estado Sólido,
UNICAMP

Foram gravadas holograficamente estruturas periódicas em n-InP utilizando um processo de ataque fotoeletroquímico em soluções aquosas de HCl. As gravações foram feitas utilizando-se um fotodetector que mede a luz difratada por reflexão para operar um sistema de

estabilização do padrão de interferência. O mesmo sinal da luz difratada pode ser utilizada para monitorar a evolução da rede que está sendo gravada.

Foi detectada na fotocorrente um sinal que depende da posição da rede gravada em relação ao padrão de interferência. A evolução deste sinal foi medida e comparada com o sinal de luz obtido com o fotodetector. O estudo deste sinal além de fornecer melhor entendimento do processo de gravação, pode permitir sua utilização para estabilizar o próprio registro holográfico.

Caracterização de Superfícies e Filmes Finos (SUF) - 20/05/93

X-RAY CHARACTERIZATION OF MULTILAYER FILMS

SCHMIDT, J. E.

Instituto de Física - UFRGS

The demand for new materials for technological purposes has stimulated the research on magnetic nanostructured systems like granular thin films and multilayers. It is known that the magnetic properties (anisotropy, saturation magnetization etc...) are strongly related to crystallinity and sizes of individual layers or particles and to the interface features like lattice mismatches, roughness and intermixing. The existence of this relationship makes it necessary to find means to properly quantify the structure of the material under study. In order to evaluate meaningfully the structural characteristics of multilayers X-ray diffraction techniques have been widely used. Here we present a brief review of the main approaches to the problem and discuss their usefulness in systems like Co/Pd and to others similar systems.

ESTUDO DA ESTRUTURA CRISTALINA DE FILMES FINOS EPITAXIAIS Cu/Si UTILIZANDO TÉCNICAS DE ANÁLISE DE RAIOS-X

MOSCA JR, D. H.

Laboratório de Materiais do DF - UFPR

MAZZARO, I.

Laboratório de Ótica de Raios-X e Instrumentação do DF - UFPR

SCHREINER, W. H.

Laboratório de Filmes Finos do IF - UFRGS

MORS, P. M.

IF - UFRGS

Filmes finos de Cu foram crescidos mediante diversas taxas de deposição sobre wafers de Si(100) e Si(111) utilizando evaporação por canhão eletrônico em equipamento Balzers UMS 500P com pressão de base de 2×10^{-8} mbar. A camada de óxido nativo na superfície do Si foi removida quimicamente por imersão em HF. A estrutura cristalina dos filmes de Cu foi investigada através de diversas técnicas de análise de raios-X: difração com varredura $\theta - 2\theta$ e ω , reflexão total, topo-

grafia de Lang em geometria de reflexão e verificação das orientações cristalográficas pelo método de Bond. Os resultados da análise revelam que para taxas de deposição inferiores a 30Å/s, camadas de Cu epitaxial CFC-(100) e CFC-(111) com espessuras entre 300Å e 3000Å crescem sobre superfícies de Si(100) e Si(111), respectivamente. Detalhes da estrutura das interfaces Cu/Si permanecem não claros. A largura de linha das reflexões (100) e (111) das camadas de Cu são maiores que valores previstos pela teoria. A distribuição de defeitos no interior das camadas de Cu será discutida em função dos resultados obtidos.

Distância Crítica para Ionização no Field Ion Microscope

CASTILHO, C. M. C. DE

UFBa

A ionização de um gás é o mecanismo básico para a formação da imagem no Field Ion Microscope (FIM). Em qualquer dos modelos concebidos para explicar o funcionamento do FIM, a probabilidade local de ionização, usualmente referida na literatura como taxa

de ionização, constitui uma grandeza de importância fundamental. Existe no entanto uma região, referida como "zona proibida", de largura entre 4 e 6 angstroms medidos a partir da amostra, onde o tunelamento do elétron proveniente do átomo do gás não pode ocorrer face ao princípio de Pauli. Neste caso trata-se da impossibilidade do elétron vir a ocupar na amostra um nível abaixo do nível de Fermi. A distância mínima a partir da qual a ionização é quanticamente permitida denomina-se de distância crítica. Como a maioria dos íons são produzidos imediatamente além da zona proibida, numa largura da ordem de poucos décimos de angstrom, torna-se fundamental uma boa determinação da distância crítica. A expressão utilizada na literatura leva em consideração apenas a função trabalho, o campo elétrico aplicado externamente e a energia de ionização do átomo do gás.

Discutiremos que outros fatores afetam a determinação da distância crítica à luz de alguns modelos para a barreira de potencial bem como as consequências na determinação da largura da zona onde a ionização é mais intensa.

INVESTIGATION OF THE DEBYE TEMPERATURE AND OPTICAL POTENTIAL OF THE CdTe(110) AND InSb(110) SURFACES BY LEED

RIAÑO, L. P. N.; SOARES, E. A.; CARVALHO, V. E.
DE

Departamento de Física - UFMG

Although the (110) surfaces of zincblende semiconductors have been investigated in details using LEED analysis, little work has been carried out on the determination of some non-structural variables that are used as input parameters to the LEED calculation. In fact, once one has good values for the structural parameters of the surface it is possible to use the LEED analysis to estimate non structural parameters. In this work we present a quantitative r-factor analysis of experimental LEED data for CdTe(110) and InSb(110), in order to obtain optimum values of the Debye Temperature (θ_D) and the optical potential (V_r, V_i) for these surfaces. The experimental set up and data collection have been described elsewhere. In the present work we have used 15 beams collected at near-to-normal incidence and all the experimental data were smoothed once using a nine-point averaging algorithm. The calculation was carried out using the well known CAVLEED program. Muffin-tin potentials were employed to calculate the phase shifts for ten angular momentum values. The Slater parameter was set to 2/3. The calculational strategy used to investigate only the three non-structural parameters θ_D , V_r and V_i was as the following: we started from the structural models obtained previously, where the three parameters were only partially examined. In these models the optimum values for the structural pa-

rameter s found - with respect to bulk lattice constant - for the top layer of CdTe (InSb) are: -12.7% (-12.5%) for the rumple, -3.7% (-3.2%) for the relaxation, 2.6% (4.9%) for the anion lateral shift and 6% (9.7%) for the cation lateral shift, and rumple of 1.3% (2.8%) and relaxation of 0.2% for the second layer. Thus, leaving these structural parameters unchanged and using complex phase shifts, for scattering at 293K, obtained for several values of θ_D and different values of inelastic damping strength, V_i , dynamical LEED calculations were performed by running the Cavleed program in a Sun Sparc WorkStation. The comparison between the experimental and theoretical data was performed using the Pendry (Rp) and X-ray (Rx) r-factors and the inner potential V_r was chosen to compensate for a constant shift of the energy scale in the experimental data.

Análise elementar de filmes finos electrocrômicos por PIXE e RBS no Laboratório de Análise de Materiais por Feixes Iônicos, LAMFI- USP.

TABACNIKS, M. H.; MARTINS, J. V.

Instituto de Física, USP

GORENSTEIN, A.

Instituto de Física Gleb Wataghin, UNICAMP

O LAMFI-USP é um laboratório, cujo principal objetivo é desenvolver, aplicar e oferecer métodos de análise por feixes iônicos para caracterização elementar e em perfil de profundidade de materiais. Suas facilidades são um acelerador eletrostático tipo Pelletron-Tandem com até 1,7MV no terminal e duas estações de análise com câmaras de alto vácuo e eletrônica de aquisição de dados. As técnicas analíticas atualmente disponíveis compreendem: PIXE (Particle Induced X-Ray Emission), RBS (Rutherford Backscattering Spectrometry) e NRA (Nuclear Reaction Analysis). Filmes finos electrocrômicos de NiO-x foram crescidos por sputtering-rf em atmosfera de argônio-oxigênio, sobre vidro recoberto com óxido semiconductor transparente de In-2O-3:Sn e sobre grafite. Os filmes foram analisados no LAMFI-USP pelos métodos PIXE e RBS, para determinação da estequiometria, contaminantes e perfil de oxigênio. A análise dos filmes depositados sobre vidro, pelo método PIXE, identificou os elementos Ni, In e Sn que compõem os filmes depositados e Si, Ti e Zn, presentes no substrato. O substrato de grafite, dado seu baixo número atômico e ausência de contaminantes, foi mais adequado para análise de filmes electrocrômicos por PIXE e RBS, exceto pela sua porosidade, que levou à excessiva difusão do NiO-x. Neste caso, determinou-se a estequiometria do filme de NiO-x por RBS e o perfil de oxigênio por meio da reação de ressonância $^{16}O(\alpha, \alpha')^{16}O$. Os resultados indicam que a análise elementar simultânea por PIXE e RBS de filmes finos, pode ser otimizada com a utilização de substratos lisos e com baixo número atômico. Na análise por fei-

xes iônicos, a combinação das técnicas RBS, PIXE e NRA, permite a detecção de toda a tabela periódica na caracterização de filmes finos com até alguns μm de espessura.

Efeitos de Irradiação em Filmes (SUF) - 20/05/93

MODIFICAÇÃO DE FASES HOMOGÊNEAS DE FILMES FINOS INDUZIDOS POR IRRADIAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO POR MEDIDAS DE RESISTIVIDADE ELÉTRICA "IN-SITU"

MIRANDA, R. M. N.; VASCONCELLOS, M. A. Z.;
BAIBICH, M. N.; AMARAL, L.; SCHERER, C.

UFGRS

COSTA, J. A. T. B. DA
UFSM

A irradiação com íons em estruturas de filmes finos tem sido utilizada para estudar a transformação cristal-amorfo com vantagem sobre as técnicas convencionais uma vez que pode ser efetuada passo a passo, através do controle de dose de irradiação. A amorfização pode ser atingida de duas formas: i) pelo bombardeamento de um elemento quimicamente ativo sobre um material cristalino puro, caso em que o íon primário promove desordem química e estrutural e ii) pela irradiação com gases inertes sobre sistemas homogêneos causando danos à estrutura do material.

Neste trabalho utilizamos os sistemas de filmes finos NiAl e FeZr inicialmente estruturados e posteriormente homogeneizados através de tratamento térmico convencional. A composição global do sistema NiAl é de 1/1 enquanto no sistema FeZr trabalhamos em dois extremos do diagrama de fases: i) FeZr₃ e ii) Fe₂Zr. Estes sistemas foram produzidos com diferentes espessuras globais (30 a 75 nm) mas mantendo as espessuras relativas para obter a composição acima especificada. As amostras foram mantidas à temperatura de 77K durante as irradiações com íons de Ar⁺ de 100 keV. Utilizamos um sistema de medida de resistividade elétrica "in-situ" para acompanhar as modificações induzidas pela irradiação.

Os primeiros resultados indicam ser possível relacionar as transformações observadas à parâmetros da cascata de colisões. A abordagem cinética sobre as medidas de resistividade elétrica permite propor um mecanismo dominante no processo de modificação induzido por irradiação.

MODIFICAÇÕES ESTRUTURAIS DE FILMES DE a-C:H(N) INDUZIDA POR

IMPLANTAÇÃO IÔNICA OU TRATAMENTO TÉRMICO.

ACHETE, C.; FRANCESCHINI, D.

Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais - COPPE

FREIRE JR, F. L.

DEPARTAMENTO DE FÍSICA, PUC-RIO DE JANEIRO, BRASIL

Neste trabalho nós relatamos os resultados de um estudo comparativo sobre as modificações na composição, tensão interna e estrutura em filmes duros de carbono amorfo hidrogenado a-C:H e a-C:H(N) submetidos a implantação iônica ou tratamento térmico. Os filmes de a-C:H e a-C:H(N) de 450 nm de espessura depositados por R.F. "glow discharge" sobre substratos de silício foram ou implantados com íons de nitrogênio de 70 KeV e doses de 1.0 e 2.0×10¹⁷ N/cm² ou aquecidos a temperaturas variando entre 200 C e 800 C durante 30 min. Todos os filmes foram caracterizados usando efusão, Espectroscopia Raman, Auger e técnicas nucleares. Nós observamos que as amostras implantadas apresentam forte redução na tensão interna com simultânea perda de hidrogênio e nitrogênio da região próxima a superfície e aumento da densidade de vazios. Nas amostras tratadas termicamente a redução da tensão interna está diretamente relacionada com forte grafitização e completa depleção de H e N.

EFEITO DA IMPLANTAÇÃO DE ARGÔNIO EM AÇOS CARBONO PREVIAMENTE NITRETADOS EM PLASMA.

SANTOS, C. A. DOS

UFRGS

O processo de introdução de nitrogênio em diversos tipos de aços, genericamente denominado nitretação, é corriqueiro na indústria há muito tempo. As exigências de materiais resistentes a situações de trabalho cada vez mais severas têm motivado o desenvolvimento de novas técnicas e processos. É dentro desse contexto que a indústria passa a usar, a partir dos anos sessenta, a nitretação a plasma (NP), e alguns laboratórios de pesquisa passam a estudar, a partir de 1972, a implantação iônica (II). O presente trabalho faz parte de uma tentativa de comparar esses dois processos de nitretação, no que se refere à composição química superficial após o tratamento, após vários recozimentos, e após a implantação de gases nobres, seguida de novos recozimentos. Os resultados obtidos até o presente sugerem que, sob as condições experimentais utilizadas: (i) Ao contrário da II, na NP não se observa a formação de $\epsilon - \text{Fe}_2\text{N}$; (ii) Os compostos superficiais são estáveis até aproximadamente 400 C, no caso da NP, e até 250 C no caso da II. Difractometria de raios X sugere que a implantação de argônio não altera significativamente as amostras submetidas a NP, um resultado contrário ao

obtido com espectroscopia Mössbauer, cujos espectros antes e após a implantação de Ar são bastante diferentes. Esses resultados sugerem que o principal efeito da implantação de Ar em aços carbono submetidos a NP é a dispersão dos precipitados.

Filmes Finos de TiN - Proteção contra Corrosão versus Microestrutura

HÜBLER, R.

Instituto de Informática - Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul. — Av. Ipiranga, 6681 - Porto Alegre - RS

SCHREINER, W.; BAUMVOL, I.

UFRGS

ALBERTS, L.; WOLF, G.

Universitaet Heidelberg

Atualmente são gastos vários milhões de dólares na procura de materiais que sejam boas proteções contra corrosão e que, ao mesmo tempo, ofereçam uma proteção eficaz contra o desgaste mecânico. O Nitreto de Titânio, por ser um material cerâmico de elevada dureza, quimicamente inerte e que possui uma boa adesão a maioria dos metais, é um candidato natural ao cargo de revestimento tribocorrosivo. Porém, o TiN depositado por técnicas convencionais como sputtering e ion plating e CVD, possuem uma estrutura colunar não sendo muito eficazes na proteção contra corrosão. Usando-se a técnica de deposição assistida por bombardeamento iônico, variando-se o ângulo de incidência dos ions, obtém-se variações na microestrutura dos filmes, o que permite depositar camadas mais compactas e conseqüentemente com propriedades protetoras otimizadas.

Neste trabalho, serão apresentados os resultados de corrosão e dureza de filmes finos de TiN em função do ângulo de bombardeamento. Resultados de microscopia eletrônica de transmissão e varredura, dureza Vickers e ciclovoltagemogramas em buffer de ácido acético serão apresentados.

Filmes Finos: Miscelânea (SUF) — 21/05/93

DE HAAS - VAN ALPHEN'S OSCILLATIONS IN THIN FILMS FOR ARBITRARY ORIENTATIONS OF MAGNETIC FIELD

DODONOV, V.

Universidade Federal de São Carlos (on leave of absence from Moscow Institute of Physics and Technology)

Exact thermodynamical potentials and magnetization of an ideal electron gas placed in a uniform magnetic field and confined with a parabolic potential describing a thin film are calculated for arbitrary angles between the film surface and the magnetic field vector in the frame of the general approach to quantum systems with multidimensional quadratic Hamiltonians^a both in nondegenerate and degenerate cases. Among other results, it appears, in particular, that in a very thin film the averaged over rapid oscillations part of the magnetization of the degenerate gas does not depend on film's thickness and enables to determine the effective mass immediately due to the relation

$$\langle \mathcal{M} \rangle = m_* S \mu_B^2 B \left[1 - \frac{1}{3} (m_0/m_*)^2 \right] (2\pi \hbar^2)^{-1}.$$

Besides, the oscillations of the component of the magnetic moment which is parallel to the surface turn out strongly suppressed in comparison with oscillations of the transverse component provided the angle between the magnetic field vector and the surface is greater than the ratio of the magnetic energy $\mu_B B$ to the Fermi energy.

^aV.V.Dodonov, I.A.Malkin and V.I.Man'ko, J.Phys., A8, L19 (1975).

EFEITO DE CARGA DE COMPENSAÇÃO INTERNA NA ESTABILIDADE DE FILMES FERROELÉTRICOS HETEROGÊNEOS.

CARRIÇO, A. S.

Departamento de Física, UFRN Campus Universitário - Natal - RN

O estado de polarização de filmes ferroelétricos heterogêneos é estudado dentro de um modelo de campo efetivo. O modelo é baseado na teoria fenomenológica de Landau para ferroelétricos de segunda ordem e leva em consideração efeitos de tamanho e distribuição interna de carga de compensação em filmes finos na determinação da polarização remanente, campo coercivo e forma da histerese. A existência de uma camada superficial com constante dielétrica pequena tem forte influência na forma da histerese, bem como no valor da temperatura e espessura crítica do filme. O modelo é usado para analisar dados experimentais obtidos de medidas elétricas em capacitores Pt/PZT/Pt.

Cálculo da Densidade Espectral de Impureza no Modelo de Anderson-Newns Generalizado.

OLIVEIRA, L. N.

IFQSC, USP, São Carlos

YOSHIDA, M.

Departamento de Física, IGCE - UNESP, Rio Claro

O modelo de Anderson-Newns^a tem sido intensamente utilizado para o estudo de propriedades elétricas de im-

purezas adsorvidas em superfícies metálicas. Este consiste de um orbital (impureza) acoplado a um contínuo da banda de condução (metal) via superposição de estados, estabelecendo-se uma dinâmica de troca de elétrons impureza-metal. Nós estudamos uma versão generalizada deste modelo onde foi introduzida uma interação eletrostática entre os elétrons da banda e do orbital de impureza. O hamiltoniano do modelo foi diagonalizado via técnica do grupo de renormalização^b e a densidade espectral de impureza foi calculada utilizando um método recentemente desenvolvido para cálculo de propriedades dinâmicas de impurezas em metais^c. Pode-se identificar duas linhas de pontos fixos do modelo, uma que denominamos ponto fixo de adsorção física e outro, de ponto fixo de adsorção química.

^aP. W. Anderson, *Phys. Rev.* 124, 41 (1961); D. M. Newns, *Phys. Rev.* 178, 1123 (1969).

^bK.G. Wilson, *Rev. Mod. Phys.* 47, 773 (1975).

^cM. Yoshida, M. A. Whitaker, L. N. Oliveira, *Phys. Rev. B* 41, 9403 (1990).

TEORIA ESTATÍSTICA DAS PROPRIEDADES ATÔMICAS DAS SUPERFÍCIES DOS CRISTAIS ANARMÔNICOS

ZUBOV, V. I.
UFG

As peculiaridades das superfícies de interfaces em sistemas onde uma das fases é sólida são discutidas neste trabalho. Expõe-se uma teoria estatística das propriedades estruturais, dinâmicas e termodinâmicas das superfícies cristal anarmônico-vapor, desenvolvida com base no Método Correlativo Não-Simetrizado do Campo Autoconsistente^{a, b}. Obtém-se equações não-lineares integrais para as densidades de probabilidade de uma partícula e para os potenciais autoconsistentes dos átomos, e equações lineares para as correções quânticas. É proposto um método de solução destas através da redução a um sistema de equações para os momentos das funções de uma partícula. Os momentos de ordens menores expressam as características estruturais e dinâmicas das superfícies: a relaxação da rede, as amplitudes efetivas das vibrações dos átomos e sua anisotropia. Elabora-se um procedimento para o cálculo das densidades de energia e de energia livre, a tensão e o stress superficiais. Algumas aplicações da teoria são apresentadas.

Viatcheslav I. Zubov (Apoio financeiro: CNPq.)

^aV.I. Zubov, *Phys. stat. sol.(b)* 111,417(1982).

^bV.I. Zubov, *Int. J. Mod. Phys. B* 6, 367(1992).

Propriedades Magnéticas e Estruturais, Aplicações em Metais (SUF) – 21/05/93

ANÁLISE DE ESTRUTURAS DE MULTICAMADAS Fe/Cu, Fe/Mo, Fe/Nd POR RAIOS-X E ESPECTROSCOPIA MÖSSBAUER

BORGES, J. F. M.; MOSCA, D. H.; SCHREINER, W.
H.
UFRGS

Neste trabalho, multicamadas magnéticas de filmes finos de alta qualidade $Fe15\text{Å}/X15\text{Å}$ com $X = Cu, Nd, Mo$. Foram preparadas pela deposição sequencial sobre um substrato de Silício monocristalino com orientação (111) à temperatura ambiente e à baixa pressão por uma máquina de evaporação térmica BALZERS UMS-500. As espessuras dos filmes foram monitoradas, durante a evaporação, por um medidor de espessura convencional com cristal de quartzo. Difração de raios-X de alto e baixo ângulo, feitas através de um difratômetro Siemens que possui a mesma geometria de construção de uma câmara de Debye-Scherrer utilizando a radiação $CuK(\alpha)$ monocromática, mostra que a modulação composicional da multicamada magnética está em bom acordo com as espessuras planejadas. Espectroscopia Mössbauer de Elétron Conversão (CEMS), onde são detectados os elétrons de conversão internas oriundos da absorção γ ressonante emitidos pela fonte ^{57}Co à temperatura ambiente, do ^{57}Fe , mostra diferentes frações de sítios nas interfaces. Essas frações diferentes de sítios interfaciais, São explicadas pela rugosidade nas interfaces o que altera o número de vizinhos cobre, neodímio ou molibdênio que os átomos de ferro sentem influência em seu campo hiperfino. Quanto mais abrupta for a interface, menos a influência sentida pelo ferro.

PROPRIEDADES MAGNÉTICAS E MAGNETOELÁSTICAS DE MULTICAMADAS DE COBALTO/PALÁDIO

VIEGAS, A. D. C.; CARARA, M. A.; SHELPI, L. F.;
SCHMIDT, J. E.
Instituto de Física - UFRGS

Medidas de magnetostrição de saturação, magnetização, campo coercivo, e constantes de anisotropia para a multicamada cobalto/paládio apresentam uma correlação em função do tratamento térmico que indicam a formação de uma liga ordenada de $CoPd$. Esta hipótese é confirmada via difratometria de raios-x refletindo-se na redução dos picos satélites devido a multicamada com gradual surgimento dos picos caracte-

terísticos da liga. Uma comparação é apresentada entre este resultado e o de Noburu Satu (1988) cujas amostras monocristalinas não apresentam a formação de liga para as mesmas temperaturas utilizadas neste trabalho. Isto nos leva a considerar que a formação de liga é predominantemente auxiliada por difusão pelas fronteiras de grão e não pelas interfaces da multicamada.

ANISOTROPIA MAGNÉTICA EM FILMES DE Fe MONOCRISTALINOS CRESCIDOS POR EVAPORAÇÃO POR FEIXE DE ELÉTRONS

CARARA, M. A.; SCHREINER, W. H.; SCHMIDT, J. E.

Instituto de Física - UFRGS

Nós apresentamos medidas de anisotropia em filmes finos de Ferro (111) epitaxiados por evaporação por feixe de elétrons. Essas medidas, obtidas com auxílio de um magnetômetro de torque, foram extraídas aplicando-se o campo magnético no plano da amostra e fazendo-o rodar em torno de um eixo pré estabelecido desta. As componentes da curva de torque em função do ângulo de aplicação do campo são determinadas através de sua transformada de Fourier. A confirmação da cristalinidade da amostra é obtida através da determinação de dois parâmetros: (i) a constante de anisotropia de segunda ordem do Fe, $K_2 = 4.5 \times 10^4$ erg/cc e (ii) a simetria hexagonal dos eixos (110) no plano do filme. Estes resultados foram extraídos a partir de filmes de 100 e 1000 angstroms de espessura.

Efeitos das Interações Dipolares Magnéticas em Filmes Finos

ARRUDA, A. S. DE

Departamento de Matemática-Cesma-Universidade Federal de Mato Grosso

ARRUDA, A. S. DE; SELZER, S.; MAJLIS, N.

Instituto de Física - Universidade Federal Fluminense

Estudamos os efeitos das interações dipolares magnéticas sobre as propriedades termodinâmicas e as excitações magnéticas de um filme fino. Neste trabalho, consideramos o filme fino descrito pelo hamiltoniano de Heisenberg ferromagnético, acrescido do termo de Zeeman e de um termo que representa as interações dipolares. As interações de troca são consideradas isotrópicas e somente entre os primeiros vizinhos, enquanto que as dipolares se estendem a todos os spins. O filme que estamos considerando se encontra imerso entre dois meios diamagnéticos infinitos, sendo que um deles pode ser o vácuo. Na solução deste problema, utilizamos a técnica das funções de Green na aproximação das fases aleatórias ou RPA, para as interações de troca e dipolares. A magnetização e a relação de dispersão das ondas de spin são calculadas de um modo autoconsistente em função da temperatura

. Exibimos também os diagramas de fase do sistema.

SIMULAÇÃO GRÁFICA BI-DIMENSIONAL DE DEPOSIÇÃO DE FILME FINO EM SUBSTRATO INCLINADO

DAMIÃO, A. J.; NOVACKOSKI, V.

CTA/IEAv - São José dos Campos - SP

Foi desenvolvido um programa de computador, que faz a simulação gráfica, da deposição de um filme fino, sobre um substrato inclinado. A simulação permite acompanhar no monitor de um computador pessoal, tipo IBM-AT-386, a deposição de um filme, os efeitos de sombreado e a formação da estrutura colunar. Alguns parâmetros da deposição, tais como: ângulo do substrato, taxa de deposição, energia e mobilidade das partículas, dentre outros, podem ser alterados. A "temperatura" do substrato pode ser alterada através da mudança da energia mínima das partículas. No final da simulação são calculadas: a espessura média depositada e a razão de empacotamento, ou seja, a razão entre o número de posições ocupadas pelas partículas e o número total de posições possíveis. O programa foi escrito em "C", a partir de uma descrição fenomenológica dos parâmetros envolvidos na deposição de um filme fino.

SIMULAÇÃO DE DEPOSIÇÃO EPITAXIAL DE COBRE SOBRE SILÍCIO

MORS, P. M.; TREIN, P. E.; SCHREINER, W. H.

UFRGS

Uma simulação Monte Carlo simples reproduz qualitativamente resultados de deposição epitaxial de Cu sobre Si(100). O trabalho de simulação foi realizado na suposição de que o crescimento se dá de acordo com a teoria de Frank e van der Merwe (crescimento "layer-by-layer"), com os cálculos efetuados no Centro de Supercomputação (CRAY) da UFRGS. Os filmes foram crescidos e analisados no Laboratório de Filmes Finos do Instituto de Física da UFRGS. É analisado o fato de taxas de deposição mais altas que as usualmente adotadas, à temperatura ambiente, levarem a melhores resultados de epitaxia. Este resultado é atribuído à energia térmica que é trazida e distribuída no sistema pelas partículas que são depositadas.

Análise Microscópica de Filmes Finos de TiN Depositados por IBAD

ALBERTS, L.

Universitaet Heidelberg - (Alemanha)

HUBLER, R.

PUCRS

Filmes finos de nitreto de Titânio, são comunmente usados como revestimentos protetores contra corrosão e desgaste mecânico. Estes filmes são geralmente depositados por técnicas convencionais como magnetron sputtering, CVD e Ion Plating. Desafortunadamente a utilização destes revestimentos para fins anti-corrosivos, é limitado pela alta porosidade e pela estrutura colunar apresentada pelo TiN. Atualmente, vários laboratórios estão utilizando a técnica de deposição de filmes finos assistida por bombardeamento iônico (IBAD) para depositar revestimentos de TiN. Uma das maiores vantagens desta técnica, é a obtenção de fases mais densas e com orientação preferencial. Ensaio de corrosão em buffers de ácido acético tem mostrado surpreendentes melhorias na capacidade de proteção contra corrosão dos filmes depositados por esta técnica.

O objetivo deste trabalho é apresentar as modificações microestruturais nos filmes de TiN induzidas pelo bombardeamento iônico. Serão analisadas as mudanças estruturais em função do ângulo de incidência dos íons usados para assistir a deposição. Os resultados serão discutidos usando-se Microscopia de transmissão e varredura e difração de raios-X tridimensional.

Physical Characterization of Carbon Nitride Thin Films.

CHUBACI, J. F. D.; WATANABE, S.

LABORATÓRIO DE DOSIMETRIA, DEPARTAMENTO DE FÍSICA NUCLEAR, INSTITUTO DE FÍSICA, UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

OGATA, K.

R&D DIV., NISSIN ELECTRIC CO. LTD., KYOTO, JAPAN

FUJIMOTO, F.

CEMES-LOE/CNRS, Toulouse, France; on leave from Okayama University of Sciences, Okayama, Japan

Carbon nitride thin films were formed by carbon vapor deposition with simultaneous nitrogen ion bombardment, ion and vapor deposition method (IVD), on substrates of fused silica and silicon (100) wafers. The energy of nitrogen ions was varied from 0.2 to 10.0 keV and the composition ratio (C/N) was varied from 0.4 to 14.0. The X-ray diffraction study indicated that the films were amorphous. The films deposited on silicon wafers were analyzed by X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) and Fourier transform infrared spectrometry (FT-IR) and those on fused silica substrates by optical absorption spectrometry (OA). The results indicated a close relation between XPS, FT-IR and OA data. All formed films showed a high hardness with a ma-

ximum of 6100 kgf/mm² for a sample formed at 0.5 keV and transport ratio (C/N)=0.4. (JFDC partially supported by CNPQ)

AUTO-ORGANIZAÇÃO EM SUPERFÍCIES 2-D DURANTE A OXIDAÇÃO DE CO SOBRE Pt(100)

MAIA, D. L.; ANDRADE, R. F. S.

UFBA

Estudamos a oxidação de CO sobre Pt(100) através de um sistema de equações diferenciais parciais, obtido a partir de um modelo homogêneo com a inclusão de termos de difusão. A presença da difusão ordinária do CO sobre a superfície é um fato conhecido, porém a inclusão de um novo termo na equação para a variável que descreve o estado da superfície, sugerida por nós, aumenta substancialmente os diferentes tipos de solução para o sistema. O sistema é integrado numericamente através dos métodos de Runge-Kutta e Euler, sendo a dependência espacial tratada via diferenças finitas. Discutimos soluções do sistema obtidas para a superfície homogênea e não homogênea, em uma e duas dimensões espaciais. No primeiro caso, a depender da razão entre os dois coeficientes de difusão, encontramos oscilações homogêneas e padrões estáticos tipo Turing. No segundo caso, encontramos frentes de onda, geradas no local onde a concentração de defeitos é maior. Os resultados para uma e duas dimensões são quantitativamente comparáveis, porém no caso bidimensional encontramos uma maior diversidade de padrões.

CEMS STUDY OF SUPERFICIAL IRON NITRIDES FORMED BY POS-DISCHARGE NITRIDING

SILVA SOBRINHO, A. S. DA; DRAGO, V.; SOUZA, A. R. DE

Universidade Federal de Santa Catarina - UFSC

A flowing microwave pos-discharge chamber, running with pure nitrogen at pressures of 3 torr and fluxes of 6 cm³/s (NTP), is used for treating polished iron samples placed away of the luminescent region. The sample temperature is maintained at 400 C by an external oven and after glow flowing discharge is characterized by the 568 nm emission line of the radiative N₂(B,V'=11-8) states. We have nitride samples with 3, 6, 15 and 30 min. The results observed by CEMS, shows the preponderant presence of large and broad line doublet, with IS values from 0.39 to 0.41 mm/s, QS from 0.59 to 0.71 mm/s, and line widths in order of 0.48 mm/s. Concomitant with this doublet we observed the presence of the two Fe(II) sites of the γ' -Fe₄N phase with intensities that quickly saturates with time. The presence of little fractions of the ξ -Fe₂N phase is naively detected. The large doublet is attributed to the metastable FeN

phase, that evolves (at that conditions) competitively to the Fe_4N and Fe_2N nitrides. By increasing the sample temperature to 430 and 460 C we detected a mixture of all FeN , $\xi-Fe_2N$, $\epsilon-Fe_{2-3}N$ and $\gamma'-Fe_4N$ phases, with a significant degree of amorphization.

ESTUDO DE LIGAS DE FILMES FINOS DE Fe/Al COMO SUPERFÍCIES PROTETORAS NOS PROCESSOS DE CORROSÃO

ALEXANDRE, J. L.; HÜBLER, R.; BAUMVOL, I. J. R.
UFRGS
 HÜBLER, R.
PUC-RS

Este trabalho visa analisar o comportamento das fases de Fe/Al quando utilizadas como revestimento protetor em processos de corrosão. As fases foram obtidas pelo tratamento térmico das multicamadas em ultra-alto vácuo e pelo bombadeamento iônico com Ar^+ e Xe^+ , em várias temperaturas. As multicamadas de filmes finos de Fe/Al foram depositadas por evaporação térmica sobre pastilhas de aço padrão com espessuras relativas diferenciadas (10/2, 10/10 e 10/42 nm de Fe/Al). A espessura total da multicamada variou entre 100 e 500 nm. Os filmes protetores foram analisados pelas técnicas de Difração de Raios-X (XRD), Rutherford Backscattering (RBS), Corrosão Eletroquímica (Ciclo-Voltamografia) e Espectroscopia Mössbauer de Elétrons de Conversão (CEMS). As medidas de corrosão foram realizadas em um buffer de ácido acético com PH 5.6 e os ciclos são variados entre -1.2 e +1.2V. Para caracterizar a proteção contra a corrosão será utilizada a corrente crítica de dissolução do Fe no ácido em função do número de ciclos. Estes resultados serão discutidos em função dos parâmetros de deposição.

CÁLCULO DE ESTRUTURA ELETRÔNICA EM SUPERFÍCIES METÁLICAS USANDO O RS-LMTO-ASA

PEDUTO, P. R.; FROTA-PESSÔA, S.
Instituto de Física - USP

Desenvolvemos^[1] o *RS-LMTO-ASA* ("Real-Space-Linear Muffin Tin Orbitals in the Atomic Sphere Approximation") baseado no formalismo LMTO-ASA^[2] e implementado no espaço real.

Este método se mostrou extremamente eficaz no estudo de estrutura eletrônica de sistemas complexos tais como sistemas amorfos, impurezas em metais, sistemas magnéticos, complexo de vacâncias etc.

Neste trabalho, propomos uma versão do método para o estudo de sistemas com simetria bidimensionais dentre os quais destacamos superfícies metálicas. Como aplicação exibiremos alguns resultados para a superfície de Al FCC e compararemos estes resultados com os obtidos usando-se métodos usuais de espaço recíproco. O método aqui proposto é particularmente interessante

para o estudo de multi-camadas que será tema de nossos próximos trabalhos.

[1] Peduto P.R., Frota-Pessôa S., Methfessel M. Phys. Rev. B 44,13283 (1991).

[2] Andersen O.K., Jepsen O. Phys. Rev. Lett 53, 2571 (1984).

SOBRE AS PROPRIEDADES ATÔMICAS DE SUPERFÍCIES SINGULARES DE UM CRISTAL ANARMÔNICO COM REDE CÚBICA SIMPLES

ZUBOV, V. I.

UFG

BAZIRUWIHA, J. DE D.; NAMONTOV, I. V.
Univ. Amizade dos Povos - Moscou - Russia

Com base no Método Correlativo Não-Simetrizado do Campo Auto-consistente^a realizamos um estudo teórico das propriedades estruturais, dinâmicas e termodinâmicas das superfícies singulares de um modelo de cristal anarmônico com rede cúbica simples, com interação entre primeiros vizinhos. Calculamos a relaxação da rede, os coeficientes de dilatação térmica das distâncias interatômicas, as amplitudes efetivas das vibrações térmicas anarmônicas dos átomos e sua anisotropia, as funções termodinâmicas das superfícies cristal-gás. Calculamos as correções quânticas. A razão entre o coeficiente de dilatação térmica da primeira distância interplanar e o coeficiente de dilatação térmica dentro do cristal apresenta um mínimo numa certa temperatura. O crescimento dessa razão, com a diminuição da temperatura, se deve a efeitos quânticos, ao passo que com a elevação da temperatura este crescimento se dá devido à anarmonicidade. A tensão superficial das fases (001) e (110) é positiva, mas para a fase (111) ela é negativa numa certa região.

Viatcheslav I. Zubov (Apoio financeiro: CNPq.)

^aV.I. Zubov, I.V. Namontov and N.P. Tretyakov, Int. J. Mod. Phys. **B6**, 197(1992).

ESTUDO TEÓRICO DAS MODIFICAÇÕES NA CONCENTRAÇÃO DE Na EM β'' - ALUMINAS IRRADIADAS

PAULA, C. A. D.; D'AJELLO, P. C. T.
Universidade Federal de Santa Catarina

Recentes investigações experimentais^{ab} tem anunciado alterações nos perfis de concentração de um dos componentes iônicos (Na) das β'' - Aluminas irradiadas por elétrons, prótons ou íons de gás nobre. As justificativas teóricas para essa evidência são desenvolvidas em

termos de três processos principais, a) transporte estimulado por radiação, b) migração assistida por campo elétrico e c) ejeção preferencial de elementos alca linos da superfície da amostra. Assumindo que a cinética de defeitos pun tuais é central no tratamento teórico desse fenômeno, desenvolvemos estudos para considerar as mudanças de composição em amostras de β^{Al} - Aluminas bombardeadas por íons de Argônio a 200 KeV, com substrato a temperatura ambiente. Dessa forma as equações de balanço para os de feitos pontuais definem a concentração estacionária dos mesmos e por consequência o coeficiente de difusão, assim como o campo elétrico passa a ser decorrência da ionizacção induzida pelos íons energéticos. Exploramos duas situações, i) campo elétrico dependente de posiçã o com coeficiente de difusão e mobilidade constantes e ii) campo elétrico dependente de posição mas com coeficiente de difusão e mobilidade variáveis no espaço. Algumas comparações são com os dados experimenta is são desenvolvidas e novas propostas de tratamento do problema são indicadas.

^oG. Mariotto, A. Miotello, G. Della Mea and F.L.Freire Jr., Nucl. Instr. Meth. B46 (1990) 107

^bF.L.Freire Jr., G. Della Mea, G. Mariotto, A. Miotello and F. Crevellera, Nucl Instr. Meth. B46 (1990) 152

PROPRIEDADES DE FILMES DUROS DE a-C:H INCORPORADOS COM SILÍCIO.

BAIA NETO, A. L.; CAMARGO JR, S. DE S.

Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais - COPPE

Filmes duros de carbono amorfo hidrogenado (a-C:H) apresentam propriedades altamente interessantes para um grande número de aplicações tecnológicas. Entretanto, fatores como taxa de deposição e tensão interna ainda se constituem em problemas a serem resolvidos. Neste trabalho discutimos o efeito da incorporação do silício em algumas propriedades de filmes duros de a-C:H. Os filmes foram produzidos sobre substrato de silício e vidro em um reator de descarga luminescente mantida por rádio frequência, onde os gases precursores utilizados são o metano (CH₄) e o silano (SiH₄). Os resultados obtidos mostram uma incorporação de silício que atinge cerca de 50 at.% para uma concentração de 15% de silano na atmosfera, e um grande aumento na taxa de deposição. Do ponto de vista das propriedades mecânicas dos filmes produzidos, observou-se uma redução de cerca de um fator três na tensão interna, enquanto a dureza é pouco afetada. Medidas de espectroscopia de infra-vermelho indicam que o silício é em grande maioria incorporado na forma Si pura, sem estar ligado ao hidrogênio. Medidas de transmitância ótica mostram que a incorporação de silício aumenta o gap e diminui o índice de refração do material. Também serão apresentados e discutidos resultados de medidas de condutividade em função da temperatura.

On The Crystallization Of TiN Thin Films.

CHUBACI, J. F. D.; WATANABE, S.

LABORATÓRIO DE DOSIMETRIA, DEPARTAMENTO DE FÍSICA NUCLEAR, INSTITUTO DE FÍSICA, UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

SAKAI, T.; YAMAMOTO, T.

Institute of Scientific and Industrial Research, Osaka University, Osaka, Japan.

NISHIYAMA, S.; OGATA, K.; SUZUKI, Y.

R&D DIV., NISSIN ELECTRIC CO. LTD., KYOTO, JAPAN

FUJIMOTO, F.

CEMES-LOE/CNRS, Toulouse, France; on leave from Okayama University of Sciences, Okayama, Japan

TiN thin films have been formed on silicon wafers by the ion and vapor deposition (IVD) method. The ion energy varied from 2.0 to 10.0 keV and the transport ratio (Ti/N) from 0.9 to 3.7. The crystalline orientations have been studied by Cu-K α X-ray diffraction and the composition ratio by X-ray induced photoelectron spectroscopy (XPS). Vickers hardness has been also analyzed. Although metallic-state titanium had not been detected by X-ray diffraction, the relation between the transport ratio for the film formation and the measured composition ratio indicates that the samples are titanium rich. For a same energy, samples, with a composition ratio approaching stoichiometry, were preferentially oriented in the direction of the (200) axis of titanium nitride, while when the composition ratio departed from stoichiometry there was a tendency for polycrystallization with the presence of the (111), (200) and/or (220) axis. Samples with a higher crystalline orientation showed to be harder than those polycrystalline.// (JFDC partially supported by CNPQ).

FLUXO DE ENERGIA EM MATERIAIS ANISOTRÓPICOS COM GEOMETRIA CILÍNDRICA.

VASCONCELOS, E. F.; FARIAS, G. A.; OLIVEIRA, N. T.

Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Campus do Pici, Caixa Postal 6030, Fortaleza, CE.

ALMEIDA, N. S.

Departamento de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, RN.

Neste trabalho consideramos a propagação de polaritons superficiais em sistemas cilíndricos. O sistema em questão é um longo cilindro condutor de raio a , caracterizado por uma constante dielétrica $\epsilon(\omega)$ que apresenta anisotropia uniaxial, envolto por um meio infinito, isotrópico, não magnético. A constante dielétrica dependente da frequência para materiais que apresentam tal anisotropia, é dada por uma matriz diagonal com $\epsilon_{11}(\omega) = \epsilon_{\perp}$ e o termo $\epsilon_{33}(\omega) = \epsilon_{\parallel}(\omega)$. Os termos perpendicular e paralelo referem-se às direções perpendicular e paralela ao eixo do cilindro orientado ao longo da direção z . As suas expressões são:

$$\epsilon_{\perp}(\omega) = \epsilon_{\infty z} \left[\frac{\omega^2 - \omega_{L_{oz}}^2}{\omega^2 - \omega_{T_o}^2} \right],$$

$$\epsilon_{\parallel}(\omega) = \epsilon_{\infty \parallel} \left[\prod_{n=1}^3 \frac{\omega^2 - \omega_{L_{nz}}^2}{\omega^2 - \omega_{T_o}^2} \right].$$

Utilizando esse mesmo sistema, calculamos a relação de dispersão de polaritons superficiais. O material utilizado para a obtenção dos resultados numéricos foi o TiO_2 . Tais resultados quando aproximados para os casos de sistemas que apresentam constante dielétrica isotrópica, mostram perfeita concordância com os resultados constantes na literatura.

O objetivo agora é determinar a densidade e o fluxo de energia, com particular atenção dada aos polaritons superficiais em que a densidade e o fluxo de energia estão concentrados próximos à interface entre o cilindro e o meio circundante. Além disso determinamos a velocidade de transporte da energia. Pretendemos continuar utilizando o TiO_2 e os resultados obtidos serão comparados com aqueles obtidos anteriormente para o caso de uma fibra ótica de constante dielétrica isotrópica.

ADSORÇÃO DE MONÓXIDO DE CARBONO SOBRE AS SUPERFÍCIES DE Pd E DE Pd_xAg_{1-x}

TAKAHASHI, H.; LANDERS, R.; FAZAN, T. A.

IFGW - UNICAMP

NASCENTE, P. A. DE P.

DEMa - UFSCar

Estudamos o efeito da adição de Ag a Pd nas propriedades da cinética de adsorção-dessorção do CO e as

correlacionamos com o caso do paládio puro. Resultados da literatura indicam que a energia de adsorção do CO é substancialmente menor na Ag do que no Pd. A adição da Ag na formação das ligas muda a estrutura eletrônica do Pd, causando mudança em sua interação com o CO. Este estudo básico pode ser interessante para se compreender a catálise heterogênea das superfícies bimetalicas com importantes aplicações tecnológicas. Usamos um sistema de ultra-alto vácuo ($P < 5 \times 10^{-10} Torr$) que permite análises pelas espectroscopias de elétrons Auger (AES) e dessorção térmica (TDS). AES foi usada para identificar a composição superficial das amostras e TDS foi empregada para medir a taxa de dessorção do CO quando a amostra era aquecida com variação linear de temperatura. Observamos um deslocamento negativo na energia de adsorção do CO com o aumento de sua cobertura no Pd puro e nas ligas Pd_xAg_{1-x} . Este resultado pode ser devido a dois fatores: (1) outros sítios de adsorção são ocupados com coberturas maiores, causando a diminuição da energia de dessorção (efeito de sítio); (2) a distância entre as moléculas de CO vizinhas é diminuída com o aumento da cobertura, provocando interações repulsivas mútuas maiores que levam à diminuição da energia de dessorção (efeito de interação lateral).

Análises Microestruturais e de Superfície das Ligas Pd_xAg_{1-x}

NASCENTE, P. A. DE P.

DEMa - UFSCar

SILVA, M. DE A. P. DA

IFQSC - USP

TAKAHASHI, H.; LANDERS, R.; CASTRO, S. G. DE;

KLEIMAN, G. G.

IFGW - UNICAMP

A compreensão em escala atômica das propriedades físicas e químicas das superfícies bimetalicas é muito importante em várias áreas científicas e tecnológicas, particularmente em catálise heterogênea. Um aspecto fundamental relacionado à superfície de uma liga refere-se à composição superficial, uma vez que uma liga termodinamicamente ideal não apresenta necessariamente composição superficial igual à volumétrica. O fator mais importante para o enriquecimento superficial de um componente da liga é a necessidade de minimizar-se a energia livre da superfície.

A catálise heterogênea envolve a adsorção dos reagentes numa superfície, a reação e a dessorção dos produtos, sem que ocorra mudança material na superfície. As informações sobre as interações de moléculas com as superfícies bimetalicas são valiosas para compreender-se o comportamento catalítico das ligas.

Investigamos o sistema de ligas paládio-prata por meio das seguintes técnicas experimentais: espectroscopia de elétrons de Auger (AES), espectroscopia de fotoelétrons excitados por raio-X (XPS), difração de raio-X (XRD) e

microscopia eletrônica (SEM-EDS). Observamos o enriquecimento superficial de prata. A dessorção térmica de monóxido de carbono das superfícies de Pd_xAg_{1-x} confirma este resultado.

Técnicas de Caracterização, Aplicações em Ótica e Semicondutores (SUF) - 21/05/93

PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E ÓPTICAS DO HEXAMETILDISILOXANO POLIMERIZADO A PLASMAS DE CORRENTE CONTÍNUA E RÁDIO-FREQÜÊNCIA

MOTA, R. P.

Dep. de Física e Química, Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista (UNESP)

MORAES, M. A. B. DE

Instituto de Física 'Gleb Wataghin', Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)

Filmes finos de polímeros orgânicos depositados a plasma, possuem uma estrutura altamente ramificada e entrelaçada, sendo inertes a ataques químicos de ácidos e bases fortes. Estes filmes possuem grande aderência a diversos tipos de substratos, apresentando promissoras aplicações tecnológicas. Estudamos o hexametildisiloxano, polimerizado em plasmas de corrente contínua e de rádio-freqüência, para diferentes condições de pressão e potência destas descargas. Concomitantemente, acompanhamos a espectroscopia óptica de emissão destes plasmas, observando a presença de espécies químicas como C, H e SiH.

A estrutura molecular dos polímeros foi investigada por espectroscopia infravermelha e revelou uma forte dependência das ligações químicas Si-H nos filmes, com as espécies SiH das descargas.

Por último, estudamos o índice de refração destes materiais, apresentando valores entre 1,45 e 1,60 e suas relações com a estrutura dos filmes.

FILMES FINOS COMPÓSITOS PREPARADOS EM PLASMAS DE MISTURAS DE VAPOR DE COBRE, HÉLIO, OXIGÊNIO E HEXAMETILDISILOXANO.

MURIBECA, R. A.

UFPP

GONÇALVES, M. C.

Instituto de Química - UNICAMP

LIMA, E. J.; MARÇAL, N.; MORAES, M. A. B. DE;

NICOLA, J. H.

Instituto de Física - UNICAMP

Filmes finos compósitos SiO_x -Cu com conteúdo de cobre altamente controlado foram preparados em plasmas de rádio-freqüência em misturas de vapor de cobre, hélio, oxigênio e hexametildisiloxano (HMDS) numa câmara de vácuo. O vapor de cobre é proveniente de uma célula de evaporação aquecida resistivamente enquanto o He, o O_2 e o vapor de HMDS são admitidos na câmara através de fluxômetros de precisão. Um espectrômetro óptico monocromador de alta resolução foi empregado para a análise da descarga, permitindo a identificação de diversas espécies químicas (Cu, Si, C, He, N, CH etc.) através de suas linhas de emissão. A intensidade da linha de emissão de cobre em 324.7 nm foi empregada como uma referência para manter uma pressão parcial controlada de cobre no plasma, por meio de um circuito de realimentação que comandava a corrente de aquecimento na célula de evaporação e conseqüentemente a taxa de evaporação do cobre. Observações dos filmes por microscopia eletrônica de transmissão mostraram uma micro-estrutura em que partículas de cobre estão dispersas na matriz de SiO_x sendo a estrutura química desta última estudada por espectrofotometria infra-vermelha de transmissão. A micro-estrutura e a estrutura química dos filmes são estudadas em função dos parâmetros da deposição: potência rf aplicada e razão entre pressões parciais dos componentes da descarga.

FOTOELETROQUÍMICA DE ÓXIDOS DE METAIS DE TRANSIÇÃO

BARJA, P. R.; GORENSTEIN, A.

IFGW/UNICAMP

Certos óxidos de metais de transição mudam suas propriedades ópticas frente a um processo de intercalação eletroquímica, dando origem ao chamado efeito electrocrômico. Os objetivos da presente pesquisa são, por um lado, avaliar a potencial utilização destes materiais na conversão fotoeletroquímica, e por outro caracterizar os materiais caracterizar parâmetros como energia do gap e tipo de portadores majoritários em diferentes estados de oxidação dos filmes.

Foram estudados filmes de óxido de níquel crescidos por "sputtering" r.f. e filmes de óxido de titânio crescidos por sol-gel. Os resultados indicaram que no caso do óxido de níquel, o material apresenta fotocorrente anódica no estado colorido (oxidado) e fotocorrente catódica no estado transparente (reduzido), apresentando portanto uma transição no tipo de portadores majoritários, induzida pela intercalação. Fotocorrentes no estado oxidado foram observadas para incidência de luz com energias menores que a correspondente a energia do gap no estado reduzido, indicando uma aparente diminuição do gap no estado oxidado. Em meio aquoso, os filmes de óxido de titânio apresentaram o comportamento esperado para semicondutores tipo n, indicando a ausência do processo de intercalação neste meio. A

energia do gap e a eficiência de conversão nestes materiais foi semelhante aos valores obtidos por outros autores, para filmes crescidos por outras técnicas.

Propriedades Ópticas do Silício Poroso

FUJII, A. T.

Universidade Estadual de Londrina, Londrina PR

ONARI, S.; ARAI, T.

University of Tsukuba, Tsukuba, Ibaraki, JAPAN

A fotoluminescência na região da luz visível do silício poroso (P_{5i}) anodizado, tem chamado muita atenção dos pesquisadores recentemente. Por muito tempo, previa-se que o silício não poderia emitir a luz na região do visível, por possuir o gap pequeno (equivalente a região do infravermelho) impossibilitando a aplicação nos dispositivos da optoeletrônica. O processo da obtenção do P-Si regularmente utilizado, constitui na descarga elétrica em solução de ácido fluorídrico (HF), utilizando o wafer de Si como anodo e a platina como eletrodo catodo. A origem exata do mecanismo da fotoluminescência e ainda desconhecida, mas alguns dos modelos são: 1) devido a dimensão nanométrica das colunas de Si que formam na superfície do c-Si, 2) adsorção de H, C, O na superfície, 3) formação do composto silixene ($Si_6O_3H_6$), 4) formação da camada de silício amorfo. No presente trabalho, foram analisadas as propriedades ópticas do P-Si sem a presença do substrato do wafer cristalino, com as técnicas de absorção óptica, luminescência e raman.

Descarga luminosa em oxigênio

MACIEL, H. S.; CASTRO, I. DE; PETRACONI FILHO, G.; MASSI, M.

Instituto Tecnológico de Aeronáutica - ITA

Descargas luminosas ("glow discharge") em oxigênio têm sido estudadas por várias décadas. Entretanto, um grande interesse por essas descargas renasceu com a vasta aplicabilidade tecnológica encontrada para plasmas frios produzidos por descargas em oxigênio. Recentes trabalhos sobre o assunto focalizam modelos cinéticos da descarga [1] e medidas de população de partículas por espectroscopia [2]. Uma deficiência desses estudos é a não predição de diferentes modos de operação de uma descarga em O_2 e a indicação apenas de valores relativos de densidade de partículas do plasma.

No presente trabalho apresentamos medidas de propriedades de plasma de uma descarga luminosa em O_2 usando-se a técnica de sondas eletrostáticas. Basicamente usamos a sonda de Langmuir para medidas de densidade e temperatura de elétrons. Desenvolvemos uma sonda de parede para determinação de densidade de íons positivos e negativos. Esses resultados serão apresentados considerando-se os modos de corrente alta e corrente baixa da descarga.

Concluimos o trabalho enfatizando a importância da técnica desenvolvida para a determinação de valores absolutos das propriedades de plasmas numa descarga "glow" em oxigênio.

Referências:

- [1] Gousset, G. et al, Plasma Chemistry Processing, vol.9(2), 189 (1989).
- [2] Gousset, G. et al, Plasma Chemistry Processing, vol.7(4), 409 (1987).

DETECÇÃO DE CH_3 ATRAVÉS DE REMPI DURANTE O CRESCIMENTO DE FILMES DE DIAMANTE EM UM REATOR CVD ASSISTIDO POR FILAMENTO QUENTE.

CORAT, E. J.

LAS/INPE

GOODWIN, D. G.

California Institute of Technology

O radical (CH_3), importante radical no processo de crescimento de filmes de diamante por deposição de vapor químico (CVD), foi estudado experimentalmente, neste trabalho, através de ionização multifotônica aumentada por ressonância (REMPI). Foi estudada a dependência da concentração do CH_3 com a temperatura do filamento, com a temperatura do substrato e com a distância a partir do substrato. De particular interesse é a dependência com a temperatura do substrato que sugere uma interação dos processos de superfície com os processos cinético-químicos da fase gasosa. Abaixo de 1000K a dependência com a temperatura do substrato é caracterizada por uma energia de ativação de aproximadamente 4Kcal/mol. As possíveis causas para este efeito serão discutidas.

CRISTALIZAÇÃO DE a-Si:H INDUZIDA POR Cu.

BERNARDINO, L. A.; ACHETE, C. A.

Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais - COPPE

O a-Si e o a-Si:H quando em contato com metais têm sua temperatura de cristalização reduzida. Vários trabalhos têm sido publicados sobre esse assunto, utilizando principalmente Au e Al. Neste trabalho foi estudado o processo de cristalização do a-Si:H em contato com cobre. As amostras estudadas consistiram de filmes finos de Cu (900 Å) depositados por evaporação sobre filmes a-Si:H (10.000 Å) produzidos por "glow-discharge". Foi observado que após tratamento térmico a 350 C o a-Si:H cristaliza formando grãos visíveis, por microscopia eletrônica de varredura (MEV), na superfície da amostra. Durante a cristalização é observada a evolução de H_2 e aumento da resistência de folha. Medidas feitas por técnicas nucleares (ERDA),

mostram acumulação de H próxima 9a interface entre o a-Si:H e o siliceto de cobre (formado 9a 200 C), antes do início do processo de cristalização. Retroespalhamento de Rutherford (RBS) foi utilizado no estudo de mudanças de composição química ao longo da espessura da amostra. Medidas de espalhamento Raman comprovaram a cristalização do a-Si:H 9a esta temperatura.

REAÇÃO NA INTERFACE NO SISTEMA Cu/a-Si:H.

BERNARDINO, L. A.; ACHETE, C.

Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais -
COPPE

O sistema Cu-Si tem despertado grande interesse nos últimos anos devido a possibilidade de utilizar este metal em substituição ao alumínio como contato elétrico em dispositivos eletrônicos, devido a sua baixa resistividade. Neste trabalho é estudada a interação entre cobre e silício amorfo hidrogenado, a qual é relatada ocorrer a baixas temperaturas (200 C). As amostras estudadas consistem de filmes finos de Cu (150 Å) depositados por evaporação por feixe de elétrons sobre filme de a-Si:H (10.000 Å) produzidos por "glow-discharge", foram caracterizadas através da técnica de efusão de H₂, Espectroscopia de Elétrons Auger (AES) e medidas de resistência de folha in situ. A técnica de efusão é relativamente nova em análise de materiais e permite caracterizar mudanças estruturais ocorridas em filmes finos através da evolução de gases presentes nas amostras em função da temperatura de aquecimento. Verificou-se que a presença de cobre sobre a superfície do a-Si:H provoca a evolução de hidrogênio a temperaturas muito mais baixas comparadas com o a-Si:H não recoberto com metal. Medidas AES e de resistência de folha indicam que esta evolução de H₂ está diretamente relacionada 9a formação de siliceto.

Caracterização de $\beta - FeSi_2$ obtido a partir de multicamadas de Fe/Si.

SAUL, C. K.; AMARAL, L.; SCHREINER, W. H.
Instituto de Física - UFRGS

O beta siliceto de ferro tem sido considerado um material chave para a fabricação de dispositivos optoeletrônicos integrados diretamente sobre o silício. Seu gap de 0,87 eV ($\lambda = 1,43\mu m$) o torna interessante para aplicação em comunicação por fibras ópticas. Este trabalho tem como objetivo a obtenção do $\beta - FeSi_2$ a partir de multicamadas de Fe/Si depositadas conforme proporções estequiométricas em um equipamento BALZERS UMS 500P. Essas multicamadas foram depositadas simultaneamente sobre substratos de Si(100) e Si(111) com taxas de deposição de 0,5 Å/s para ambos os materiais (Fe e Si) e com pressão de base de 10^{-8} mbar. As duas amostras obtidas após a deposição foram subdivididas e submetidas a tratamentos térmicos em

temperaturas de 400, 600 e 800°C durante duas horas, a fim de permitir o acompanhamento da evolução do siliceto. A caracterização das amostras depositadas e tratadas termicamente foi efetuada utilizando Difração de Raios-X (XRD), Espectroscopia Mössbauer de Conversão de Elétrons (CEMS) e Retro-espalhamento Rutherford (RBS). Foi verificado via RBS que as amostras já não apresentavam a estrutura de multicamada imediatamente após a deposição, e os resultados de XRD e CEMS indicam a formação do $\beta - FeSi_2$, sem indícios do composto $FeSi$, após tratamento térmico a 400 °C.

Medidas Temporais da Fotocorrente em Células Fotoeletroquímicas

SOLTZ, D.

Laboratório de Óptica, Departamento do Estado Sólido,
UNICAMP

SCHWARZBURG, K.

Fritz Haber Institut der Max Plank Gesselshaft, Berlin,
FRG

Foram feitas medidas temporais da fotocorrente em sistemas eletroquímicos na interface semicondutor/eletrolito. Amostras de semicondutores colocadas em soluções contendo um par redox, formam uma barreira Schottky. Quando a junção é iluminada, os portadores minoritários fotogerados no semicondutor migram para a superfície sob ação do potencial da barreira e as cargas se transferem para o par redox na solução. Se a transferência for lenta as cargas podem recombinar ou se prender na superfície, deslocando as pontas das bandas e reduzindo a altura da barreira. Como a fotocorrente depende da altura da barreira, medindo-se a evolução temporal da fotocorrente pode se obter informações sobre os mecanismos de transporte de carga na interface.

Foram estudadas amostras de InP e Si em soluções com diferentes pares redox. No caso do InP a evolução da corrente indicou um desentortamento das bandas começando imediatamente após o início da iluminação. O efeito foi bem menor com amostras de Si em soluções metanólicas. Estes resultados podem explicar, a nível qualitativo, o comportamento de células solares fotoeletroquímicas apresentadas na literatura.

Heterogeneidades em Superfícies de Vidros e o Contorno da Tripla Interface de Gotas de Água.

ZIEMATH, E. C.

Departamento de Física, IGCE - UNESP, Rio Claro

ZANOTTO, E. D.

Departamento de Engenharia de Materiais, UFSCar, São
Carlos

Observou-se o efeito de heterogeneidades em superfícies de vidros sobre o contorno de gotas de água depositadas nas mesmas, e mediu-se o ângulo de contato destas

gotas. Em superfícies de vidros existem heterogeneidades que causam variações na energia superficial. Tais heterogeneidades podem ser flutuações na composição, micro-cristais (vitro-cerâmicas), pequenas rugosidades, e mesmo filmes finos de impurezas. Uma gota de um líquido depositada sobre a superfície plana, homogênea, e limpa de um vidro apresenta um contorno perfeitamente esférico, e o ângulo de contato ao longo deste contorno é constante. As heterogeneidades produzem variações no contorno da gota e, conseqüentemente, no ângulo de contato, pois ocorrem flutuações nas energias interfaciais sólido-líquido e sólido-gás. Com um microscópio ótico observamos e medimos estas variações em gotas de água depositadas sobre superfícies parcialmente cristalizadas de um vidro de cordierita, e superfícies de lâminas de vidro para microscópio polidas mecanicamente e originais (polidas à fogo). Conclui-se que os cristais superficiais no vidro de cordierita tem uma energia interfacial sólido-gás maior que a fase amorfa. Na superfície do vidro polido mecanicamente esta energia também é maior que da superfície original devido ao rompimento de ligações moleculares durante a abrasão.

Apoio financeiro: CNPq/RHAE-NM.

ANÁLISE DE FILME FINO DE OURO DEPOSITADO SOBRE Si(100) USANDO STM.

BLESER, R. A. S.; ACHETE, C. A.

Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais - COPPE

Quando um filme de ouro é depositado por evaporação sobre um substrato de silício cristalino é observada a formação de grãos monocristalinos. Após tratamento térmico em vácuo esse filme sofre alterações composicionais e estruturais com a migração do silício para a superfície. A microscopia de tunelamento de varredura (STM) tem como principal vantagem, no estudo dessas modificações, o fato de fornecer imagens com alta resolução espacial vertical (0.1nm) com relativa facilidade e a possibilidade de resolução atômica com um pouco mais de cuidado. Assim, variações estruturais e morfológicas decorrentes de diferentes tratamentos térmicos podem ser observadas. Neste trabalho apresentaremos os primeiros resultados obtidos em filmes de ouro evaporados sobre Si(100) submetidos a diferentes tratamentos térmicos.

Medidas de Espalhamento de Luz por Superfícies Semicondutoras Texturizadas Fotoeletroquimicamente

FERREIRA, N. G.

UNIVAP / UNICAMP.

CESCATO, L. H. C.

UNICAMP

Superfícies semicondutoras quando submetidas a ataques químicos, eletroquímicos e fotoeletroquímicos produzem uma texturização que geram normalmente efeitos indesejados. Em casos extremos, entretanto, esta texturização pode gerar um efeito de anti-reflexão, que tem aplicação direta em dispositivos fotovoltaicos por aumentar sua eficiência de conversão. Neste trabalho é estudada a evolução da texturização de superfícies semicondutoras de InP, atacadas fotoeletroquimicamente, utilizando as medidas do espectro angular de espalhamento. Nossas medidas mostraram que existe um comportamento bastante anisotrópico no espectro angular de espalhamento, com o aparecimento de direções onde a luz espalhada é mais intensa. É discutida a relação dessas medidas com a estrutura gravada, assim como o aparecimento de planos preferenciais de ataque que resultam em estruturas piramidais.

Campo e Potencial Elétrico em Geometrias

Pontiagudas

COSTA, P. M.

UFBA

ANDION, N. P.; CASTILHO, C. M. C. DE

UFBA

A determinação do campo elétrico e do potencial na vizinhança de pontas extremamente pontiagudas (whiskers) é importante para a discussão e análise dos resultados da operação de vários instrumentos de importância em Física de Superfícies: Scanning Tunnelling Microscope (STM), Field Ion Microscope (FIM), Field Emission Microscope (FEM), Atomic Force Microscope (AFM); além de dispositivos vários em escala nanométrica e destinados a mapeamento (scanning devices). Um fator de importância experimental é a razão entre a intensidade do campo num ponto da superfície e o potencial elétrico, o denominado fator β .

Discutiremos assim a solução da equação de Laplace na vizinhança de geometrias como hiperbolóides de duas folhas, parabolóides elípticos e elipsóides, entre outras. Como será mostrado, o emprego de sistemas de coordenadas escolhidos de acordo com a simetria específica simplifica sobremaneira a solução, conduzindo até mesmo à redução a um no número de coordenadas necessárias. A longo prazo pretende-se determinar as modificações necessárias à inclusão do potencial imagem, situação de particular interesse nas condições de tunelamento de elétrons em alguns dos dispositivos acima mencionados.

DETERMINAÇÃO DA ESPESSURA DE FILMES DE ALUMÍNIO UTILIZANDO-SE MÉTODOS NÃO DESTRUTIVOS

LEME, D. G.; MITANI, S. E.; SALVADOR, V. L. R.;

SATO, I. M.

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

Filmes de alumínio são geralmente depositados em espelhos ópticos que necessitam alta refletividade na região do visível e infra-vermelho. A deposição destes filmes é feita utilizando-se a técnica de aquecimento resistivo em alto vácuo, onde o material a ser evaporado é colocado sob uma resistência de tungstênio e o conjunto aquecido pela passagem de corrente elétrica. A espessura do filme durante a deposição é controlada pela medida da variação de frequência de um cristal oscilador instalado na evaporadora. O objetivo deste trabalho é apresentar um método absoluto para determinação da espessura destes filmes de alumínio por fluorescência de raios-X, em que foi determinado o coeficiente de absorção de massa para os filmes de Al depositados em vidro, no seu respectivo comprimento de onda efetivo. Esta técnica tem sido empregada com muita frequência, devido a sua alta sensibilidade e caráter não destrutivo nas amostras. Os resultados foram reprodutíveis em filmes de 10 a 400 nm analisados.

MODELO PRÉ-IMPACTO PARA EMISSÃO IÔNICA DE SUPERFÍCIES: UMA EXTENSÃO DO MODELO DE EJEÇÃO POTENCIAL DE ELÉTRONS

SILVEIRA, E. F. DA; MATOS, M.
Departamento de Física, PUC-Rio

Apresentamos um modelo teórico de emissão iônica de uma superfície sob bombardeio de íons. Este modelo é uma extensão do modelo de ejeção potencial de elétrons, proposto por Hagstrum^a e desenvolvido recentemente por outros autores^b. Supomos que a emissão de espécies ionizadas é deflagrada pelo campo elétrico do projétil antes do impacto com a superfície. O projétil ioniza a molécula adsorvida que se dissocia, provocando a emissão secundária. O modelo prevê uma de-

pendência $(q/W)^3/v$ onde q é a carga do projétil, W é a função trabalho do alvo e v é a velocidade do projétil.

^aH. Hagstrum, Phys. Rev. **89** (1953) 244

^bJ. Burgdörfer, P. Lerner, F. Meyer, Phys. Rev. (1991) and K.J. Snowdon, Nucl. Instr. Meth. **B34** (1988) 309

Holografia de Elétrons: Física Básica e Tecnologia

GONÇALVES, M. A. M. S.; CASTILHO, C. M. C. DE
UFBa

O princípio da Holografia foi proposto por Gabor em 1948, para se compensar opticamente aberrações esféricas das lentes eletrônicas, reconstruindo opticamente as imagens de hologramas produzidos por feixes de elétrons. Este princípio visa superar os limites impostos à resolução dos microscópios eletrônicos (Gabor, 1949, 1951). Os primeiros experimentos de holografia de elétrons não apresentavam imagens de qualidade devido à necessidade de um feixe coerente de radiação. As primeiras imagens de qualidade foram obtidas, utilizando lasers como fonte coerente, portanto, holografia óptica. Posteriormente, se pode demonstrar ser factível a holografia de elétrons em microscopia eletrônica, microscopia eletrônica de fotoemissão e microscopia eletrônica de projeção.

Apresentaremos então os princípios sobre os quais se baseia a holografia de elétrons e a grande riqueza de fenômenos físicos relacionados, sua importância na formação das imagens e dificuldade de tratamento teórico. Neste contexto serão discutidos o efeito Aharonov-Bohm, o espalhamento múltiplo de elétrons, e a "qualidade" do feixe de partículas.

CONFERÊNCIAS

Palestras Vespertinas - A - 19/05/93

Giant magneto-transport in granular magnetic systems

CHIEN, C. L.

The Johns Hopkins University, Baltimore, Maryland 21218 USA

Giant magneto-resistance (GMR), first realized in magnetic multilayers with antiferromagnetic alignment, has attracted a great deal of attention due to the intriguing physics and the potential applications in magnetoresistive devices. Recently, GMR has been observed in granular magnetic solids consisting of small ferromagnetic single-domain particles embedded in an immiscible metallic medium. Examples include granular Fe, Co, Ni, and permalloy in Cu or Ag. Values of $\Delta\rho/\rho = [\rho(0) - \rho(H_s)]/\rho(H_s)$ as much as 85% at 5 K and 35% at room temperature have been observed. These values are more than an order of magnitude larger than those of ordinary MR materials (e.g. permalloy). These results show that the multilayer structure and the interlayer antiferromagnetic coupling with which GMR was first observed, are not prerequisite for the observation of GMR. For the investigation of GMR, it is imperative that the absolute resistivity be measured in several field orientations with respect to the current. We show that the GMR in granular solids is isotropic and directly proportional to $\rho_m[1 - F(M/M_s)]$, where ρ_m depends on the density and size of the ferromagnetic particles, F is an even function of (M/M_s) , M is the global magnetization and M_s the saturation magnetization. To further explore the intriguing magneto-transport properties, we have recently measured other transport properties, including extraordinary Hall resistivity and giant magneto-thermal conductivity. These unusual transport properties suggest that granular magnetic solids may not be conventional electron systems.

Magnetic Behavior of Isolated 3d and 4d Ions Implanted into Metals and Semiconductors

RIEGEL, D.

Hahn-Meitner-Institut Berlin GmbH, Glienicke Str. 100, 1000 Berlin 39

Usually, the occurrence of magnetism of 3d, 4d and 5d ions in solids is restricted to certain 3d ions (Cr, Mn, Fe, Co, Ni) in alloying metallic systems and to Ti, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu ions in semiconductors and insulators. The application of heavy ion reactions, recoil implantation, and spin rotation methods (TDPAD) allows the production and investigation of new magnetic systems. Of special importance are non-alloying systems, which can exhibit extreme variations of e.g. density of states and atomic volumes of the probe-host combinations produced by recoil implantation. The recent developments in this field include: (i) the observation of magnetic Sc ions in metallic hosts, (ii) the finding of ionic-type (including LS-coupling) magnetism for Fe ions in sp metals /1/, (iii) the observation of large local magnetic moments (25, μ_B) for 4d ions in metals /2/, and (iv) the finding of strongly magnetic 4d ions in semiconductors. The methods used are also well suited to measure the magnetic response of d ions as a function of the host matrix, e.g. in elements. Such experiments yield new insight into the local magnetic moment formation of d-atoms in metals. Some of the most essential features are: The magnetism and electronic structure of 3d and 4d ions in metals exhibit qualitative differences in sp metal hosts compared to hosts with d band electrons. 3d and 4d ion in sp metal hosts, in particular in alkali metals, reflect the phenomena of well-defined ionic ground states, large orbital magnetism, mixed valence, and crystal field splittings smaller than the LS coupling. Magnetic 3d and 4d states in sp metals cannot be described by one-electron approaches based on Anderson type models but require an analysis based on ionic configurations where the tendencies towards reduced magnetism can well be reproduced by increasing spin fluctuation rates. The behavior of d ions in sp metals exhibit basic common features to the physics of stable and unstable f states in metals. In contrast, the local moment for formation of Fe, Co and Ni ions in transition metal hosts, in Cu, Ag, Au, and even in Hg is governed by inter-atomic interactions of the magnetic d states with host d band electrons. Large parts of the experimental results agree with recent theoretical predictions. Any solid state application using implanted nuclear probes requires the investigation of the lattice site of the implanted ion. Many TDPAD- and Mossbauer experiments induce the following picture for Fe ions implanted into metallic elements: In alloying systems, Fe practically occupies substitutional sites, only. In nonalloying systems, Fe ions usually occupy substitutional and interstitial lattice sites with - depending on the host matrix - strongly different lattice site distributions. These surprisingly clear features offer the chance for aimed studies of magnetism and electronic structure for the substitutional as well as for the interstitial lattice sites. The new finding of magnetic

4d ions in semiconductors, e.g. Mo and Ru ions in CdTe single crystals induce new questions, like: Which other 4d ions are magnetic in which other semiconductors? Can one apply classical methods like EPR for studying the magnetic response of 4d ions in semiconductors? Can one find magnetic 5d ions in semiconductors?

For recent reviews see:

/1/ D. Riegel and K.D. Gross, *Physical* **B163** (1990) 678

/2/ D. Riegel, *Hyperfine Interactions*, in press

Palestras Vespertinas - B - 19/05/93

METAESTABILIDADE INDUZIDA POR DEFEITOS $s^n p^m$ EM SEMICONDUCTORES III-V: UM COMPORTAMENTO UNIVERSAL!

FAZZIO, A.

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

Nesta palestra discutiremos alguns dos resultados teóricos sobre a estabilidade estrutural de defeitos em semicondutores, obtidos recentemente em nosso grupo. Em particular, mostraremos como se comportam as impurezas com configuração de valências $s^n p^m$ em semicondutores do tipo III-V, quando inicialmente são introduzidas substitucionalmente na rede cristalina.

Nossos cálculos foram realizados usando uma célula unitária de 54-átomos, na aproximação da Densidade Local, com pseudopotencial não-local ab-initio até $I=2$ e expansão em ondas planas até energias de 12 Ry. O esquema para obtenção da convergência é alcançado através do algoritmo de Car-Parrinello.

A apresentação terá na primeira parte um breve relato do atual estado da arte para o estudo teórico de propriedades eletrônicas de defeitos em semicondutores. Na segunda parte discutiremos resultados recentes em semicondutores III-V dopados com impurezas que potencialmente podem produzir centros tipo-DX e tipo-EL2. Por exemplo mostraremos o comportamento de Ge em GaAs sob pressão hidrostática, discutimos a preferência do C em ocupar o sítio do As em GaAs, o comportamento do anti-sítio de ânion em GaP e GaAs, etc. Na terceira parte procuraremos traçar um comportamento universal para todas impurezas do tipo $s^n p^m$, procurando explicar a metaestabilidade desses defeitos.

Colaboradores: Profa. Marília Junqueira Caldas, Pedro Paulo Venezuela (bolsista FAPESP), Tomé M. Schmidt (bolsista FAPESP).

Strain relaxation mechanisms in SiGe thin films grown on Si(001) substrates

LEGOUES, F. K.

** IBM Research Division, T.J. Watson Research Center, Yorktown Heights, New York 10598, USA*

The growth and properties of SiGe thin films on Si substrates have been studied extensively in recent years. This is because the addition of Ge makes it possible to attain electronic properties, such as band gap and mobility, that cannot be obtained in pure Si. Thus, the advent of "heteroepitaxy" may significantly extend the use of Si technology, toward applications that were once only achievable using III-V materials. One of the main stumbling blocks for Si/Ge heteroepitaxy is the fact that Ge and Si have significantly different lattice parameters, resulting in strain in the SiGe films. For most applications, this strain has to be relieved, generally by the introduction of dislocations. In this talk, I will discuss the nucleation and motion of dislocations, both during growth and during ex-situ anneal, as studied by transmission electron microscopy and X-ray diffraction. The final microstructure of the relaxed film is closely related to the mode of relaxation, i.e. whether it is controlled by the glide of dislocations, or by their nucleation. I will show that it is possible to switch from one mode to the other by modifying the growth conditions, and demonstrate that the nucleation controlled mode results in much improved microstructure. The different nucleation mechanisms will be discussed, with particular attention being paid to the recently reported "modified Frank-Read mechanism" (MFR). In this case, I will show that it is possible to affect the relative nucleation of the different type of dislocations by growing on wafers that are slightly miscut from the exact (001) orientation. This provides a unique probe into the energy barrier to nucleation. The activation energy for nucleation of dislocations by the MFR mechanism has thus been experimentally determined to be about 5eV, explaining the controlling role played by nucleation in this case.

*Palestras Vespertinas - C - 19/05/93***Bound States in Moving Flux Lines**CHOI¹, C. H.; HOFFMANN², V.; RAINER², D.¹Seoul National University, Korea, ²University of Bayreuth, Germany

In 1964 Caroli, deGennes and Matricon predicted the existence of electronic bound states in the core of flux lines. These states with energies below the bulk energy gap are bound via multiple Andreev reflection and differ substantially from regular bound states in a potential well. Bound electrons in flux lines can carry a current, can be accelerated in an electric field, and react sensitively to impurities, supercurrents, and flux line motion. What is usually referred to as the "normal core" of a flux line is, more precisely, the ensemble of electrons trapped in bound states. For clean superconductors ($\ell \gg \xi$) the physical properties of these trapped electrons are strongly affected by the superconducting environment, and differ significantly from that of normal electrons. We discuss bound states in the core of pancake vortices in high- T_c superconductors. We present results of our calculations of the spectrum of bound states, and how it is affected by scattering processes, a finite vortex velocity, and supercurrents. In addition we calculate electromagnetic absorption by these bound states and their contribution to flux-flow resistance.

Andreev scattering: a new basis for superconductive electronics

NICOLSKY, R.

Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro

The superconductor-normal metal interface is revisited and the peculiar Andreev scattering mechanism is explained. It is shown that in the SNS (superconductor-normal metal-superconductor) junction this mechanism, instead of tunneling, is responsible for the superconducting current, i.e., the DC Josephson effect. In the presence of an applied voltage, the total current oscillates (AC Josephson effect) and the time average current-voltage characteristics of the SNS systems is explained in a recent theory¹, which predicts a negative-differential-resistance (NDR) effect in the low voltage range, for temperatures sufficiently far from T_c and a large enough mean free path in the normal metal. This effect is explained as a competition between the increase of current with voltage and the consequent suppression of the last Andreev reflections. The NDR effect has been verified in a recent experiment, carried out with conventional superconductors, which also shows that it is stable and can be used to generate non-Josephson oscillations in the microwave range². This NDR effect is the basis for a new superconducting electronics, the proposed Andreev-reflection electronics³, which uses metallic Josephson junctions, instead of tunneling junctions. The real possibility of applications of this new electronics is discussed as is the use of the high- T_c copper oxide superconductors at 77K. It is worth noting that in such an electronics the Josephson oscillations are an intrinsic noise!

1. R. Kümmel, U. Günsenheimer & R. Nicolsky, *Phys. Rev.* **B42**, 3992 (1990).2. H. Ohta & T. Matsui, *Physica* **C189**, 2581 (1991).3. A. M. Luiz & R. Nicolsky, *IEEE Tans. on Magn.* **MAG27**, 2712 (1991).*Palestras Vespertinas - D - 19/05/93***Advances in high average power molecular lasers**

HALL, D. R.; BAKER, H. J.

Optoelectronics and Laser Engineering, Departement of Physics, Heriot-Watt University

High average power carbon dioxide lasers continue to play a dominant role in industrial applications such as material processing. The majority of lasers used in such applications have, for more than a decade, depended upon designs which employ some form of high speed convective flow to provide the necessary cooling of the laser medium. Recently, improvements in the understanding of the physics of transverse radiofrequency gas discharges, coupled with advances in related RF technologies has made possible the development of a new class of high average power lasers, which potentially offers major advantages in terms of small size, reliability and lower costs. Such

devices, although operating at very high discharge power densities, employ geometric configurations, facilitated by the transverse RF excitation technique, which nevertheless allow gas cooling by diffusion in static gas. Moreover, these lasers are characterised by a regime of power scaling which depends on the *area* of the gain medium, rather than the usual case where power scaling is length-dependent.

In this paper, the technique of transverse radiofrequency discharge excitation will be reviewed as it applies to the carbon dioxide and carbon monoxide molecular lasers, with particular emphasis on the achievement of stable and uniform alpha discharges at high power densities. The application of such discharges to large area discharges and waveguide slab laser power scaling, and also to the excitation of multi-element waveguide lasers in linear and two-dimensional array formats will be discussed. The achievement of beams of high quality is a high priority requirement for most applications, an objective which is more complex than usual because of the unusual geometry of the gain medium. The beam quality issue has been successfully addressed in waveguide slab lasers by the use of a number of cavity configurations, including hybrid waveguide-unstable and mode-selective all-waveguide resonators, whose properties will be discussed in terms of lasers at power levels in the range from a few hundred watts to 1 kilowatt. In addition, experiments will be described which demonstrate the achievement of coherent coupling (phaselocking) of multiple elements in linear waveguide laser arrays, and the achievement of kilowatt laser powers in incoherent 2-D arrays.

INTRINSIC FIBRE OPTIC SENSORS FOR PHYSICAL AND CHEMICAL MEASUREMENTS

CULSHAW, B.

Department of Electronic and Electrical Engineering, University of Strathclyde

An intrinsic fibre optic sensor is one in which the parameter to be measured (the measurand) operates directly on the propagation characteristics of the light whilst it is guided within the fibre. These sensors have been used to arrive at both integrated values of the measurand along the entire sensing length and for distributed measurements where the measurand is evaluated as a function of position along the fibre. The applications of these sensor systems include fibre optic hydrophones and gyroscopes where intrinsic sensing is used to measure a particular localised parameter and in wide area monitoring for structural assessment, measurement of the extent and the position of chemical spillages and leaks within an operating area, fire warning systems and similar safety and surveillance related operations.

To date three parameters have been used as indicators of the influence of the measurand on propagation characteristics. These are:

- changes in *length* of the fibre usually monitored via optical or sub carrier phase modulation
- changes in optical attenuation interrogated either as integrated measurements by measuring the output power at the end of the fibre or as distributed measurements by monitoring backscatter signals
- modifications to the non-linear coupling co-efficients especially the Kerr constant coupled with phase changes to produce frequency domain representations of the measurand.

The paper will examine each of these modulation mechanisms in detail in order to assess their relative advantages and the maturity of the approaches to implementing measurements using a particular technique. Additionally the impact of recent research into all fibre sources and in fibre grating fabrication on available systems and system architectures will be evaluated.

The paper will then review a number of applications including

- evaluation of strain and temperature distributions for structural monitoring applications and in particular the problems associated with deconvolving strain and temperature signals
- the measurement of dynamic strain as a function of position again for structural monitoring
- the distributed measurement of methane gas concentrations using evanescent field coupling techniques
- the principles of intensity modulation using micro bend transducers and their applications for measuring strain and temperature (including fire hazards) and moisture distributions
- the use of in fibre (Bragg) gratings as individual sensor elements and as demarcation elements within a sensor array
- experimental results on laboratory demonstrations of non-linear phenomena for fibre optic sensing.

The paper will conclude by overviewing current research activities in intrinsic sensing systems highlighting applications issues such as sensitivity, repeatability and stability and indicating the approaches currently being investigated to optimise system potential. These approaches range from the use of new faster, more powerful optical sources through increasingly complex grating structures within the fibre to the use of special fibres and special coatings to optimise the interaction between the measurand and the propagation characteristics of light within the fibre.

*Palestras Vespertinas - A - 20/05/93***Magnetic phase diagrams of the high-temperature superconductors**

FISHER, M. P. A.

IBM Research, T.J. Watson Research Cent.

Soon after the discovery of the high-temperature cuprate superconductors in 1986, it became clear that their behavior in magnetic field was strikingly different from previous low temperature superconductors. In strong magnetic fields the cuprates typically exhibit large resistive tails down to temperatures much below their zero field transition temperature, due to motion of magnetic vortices. It was apparent that the "standard" picture of the mixed state of such type II superconductors was in need of drastic revision. In this talk I will summarize some of the recent and substantial progress made in sorting out the appropriate magnetic phase diagram, emphasizing the central role played by both thermal fluctuations and material impurities. A key realization was that crystal imperfections could be so effective at immobilizing the magnetic vortices, as to freeze them into a new phase of matter - the "vortex-glass" phase. In contrast to the the standard "flux-creep" theories, the vortex-glass was predicted to be a truly superconducting phase, with strictly zero linear resistance. The most recent experimental and theoretical evidence in support of this vortex-glass phase will be described in some detail. In striking contrast to the bulk of the experiments which show a continuous transition into the vortex-glass phase, very recent experiments on clean, untwinned single crystals exhibit a very abrupt, apparently first order, transition upon cooling in magnetic field. It will be argued that this abrupt transition is a remnant of the Abrikosov vortex-lattice melting transition expected in a material completely free of any imperfections! Several possible magnetic phase diagrams consistent with these most recent experiments will be summarized.

Excitações topológicas em sistemas magnéticos bidimensionais

PIRES, A. S. T.

Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Física

Sistemas bidimensionais com simetria $SO(2)$ tais como um ferromagneto XY, ou um superfluido, exibem uma transição de fase em uma temperatura finita sem a ordem de longo alcance convencional: esta transição é de origem topológica no sentido de que seu ingrediente essencial é um vórtice, uma estrutura topologicamente estável. Os vórtices podem ser gerados livremente em temperaturas mais altas do que uma certa temperatura crítica, a chamada temperatura de Kosterlitz-Thouless T_{kt} , enquanto que eles existem somente como pares ligados (vórtices-antivórtices) em temperaturas mais baixas, dando origem assim a uma transição bem definida de desligamento de vórtices em $T = T_{kt}$. Abaixo de T_{kt} a interação efetiva entre vórtices depende logarithmicamente da distância, enquanto que acima de T_{kt} ela é de curto alcance devido a blindagem por vórtices livres.

Nesta palestra faremos uma revisão de modelos ferromagnéticos bidimensionais, do ponto de vista fenomenológico, em sua conexão com flutuações de vórtices. A imagem de desligamento de pares vórtices-antivórtices será usada para elucidar algumas propriedades essenciais do modelo. A analogia vórtice-carga no gás de Coulomb bidimensional será analisada. As propriedades dinâmicas de excitações de spins, correspondentes a dinâmica de vórtices serão discutidas e relacionadas com experimentos e resultados de simulação numérica. A conexão entre o modelo XY bidimensional e supercondutores de alta temperatura de transição será esboçada.

*Palestras Vespertinas - B - 20/05/93***QUASI-SPHERICAL GRAPHITIC ONIONS: A NEW FULLERENE RELATED STRUCTURE**

UGARTE, D.

Institut de Physique Experimentale, Ecole Polytechnique Federale Lausanne, 1015 Lausanne, Switzerland

Fullerenes, nanotubes or graphitic onions, are usually produced in arc-discharge experiments, where these particles grow by accretion from carbon vapor. Nevertheless, the formation of curved and closed graphitic sheets can also be induced, in the condensed phase, by strong bombardment of carbonaceous soot with high energy electrons. This method produces shelled graphitic particles with a remarkable spherical shape. Here, we present a high resolution electron microscopy study of fullerene related structures. In particular, we examine the formation of quasi-spherical onion-like particles by electron irradiation in situ. This fact allows us to follow the formation process with atomic resolution. The relation between irradiation induced graphitization and fullerene growth is discussed.

Surface Structure, Electronic Properties, and Chemistry on MBE Grown GaAs(001) Studied by Scanning Tunneling Microscopy

PASHLEY, M. D.

Philips Laboratories, North American Philips Corporation, Briarcliff Manor, NY 10510

The Scanning Tunneling Microscope (STM) provides new opportunities for studying Molecular Beam Epitaxy (MBE) growth of compound semiconductors. In this talk I will describe STM studies of the GaAs(001) surface where the samples are grown in situ by MBE. This will include the surface structure, origin of Fermi-level pinning on the GaAs(001) surface and show the complex chemistry involved in the deposition of a group VI element on the GaAs(001) surface.

Under normal arsenic-rich growth conditions, the surface forms a (2x4) surface reconstruction. This reconstruction has been imaged by STM and found to arise from the formation of arsenic dimers giving the 2x periodicity, with a regular array of dimer-vacancies leading to the 4x periodicity.

The STM has made it possible to identify the surface structural defects that are responsible for Fermi-level pinning on the n-type GaAs(001) surface. These defects are kinks in the dimer-vacancy rows of the (2x4) surface reconstruction. These kinks are found to be surface acceptors with approximately one electron per kink. The kinks form in exactly the required number to pin the Fermi-level of n-type GaAs(001) at an acceptor level close to mid gap, irrespective of doping level. The Fermi-level position is confirmed with tunneling spectroscopy.

I will also present the results of recent STM studies of the deposition of a group VI element, selenium, on the GaAs(001) surface. Under appropriate deposition conditions, a very well ordered (2x1) surface structure is formed. The reaction between Se and the GaAs surface can be followed as a function of Se coverage, and appears to involve the displacement of surface arsenic.

*Palestras Vespertinas - C - 20/05/93***The Transformation of Resin to Carbon induced by Heat and by Irradiation**

JENKINS, G. M.

Alabama A&M University, U.S.A.

We specialize in producing polymeric glassy carbon ware from phenolic resin preforms made by a new spray process in addition to standard molding procedure. Using Raman spectroscopy and electrical conductivity, we have studied the thermally induced transformation of the resin insulator to a glassy carbon without disruption at 800K. Using an accelerator we have used Rutherford Back Scattering and other Beam Analyses to identify trace components and impurities which have a large effect on chemical behaviour. Heat-treatments to 3300K are used to remove impurities and anneal internal strains. The use of such ware for growing crystals of the tellurides will be discussed.

We induce local carbonization by bombardment of the cured resin with various ions, also in our accelerator; alphas are shown to be particularly effective. Again structural and physical changes are followed and compared with those induced thermally. Using fine focussing and varying energy, it is possible to form channels of conducting material

at various selected depths beneath the resin surface without disrupting the resin. It is also possible to pretreat the resin to make sensitive to small fluences of disruptive ions. The application of this to microcircuitry is discussed. We compare the effect of ion bombardment on the resin precursor with that on fully formed carbon.

Conducting Polymers: the promise of the 1970's is reality in 1992

HEEGER, A. J.

Institute for Polymers and Organic Solids, University of California at Santa Barbara and UNIAX Corporation

The "current status" of conducting polymers will be reviewed with a focus on recent progress which demonstrates that the initial promise of the late 1970's has become reality in 1992. Conducting polymers are now available as materials with truly unique properties: the important electronic and optical properties of semiconductors and metals *in combination with* the attractive mechanical properties and the processing advantages of polymers. The field has progressed to a level of maturity consistent with a new set of opportunities — opportunities to develop a wide range of applications based upon *conducting polymers as materials for industrial products*. In parallel with the remarkable progress in conducting polymers as materials for a wide range of applications, there has been equally important progress toward a deeper understanding of the quantum chemistry and physics of the π -electrons in conjugated polymers and of the importance of the coupling of the π -electrons to distortions of the polymer backbone.

Palestras Vespertinas - D - 20/05/93

Structural analysis of the lyotropic polymorphism of deoxyguanosine derivatives

MORAIS, M. M. D.; MARIANI, P.

Istituto di Scienze Fisiche, Università di Ancona

GARBESI, A.

I.Co.C.E.A.-CNR - Bologna, Italy

GOTTARELLI, G.; SPADA, G. P.

Dipartimento di Chimica Organica, Università di Bologna, Bologna, Italy

We recently reported that a series of oligodeoxyguanylates are able to self-associate to form lyotropic liquid crystalline phases. In particular, cholesteric and hexagonal columnar mesophases have been observed as a function of water concentration in the nucleotide 2'-deoxyguanosine 5'-monophosphate d(pG). The same phase were also detected in the deoxyguanosine "dimer" d(GpG), the "trimer" d(GpGpG), the "tetramer" d(GpGpGpG) and the "esamer" d(GpGpGpGpGpG). The building block of these liquid crystalline phases is a rod-shaped chiral aggregate composed of a stacked array of planar tetramers, formed by Hoogsteen-bonded guanosine moieties. Discrete four-stranded aggregates were also observed in isotropic solutions by small-angle neutron scattering experiments. The analysis has been then extended to other deoxyguanosines monophosphates: by using optical microscopy, circular dichroism and X-ray diffraction techniques, we analysed the more complex columnar polymorphism of two other derivatives of 2'-deoxyguanosine, the 3'-monophosphate d(Gp) and the 3'-monophosphate monoisobutyl ester d(Gp)iBu. As a function of water concentration, both compounds exhibit four different columnar phases: in addition to the well known cholesteric and hexagonal phases, a 2-dimensional square lattice and a new hexagonal packing have been observed. In such a structure, two columns are packed in the 3m special positions of co-ordinates 1/3, 2/3 and 2/3, 1/3 of the two-dimensional hexagonal unit cell. The unusual phase sequence has been related to the presence of strong short-range intercolumnar interactions.

1. G.P. Spada, A. Carcuro, F.P. Colonna, A. Garbesi, G. Gottarelli, *Liq. Cryst.*, **3**, 651 (1988).
2. P. Mariani, C. Mazabard, A. Garbesi, G.P. Spada, *J. Am. Chem. Soc.*, **111**, 6369 (1989).
3. S. Bonazzi, M. Capobianco, M.M. De Morais, A. Garbesi, G. Gottarelli, P. Mariano, M.G. Ponzi Bossi, G.P. Spada, L. Tondelli, *J. Am. Chem. Soc.*, **113**, 5809 (1992).

Magnetic Properties of Metal Amino Acid Compounds.¹

CALVO, R.

INTEC (CONICET) and Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas (UNL), Santa Fe, Argentina

We review studies on the magnetic interactions and properties of a wide group of metal-amino acid complexes. This line of research is motivated by the value of these compounds as model systems for exchange interactions in metalloproteins, and by the intrinsic interest on their magnetic behavior. We will discuss mainly properties of Cu(II) complexes and describe comparatively results obtained by electron paramagnetic resonance (EPR) and in measurements of the specific heat [C_m], the magnetization [M], the magnetic susceptibility [χ] and in structural determinations with X-rays. We have studied complexes with structures of the molecular type, where the Cu(II) ions form molecules type Cu(aa)₂, with two amino acids (aa), and in complexes of the polymeric type, with chains Cu-aa-Cu-aa-Cu-aa-Cu. EPR in the paramagnetic phase of single crystal samples allows to study the spin dynamics. The variation with magnetic field direction of single crystal EPR spectra can be related to the magnitude of the exchange interactions within copper spins and the changes of the dimensionality of their dynamics. By this method the exchange coupling between coppers connected by superexchange bridges of up to five diamagnetic atoms have been obtained from EPR data at room temperature. Measurements of the dependence with temperature (T) and field (H) of M(H,T), and with T of $\chi(T)$ and $C_m(T)$ at very low temperatures allowed us to model the magnetic behavior of several compounds. Short range magnetic order at T about 1K has been observed in compounds with copper ions in chains, with $\chi(T)$ and $C_m(T)$ following a characteristic behavior. Transitions to phases with long range magnetic order have been observed. We will analyze the magnetic behavior of the compounds and discuss the correlations observed between the magnitudes of the exchange interactions and their molecular structures. The usefulness of this information for the magnetic characterization of proteins will be discussed.

¹Work supported by CONICET and by Fundación Antorchas of Argentina.

Palestras Vespertinas - A - 21/05/93

Magnetic fluctuations in superconductors

AEPPLI, G.

AT&T Bell Laboratories, Murray Hill

The electron pairing in superconductors has significant consequences for magnetic correlations, which can be measured directly by neutron scattering. This talk reviews what has been learned from such measurements on superconductors ranging from A15 compounds to cuprates. We describe a series of experiments, starting with an explicit demonstration, made more than a quarter century ago using polarized neutron diffraction, that pairing eliminates the spin but not the orbital component of the magnetic susceptibility in V_3Si . However, our main topic will be more recent inelastic measurements which address the momentum and frequency dependence of the gap function in the high T_c material, $La_{2-x}Sr_xCuO_4$. Its energy and wavevector resolution together with its weak-coupling nature make neutron scattering an excellent probe of the nature of the states with energies below the nominal gap of this material. Finally, we show recent data on $YCu_2O_3O_7$ which reveal the effect of superconductivity on a resonance, with frequency above the depairing energy, derived from the magnetic interaction between planes forming CuO_2 bilayers in this material.

The Search for Superconductors with Higher T_c 's

CHU, C. W.

Department of Physics and Texas Center for Superconductivity at the University of Houston, Houston

At present, there exists neither theoretical nor experimental evidence to prevent us from achieving superconductivity at a temperature higher than $\sim 125K$, the current record transition temperature (T_c). We believe that more superconductors with higher T_c 's than exist now may be achieved, if the physical and chemical instabilities of certain compounds can be arrested, since these instabilities are usually present in compounds with strong superconducting interaction and compete against superconductivity. These instabilities include the formation of charge-density waves (e.g. in transition-metal dichalcogenides) or spin-density waves (e.g. in organic charge-transfer salts); the

occurrence of a metal-insulator transition (e.g. in doped tungsten bronzes), a magnetic ordering (e.g. in ternary rare-earth borides), or a structural transformation (e.g. in V-Ru compounds); the failure to achieve a perfect chemical stoichiometry, and thus the presence of defects (e.g. in Nb_3Ge); or the collapse of a crystal structure which favors a strong superconducting interaction (e.g. in Bi-Pb alloys). Some of these instabilities have manifested themselves in the newly discovered high-temperature superconductors (HTS's): cuprates, bismuthates, and fullerides. We have examined the correlation of structural and electronic instabilities with high-temperature superconductivity by examining the effects of high-pressure and doping on T_c on the $\text{R}\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, doped- $\text{R}\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, and doped- $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$. Based on these and other published results, we concluded that the maximum T_c for the layered cuprates may lie in the regions of 150 ~ 180K and that a $T_c > 150$ to 180 K may only be found in novel systems different from the layered cuprates. A few approaches will be proposed and several promising candidates are selected for possible higher T_c 's. They will be discussed in conjunction with our experimental data following a brief summary of the past and current status in the search for high temperature superconductors.

Palestra Vespertina - B - 21/05/93

NON LINEAR OPTICS IN ORGANIC CRYSTALS

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

Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará

Technological improvements during seventies made possible the use of light, first in telecommunication and also in many other fields as for example defense, informatics, medicine, entertainment. This new technology leads to innovative features in many human activities and stimulates constantly updated improvements. Volume and speed of transmitted information are examples of parameters under constant new challenge requirements, for which, traditional electronic devices have well known limitations. Further, optical materials, under research, have shown promising optical properties (linear and non-linear) for manipulation of light using electrical or all-optical means. Technological needs for the future point toward all-optical manipulation of light and features as wavelength shift by optical mixing. In this case NLO effects are of prime importance.

Showing large NLO properties, organics are for long a promising candidate for practical applications. Most of the effort in researching organics is devoted to optimize crystal quality, structural, mechanical, thermal and optical (linear and non-linear) properties. Other active area is that of crystal processing techniques, aiming the manufacturing of waveguides and other important components of optical devices for their application in Integrated Optics. Organic materials may be classified in two groups, namely, polymers and crystalline materials. They are competitors for practical applications. The use of polymers for waveguide formation and for all-optical signal processing is in advance than crystalline organics. However, for SHG (Second Harmonic Generation) bulk crystals are mainly chosen by researchers.

Following this technological tendency, the Applied Physics Group (APG) of the Department of Physics of the Federal University of Ceará begun, two years ago, a program for growing organic crystals, namely, aminoacids. These materials have been extensively studied in liquid solutions, or in powder form, due to biological scientific interest. In crystalline state, however, much still must be done. The program was initially dedicated to develop the crystal growth technology of many aminoacids (alanine, treonine, lisine, glutamic acid, etc.). Using slow evaporation method, this growth was well succeeded and now the effort is dedicated to two main activities. One is the study of structural, electrical and optical properties and the other is the development of new crystal growth methods and processing substrate techniques. Some aminoacids, as alanine and treonine, are being studied. In this lecture recent results obtained with alanine will be presented and discussed.

Alanine crystallizes in an orthorhombic noncentrosymmetrical crystalline system with P212121 (or D2) spatial group. Each unit cell has four molecules located at C1(4) sites. Alanine is a birefringent material and their refractive index, measured with Sodium D-line, are $N_1=1.478+0.002$, $N_2=1.678+0.002$, $N_3=?$. In the range of 1.6 mm up to 0.5 mm, alanine crystals show optical attenuation less than 0.5 dB/cm. They also exhibit optical-acoustic and SHG effects. However, up to now, no optical Pockels effect was observed. No success, for polarizing the crystals, was achieved applying electrical field under high temperature conditions. The SHG occurs for a phase matching angle of 10 degrees, relative to z axis, and with an angular acceptance of 0.5 degree. The efficiency of SHG, with a crystal 4 mm thick was 0.4% under 45 MW/cm and the measurements on its dependence on light polarization are not concluded. The SHG is observed in the range of 1.06 up to 1.22 mm. The optical damage threshold is in the range of 50 to 100 MW/cm. All these measurements were made at room temperature and are in progress with other aminoacids.

This work was developed in cooperation with researchers of CPqD, IPEN and IFQSC.

Palestra Vespertina - C - 21/05/93

SIMETRIAS NÃO-EUCLIDIANAS NA MATÉRIA CONDENSADA

MORAES, F.

Departamento de Física - UFPE

A identificação e o uso das simetrias de um problema físico é de fundamental importância para a sua solução. Talvez a característica mais marcante de um cristal seja a sua simetria translacional. Arranjos ordenados de átomos preservam algumas das simetrias do espaço euclidiano: os grupos cristalográficos são subgrupos discretos do grupo de todas as transformações (translações, rotações e reflexões) que deixam o espaço invariante. No caso não-euclidiano, em particular nos espaços de curvatura uniforme, subgrupos discretos do grupo de simetria do espaço também podem ser associados a redes cristalinas. Tais redes não-euclidianas, aparentemente sem conexões com as redes reais, têm algo em comum com uma variedade de sistemas da matéria condensada: simetrias não-euclidianas têm sido descobertas na estrutura de certos cristais, sólidos amorfos e filmes anfífilos, em diagramas de fase do FQHE e de redes de fluxo em supercondutores, entre outros. Serão discutidos aspectos gerais da ocorrência de simetrias não-euclidianas na matéria condensada, suas implicações e sua utilização na solução de problemas específicos.

Palestra Vespertina - D - 21/05/93

DON'T FORGET THE SOLVENT-WATER IN MOLECULAR ASSEMBLY AND IN SINGLE ACTIVE MACROMOLECULES

RAND, R. P.

Department of Biological Sciences, Brock University, St. Catharines, Ontario, Canada

The solvent is usually ignored. But in aqueous systems, water molecules themselves are energetically significant constituents both of molecular assemblies, and of single functioning macromolecules. Their energetic and structural contribution can be measured and shown to be much greater than usually recognized. Osmotic stress, whereby the chemical potential of water is precisely controlled with large indifferent polymers, can be used to measure the hydration energetics in any system (Science 1992 256:618). Three different systems will be described.

Interactions between parallel phospholipid bimolecular layers of many different kinds are dominated at short range (2-3nm) by hydration repulsion, derived from the work required to dehydrate hydrophilic surfaces (review-Biochim. Biophys. Acta (1989) 998:351). Hydration repulsion at these distances appears to be universal for all large surfaces. Methylation of the surface has been one distinguishing parameter that enhances hydration repulsion, hydrogen bonding between the molecular constituents diminishes it. The physics of this repulsive force remains an enigma. Osmotic dehydration of high curvature aqueous cavities enclosed by phospholipid monolayers, the hexagonal $H_{||}$ phase, can be translated in terms of a monolayer bending modulus (Biochemistry 1990, 29:76). A neutral plane of constant molecular area has been detected within the $H_{||}$ monolayer as it is bent. Surprisingly, dehydration can yield a re-entrant $H_{||}$ -lamellar- $H_{||}$ phase transition sequence (Biochemistry 1992, 31:2856). The osmotic work required to effect these transitions are far smaller than one would estimate from the bending modulus. This paradox, combined with the mystery of an assembled structure with two very different principal radii of curvature undermines our understanding of the energetics of the $H_{||}$ phase. We have therefore studied, by X-ray diffraction, the changes in a variety of molecular dimensions that take place in the lamellar-hexagonal transition. Changes in molecular lengths and molecular areas are particularly instructive.

We have also used osmotic stress to measure water's role in single functioning macromolecules. Yeast hexokinase (HK), a protein enzyme, has a cleft whose closure is induced by glucose binding. Osmotic pressure reduces both the glucose equilibrium dissociation constant K_d and the Michaelis-Menten kinetic constant K_m for glucose. Closure is evidently aided by reducing the activity of water outside the cleft. The equilibrium and kinetic effects are quantitatively similar and the pooled data show that at least 65 ± 10 water molecules are removed as glucose binds. Water can be described as an inhibiting ligand. The number of waters suggests a large contribution by solvation to the energetics of the conformational change in enzyme catalysis.

Índice de Autores e Apresentações

M1	-	Primeiro Período da Manhã	-	Apresentações Oraís / <i>Abstracts Matutinos / Workshop</i>
M2	-	Segundo Período da Manhã	-	Apresentações Oraís
T1	-	Primeiro Período da Tarde	-	Posters
T2	-	Segundo Período da Tarde	-	Palestras Vespertinas

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Abd-Elmeguid, M. M.	19	M2	08	320	Alexandre, J. L.	21	T1	E06	342
Abud, S. A. T.	20	M1	11	95	Algarabel, P. A.	19	M2	04	214
Achete, C.	20	M2	10	337	Algarte, A. C. S.	20	T1	E07	302
Achete, C.	21	T1	E05	347	Allen, J.	21	M1	01	310
Achete, C. A.	19	M1	10	173	Almeida, A. G. de	19	T1	E08	110
Achete, C. A.	21	T1	E05	348	Almeida, C. A. de	20	T1	E04	186
Achete, C. A.	21	T1	E05	346	Almeida, D. P.	20	T1	E08	76
Acioli, L. H.	21	M2	06	259	Almeida, D. P.	20	T1	E04	188
Adorno, A. T.	21	T1	E01	239	Almeida, D. P.	20	M2	02	74
Aegerter, M. A.	20	M1	09	205	Almeida, J. C. J. de	20	M2	07	182
Aegerter, M. A.	21	M2	09	213	Almeida, J. R. L. de	21	T1	E10	169
Aegerter, M. A.	19	M2	05	334	Almeida, J. R. L. de	21	T1	E10	161
Aegerter, M. A.	19	T1	E09	204	Almeida, J. R. L. de	21	T1	E10	171
Aegerter, M. A.	19	T1	E02	249	Almeida, N. S.	20	T1	E01	226
Aegerter, M. A.	19	T1	E09	205	Almeida, N. S.	20	T1	E02	230
Aegerter, M. A.	21	M2	09	212	Almeida, N. S.	21	T1	E06	344
Aeppli, G.	21	T2	03	357	Almeida, R. M. C. de	20	T1	E03	156
Agostinho Neto, A.	21	T1	E08	102	Almeida, R. M. C. de	19	M2	03	137
Aguiar Junior, S. R.	20	T1	E13	131	Almeida, R. M. C. de	21	T1	E10	170
Aguiar, A.	19	T1	E10	322	Almeida, R. M. C. de	21	M1	03	160
Aguiar, F. M. de	21	M2	03	160	Almeida, R. M. C. de	20	T1	E03	154
Aguiar, F. M. de	21	M1	04	234	Alonso, A.	21	M2	05	289
Aguiar, J. A.	19	T1	E10	324	Alonso, R.	21	T1	E04	124
Aguiar, J. A.	19	T1	E07	179	Altmann, N.	21	M1	03	159
Aguiar, J. A.	19	M1	05	333	Altoe, M. V. P.	19	T1	E01	216
Aguiar, J. A.	19	T1	E07	177	Alvarenga, A. P. D. de	19	T1	E02	251
Aguiar, J. A.	19	T1	E10	324	Alvarez, F.	19	T1	E03	295
Aguiar, J. A.	21	M2	11	328	Alves, A. R.	20	T1	E06	305
Aguilera-Navarro, V. C.	21	T1	E13	330	Alves, A. R.	20	T1	E07	303
Aharonov, Y.	20	M1	06	252	Alves, D.	20	T1	E09	79
Aielo, O. E.	21	M2	03	160	Alves, J. L. A.	21	M2	01	312
Aihara, K.	21	M1	11	327	Alves, J. L. A.	20	T1	E06	306
Airolidi, C.	19	T1	E09	204	Alves, M. V.	20	T1	E10	256
Akcelrud, L.	20	M1	04	274	Alves, N.	19	T1	E08	107
Akcelrud, L.	21	T1	E01	239	Alves, N.	19	M2	02	268
Albano, E. V.	20	T1	E05	150	Alves, O. L.	21	T1	E02	263
Alberts, L.	20	M2	10	338	Alves, O. L.	19	T1	E02	249
Alberts, L.	21	T1	E06	341	Alves, O. L.	19	T1	E13	113
Albuquerque, A. P. R. L.	19	T1	E02	251	Alves, O. L.	21	M1	12	118
Albuquerque, D. F. de	19	T1	E04	140	Alves, O. L.	20	M2	12	118
Alcantara, A.	19	T1	E04	141	Alves, O. L.	19	T1	E13	112
Alcantara, E. F. C.	19	T1	E09	204	Alves, O. L.	19	T1	E13	115
Alcaraz, F. C.	21	T1	E11	167	Alves, O. L.	19	T1	E03	294
Alencar, J.	20	M2	07	182	Alves, O. L.	21	T1	E04	125

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Alves, Odivaldo C.	19	T1	E11	95	Araujo, C. B. de	19	T1	E02	251
Alvey, A. M.	20	T1	E04	185	Araujo, J. H. de	21	T1	E01	236
Amaral Neto, R. do	21	M1	06	257	Araujo, J. M.	19	T1	E06	271
Amaral, A. C. C. do	21	T1	E07	197	Araujo, M. T. de	20	T1	E08	78
Amaral, L.	21	T1	E05	347	Araujo, M. T. de	19	M1	07	72
Amaral, L.	19	M2	02	267	Araujo, M. T. de	19	M1	07	71
Amaral, L.	20	M2	10	337	Araujo, M. T. de	21	T1	E12	86
Amaral, L. Q.	19	M1	03	135	Araujo, R. C. de	19	T1	E01	220
Amaral, L. Q. do	20	M2	05	193	Ardisson, J. D.	21	T1	E01	239
Amaral, L. Q. do	21	T1	E01	239	Ardisson, J. D.	21	T1	E01	238
Amato, M. A.	21	T1	E07	195	Arenas, J. A.	21	T1	E04	123
Amato, M. A.	20	T1	E06	305	Arenzon, J. J.	19	M2	03	137
Amavel, A. S.	19	T1	E12	128	Arenzon, J. J.	21	T1	E10	170
Amorim, H. S. de	21	M1	10	98	Arispe, J.	20	T1	E01	224
Anazawa, R. M.	21	T1	E02	260	Arni, R. K.	21	M1	08	134
An, C. Y.	21	T1	E04	125	Arni, R. K.	19	M1	11	90
An, C. Y.	20	M1	02	281	Arni, R. K.	19	T1	E12	129
Anda, E.	20	T1	E07	302	Arradi, R.	19	M1	06	244
Anda, E. V.	21	T1	E13	329	Arribere, A. A.	21	M1	11	327
Anda, E. V.	21	M1	01	310	Arroteia, A. A.	21	T1	E07	194
Anda, E. V.	21	M1	01	310	Arruda, A. S. de	21	T1	E06	340
Andion, N. P.	21	T1	E05	348	Assali, L. V. C.	21	T1	E03	312
Andrade Jr, R.	19	T1	E10	322	Assali, L. V. C.	21	T1	E03	315
Andrade Jr, R. de	19	M2	08	321	Assumpcao, R. de T.	21	T1	E03	315
Andrade, L. D.	21	T1	E01	239	Assumpcao, R. de T.	19	M2	01	293
Andrade, L. H. F.	20	T1	E06	306	Assumpcao, R. de T.	19	T1	E08	107
Andrade, M. C. de	20	M2	11	326	Assuncao, B. M.	21	T1	E02	264
Andrade, P. C. P. de	21	T1	E08	100	Atik, M.	20	M1	09	205
Andrade, R.	19	T1	E07	179	Attili, R. N.	21	T1	E01	237
Andrade, R. F. S.	21	T1	E09	164	Attili, R. N.	21	T1	E01	237
Andrade, R. F. S.	21	M1	03	159	Auer, M.	21	T1	E07	197
Andrade, R. F. S.	21	T1	E06	341	Augusto, O.	21	M1	05	288
Andrade, S. C. B. de	21	T1	E13	331	Avila, M. A.	19	T1	E10	322
Andrade, T.	20	T1	E12	208	Ayala, A.	21	T1	E04	124
Andreazza, M. L.	21	T1	E12	88	Ayala, A.	21	T1	E04	124
Andreeta, J. P.	19	M1	06	244	Azechi, L. S.	20	T1	E02	232
Andreeta, J. P.	19	T1	E13	114	Azevedo, F. C. C.	19	M1	10	173
Andreeta, J. P.	20	M2	12	117	Azevedo, I. de S.	20	T1	E02	233
Andreeta, M. R. B.	20	T1	E12	209	Azevedo, I. S.	19	M2	08	320
Andreeta, M. R. B.	19	T1	E13	114	Azevedo, S. A. F.	21	M1	02	277
Andreeta, M. R. B.	21	T1	E04	125	Bacri, J.	19	M2	12	192
Andreeta, M. R. B.	19	T1	E08	106	Baffa Filho, O.	21	T1	E08	103
Andreeta, M. R. B.	19	T1	E08	110	Baffa Filho, O.	19	T1	E07	180
Anjos, V. de C. dos	20	T1	E06	309	Baffa Filho, O.	20	M1	11	97
Anjos, V. de C. dos	20	T1	E06	309	Baffa Filho, O.	20	M1	11	96
An, N. B.	20	T1	E10	256	Baggio-Saitovitch, E.	19	T1	E01	218
An, N. B.	20	T1	E10	256	Baggio-Saitovitch, E.	21	M2	04	235
Anoardo, E.	20	T1	E11	287	Baggio-Saitovitch, E.	20	M1	09	207
Anoardo, E.	19	M1	04	280	Baggio-Saitovitch, E.	21	T1	E01	236
Anteneodo, C.	19	T1	E11	93	Baggio-Saitovitch, E.	19	T1	E01	218
Anteneodo, C.	19	T1	E11	94	Baggio-Saitovitch, E.	19	M2	08	320
Arai, T.	21	T1	E05	346	Baggio-Saitovitch, E.	19	M2	08	320
Aranha, N.	21	T1	E02	263	Baggio-Saitovitch, E.	19	T1	E10	323
Aranha, N.	19	T1	E13	113	Bagnato, V. S.	19	M1	07	71
Aranha, N.	21	M1	12	118	Bagnato, V. S.	19	T1	E02	248
Aranha, N.	21	T1	E04	125	Bagnato, V. S.	20	M2	06	253

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Bagnato, V. S.	20	T1	E08	78	Barbosa, M. C. B.	19	T1	E04	139
Bagnato, V. S.	19	M1	07	72	Barbosa, M. C. B.	21	T1	E10	171
Bagnato, V. S.	21	M2	06	258	Barbosa, M. V.	19	T1	E10	324
Bagnato, V. S.	21	T1	E12	87	Barja, P. R.	21	T1	E05	345
Bagnato, V. S.	19	T1	E02	248	Barlette, V. E.	20	T1	E08	77
Bagnato, V. S.	20	M2	06	254	Barrera, R. G.	21	M1	01	310
Bagnato, V. S.	19	T1	E02	247	Barreta, L. G.	20	T1	E04	184
Bagnato, V. S.	19	M1	07	71	Barreto, F. C. S.	19	T1	E04	141
Bagnato, V. S.	21	T1	E12	86	Barreto, F. C. S.	19	T1	E04	138
Bagnato, V. S.	19	T1	E02	247	Barreto, M. T.	20	T1	E04	188
Bagnato, V. S.	21	T1	E12	87	Barros, F. de S.	21	M1	10	98
Bagnato, V. S.	20	T1	E07	302	Barros, G. G.	19	T1	E06	273
Bagnato, V. S.	19	T1	E03	296	Barthem, R. B.	20	T1	E04	187
Bagnato, V. S.	21	T1	E12	85	Barthem, R. B.	20	T1	E04	184
Bagnato, V. S.	19	T1	E03	295	Bartkowiak, M.	20	T1	E01	222
Bahiana, M.	20	T1	E03	156	Baseia, B.	19	T1	E02	247
Baia Neto, A. L.	21	T1	E06	343	Baseia, B.	19	T1	E02	246
Baibich, M. N.	19	T1	E01	215	Baseia, B.	19	T1	E02	247
Baibich, M. N.	21	M1	04	234	Baseia, B.	20	T1	E10	255
Baibich, M. N.	20	M2	10	337	Basmaji, P.	19	T1	E03	297
Bailey, D. W.	21	M2	06	259	Basmaji, P.	19	T1	E02	248
Baker, H. J.	19	T2	06	352	Basmaji, P.	19	M2	01	292
Baldochi, S. L.	19	T1	E13	113	Basmaji, P.	21	T1	E03	313
Baldochi, S. L.	21	M1	12	119	Basmaji, P.	20	T1	E07	301
Baldochi, S. L.	19	T1	E13	114	Basmaji, P.	20	M1	01	299
Baldochi, S. L.	19	T1	E08	111	Basmaji, P.	19	T1	E03	294
Baldochi, S. L.	21	T1	E04	122	Basmaji, P.	20	T1	E07	301
Baldochi, S. L.	19	T1	E08	108	Basmaji, P.	20	T1	E07	301
Baldo, M. V. C.	21	T1	E08	100	Bassi, D.	21	T1	E12	86
Bales, B. L.	19	T1	E11	93	Basso, H. C.	20	T1	E04	183
Balseiro, C. A.	20	M1	03	146	Basso, H. C.	20	T1	E12	210
Baltazar-Rodrigues, J.	20	M1	12	116	Basso, H. C.	20	T1	E12	210
Balzuweit, K.	20	T1	E13	132	Basso, H. C.	20	T1	E12	209
Baptista, G.	21	T1	E12	87	Basso, H. C.	20	M1	02	282
Baptista, G. B.	21	T1	E12	88	Batista, F. A.	21	T1	E01	238
Baranauskas, V.	19	M2	05	334	Bauer, G. H.	19	M1	05	333
Barbara, B.	19	T1	E01	219	Baumvol, I.	20	M2	10	338
Barberis, G. E.	20	M1	02	281	Baumvol, I. J. R.	21	T1	E06	342
Barbero, G.	19	M1	12	190	Baumvol, I. J. R.	19	T1	E01	217
Barbosa, A. A.	21	T1	E07	196	Baziruwiha, J. de D.	21	T1	E06	342
Barbosa, A. A.	21	T1	E07	194	Beatrice, C. R. S.	21	T1	E01	239
Barbosa, A. C. de C.	20	T1	E02	230	Beatrice, C. R. S.	21	T1	E01	240
Barbosa, E.	19	M1	06	244	Beatrici, A.	20	T1	E01	224
Barbosa, F. R.	20	T1	E04	185	Bechara Muniz, R.	21	M1	04	234
Barbosa, F. R.	19	M1	06	243	Bedarida, F.	19	T1	E13	113
Barbosa, L. C.	21	T1	E02	263	Behar, M.	19	M2	02	267
Barbosa, L. C.	19	T1	E02	249	Behar, M.	21	M1	09	211
Barbosa, L. C.	19	T1	E13	113	Bekker, R. de	20	T1	E07	303
Barbosa, L. C.	21	M1	12	118	Bello Junior, B.	20	T1	E11	287
Barbosa, L. C.	20	M2	12	118	Belo, L. C. M.	19	T1	E02	248
Barbosa, L. C.	19	T1	E13	112	Bem, A. R. de	20	T1	E04	186
Barbosa, L. C.	19	T1	E13	115	Bemelmans, D.	21	T1	E04	124
Barbosa, L. C.	19	T1	E03	294	Bemski, G.	21	M1	05	288
Barbosa, L. C.	21	T1	E04	125	Ben-Dor, L.	21	M1	11	328
Barbosa, L. H. M.	20	T1	E02	231	Ben-Dor, L.	20	M2	11	326
Barbosa, M. C. B.	19	T1	E04	138	Benatti, C. R.	19	T1	E11	93

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Benedito, A. C.	19	T1	E07	179	Bonventi Jr, W.	19	T1	E02	251
Bento, C. A.	20	T1	E12	207	Borges Jr, I.	19	M2	07	73
Berlin, A.	19	T1	E06	270	Borges, A. N.	20	T1	E06	308
Bernardes, A. T.	19	M2	11	91	Borges, C. P. F.	19	T1	E11	92
Bernardes, A. T.	21	T1	E09	162	Borges, J. F. M.	21	T1	E06	339
Bernardes, A. T.	21	T1	E09	162	Borges, P. de F.	19	T1	E03	294
Bernardes, L. A.	21	M1	08	133	Borin, F.	21	T1	E02	264
Bernardes, L. A.	19	T1	E12	127	Borin, F.	19	M1	06	243
Bernardino, L. A.	21	T1	E05	347	Borin, I. A.	20	T1	E05	150
Bernardino, L. A.	21	T1	E05	346	Boschetti, S. R.	20	T1	E03	154
Bernhard, B. H.	21	T1	E13	329	Boscolo, M.	21	M2	09	213
Bernussi, A.	20	M1	01	299	Botta Filho, W. J.	19	T1	E09	201
Bernussi, A. A.	19	T1	E03	297	Botta Filho, W. J.	21	M1	09	211
Bernussi, A. A.	19	T1	E03	296	Bouabci, M. B.	19	T1	E05	142
Bertoloni, M. R.	21	T1	E01	238	Boudinov, H.	21	T1	E03	313
Bertucci Neto, V.	20	T1	E04	186	Bourson, P.	19	T1	E08	110
Bettega, M. H. F.	20	T1	E09	80	Bourson, P.	21	T1	E04	123
Bettega, M. H. F.	19	M2	07	73	Braga, G. A.	19	T1	E04	138
Bezerra, C. C.	19	M1	03	135	Branchtein, M. C.	21	T1	E10	170
Bezerra, J. C.	21	T1	E03	314	Brandt, S. M.	20	T1	E07	302
Bezerra, V. M.	20	M2	07	183	Brasil, M. J. S. P.	21	M2	01	311
Biaggi, M. H.	19	T1	E11	94	Braun, L. F. M.	20	T1	E08	76
Bianchi, I.	20	T1	E11	284	Braun, T.	21	M1	03	159
Bianchi, J. C.	20	M2	07	182	Brescansin, L. M.	20	T1	E09	80
Bill, H.	19	T1	E13	114	Brescansin, L. M.	20	T1	E09	80
Binder, R.	19	T1	E02	246	Brescansin, L. M.	20	T1	E09	81
Bindilatti, V.	19	T1	E07	177	Breuer, M.	19	M2	08	320
Bindilatti, V.	19	T1	E07	177	Brito, A. N. de	20	T1	E08	75
Bindilatti, V.	19	T1	E07	176	Brito, A. N. de	20	M1	04	275
Biscegli, C. I.	20	T1	E11	286	Brum, J. A.	20	T1	E06	305
Bisch, P. M.	19	M2	11	91	Brum, J. A.	19	M2	01	291
Bisch, P. M.	19	T1	E11	93	Brune, M.	20	M1	06	252
Bisch, P. M.	19	M2	11	91	Brunetti, A. H.	19	M1	04	280
Bisch, P. M.	21	T1	E08	102	Buchner, B.	19	M2	08	320
Bisch, P. M.	21	T1	E08	101	Bulhoes, L. O. de S.	19	T1	E06	269
Bisch, P. M.	19	M2	11	90	Bulhoes, L. O. de S.	21	M2	02	278
Bisch, P. M.	19	T1	E11	94	Bulhoes, L. O. S.	20	M1	04	274
Bisch, P. M.	21	M1	03	160	Bulhoes, L. O. S.	20	M1	04	276
Bisch, P. M.	21	T1	E08	101	Buntar, V. A.	19	T1	E10	324
Bittencourt, E.	19	T1	E06	272	Buntar, V. A.	21	M2	11	329
Blak, A. R.	21	T1	E04	121	Bustamante, A. N. P.	21	T1	E02	265
Blak, A. R.	19	T1	E08	107	Cabral, F. A. O.	19	T1	E01	220
Blak, A. R.	21	T1	E04	124	Cabrera, G.	20	T1	E09	79
Blak, A. R.	19	T1	E08	109	Cabrera, G.	20	T1	E01	227
Blak, A. R.	21	T1	E04	123	Cabrera, G. G.	20	T1	E02	231
BlaK, A. R.	21	T1	E04	124	Cabrera, G. G.	20	M2	03	222
Bleser, R. A. S.	19	M1	10	173	Cabrera, G. G.	20	T1	E09	81
Bleser, R. A. S.	21	T1	E05	348	Cabrera, G. O.	20	T1	E02	229
Bodnar, R. J.	19	T1	E02	251	Cabrera, G. O.	20	T1	E02	229
Boechat, B.	21	T1	E11	165	Cadilhe, M. W.	20	T1	E03	158
Boerner, W.	20	M2	03	222	Caldas, M. J.	21	T1	E03	317
Bombacini, M. R.	20	T1	E10	256	Caldas, M. J.	21	T1	E03	316
Bonagamba, T.	21	M2	05	289	Caldas, M. J.	19	T1	E06	269
Bonagamba, T. J.	20	T1	E11	287	Caldas, M. J.	19	T1	E06	269
Bonato, C. A.	19	T1	E02	247	Caldeira, A. O.	20	T1	E01	227
Bonfim, O. F. de A.	21	T1	E11	165	Caliri, A.	21	T1	E08	99

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Caliri, A.	21	M2	03	160	Carrico, A. S.	21	M2	10	338
Caliri, A.	21	T1	E08	104	Carvalhaes, C. G.	21	T1	E10	171
Caliri, A.	20	T1	E05	152	Carvalho Filho, C. A. A.	20	T1	E06	308
Calvo, R.	19	T1	E01	219	Carvalho Junior, J. S. de	19	T1	E10	322
Calvo, R.	20	T1	E11	284	Carvalho, A. T. G. de	21	T1	E03	314
Calvo, R.	19	M2	04	215	Carvalho, A. T. G. de	19	T1	E08	110
Calvo, R.	20	T2	06	357	Carvalho, C. L. de	20	T1	E12	210
Camargo Jr, S. de S.	21	T1	E06	343	Carvalho, I. C. dos S.	21	T1	E02	263
Camargo Jr, S. de S.	19	T1	E03	294	Carvalho, I. C. S.	19	M1	06	243
Camargo, P. C. D.	19	T1	E12	128	Carvalho, J. F.	19	T1	E08	106
Camargo, P. C. de	21	T1	E01	241	Carvalho, J. F.	19	T1	E08	110
Campomanes, R.	21	T1	E03	317	Carvalho, J. F.	20	M2	12	117
Campos, A. A.	21	T1	E01	238	Carvalho, J. F.	19	T1	E08	106
Campos, A. A. G.	19	T1	E01	217	Carvalho, M. C. R.	19	M2	06	245
Campos, M.	19	T1	E06	268	Carvalho, R. A.	20	M1	02	282
Campos, M. S.	20	T1	E11	287	Carvalho, R. S.	19	T1	E08	110
Campos, M. S. de	19	T1	E06	271	Carvalho, V. E. de	20	M1	10	336
Campos, M. S. de	21	M2	02	278	Casagrande, D.	20	T1	E06	304
Campos, V. B.	19	M1	01	291	Casagrande, J. F.	20	T1	E04	186
Campos, V. B.	20	T1	E06	308	Castelletto, V.	19	T1	E12	128
Candela, D. S.	19	M2	08	320	Castilho, C. M. C. de	21	T1	E05	348
Canevarolo, S.	19	T1	E06	270	Castilho, C. M. C. de	20	M1	10	335
Cansian, A. M.	19	T1	E07	176	Castilho, C. M. C. de	21	T1	E05	349
Canuto, S.	21	M1	07	82	Castillo, I. A.	20	M2	11	325
Canuto, S.	20	T1	E05	153	Castro, A. C. de	19	T1	E08	108
Canuto, S.	21	M1	07	83	Castro, C. F.	19	T1	E06	272
Canuto, S.	20	T1	E08	78	Castro, E. P. de	20	M1	11	96
Canuto, S.	21	M1	07	83	Castro, I. de	21	T1	E05	346
Canuto, S.	21	M2	07	83	Castro, J. A. e	20	T1	E02	230
Canuto, S.	19	M1	02	266	Castro, J. A. e	20	T1	E02	230
Caparica, A. A.	19	T1	E05	145	Castro, J. A. e	21	M2	04	235
Caplin, D.	20	M2	11	325	Castro, J. A. e	20	T1	E02	233
Carara, M.	21	M1	04	234	Castro, J. A. e	20	M2	01	300
Carara, M. A.	19	T1	E07	179	Castro, J. C.	19	M2	10	175
Carara, M. A.	21	T1	E06	339	Castro, M. A. de	21	M1	07	83
Carara, M. A.	21	T1	E06	340	Castro, M. A. de	21	M2	07	83
Carbonari, A. W.	21	T1	E01	237	Castro, S. C. de	19	M1	05	332
Carbonari, A. W.	21	T1	E01	237	Castro, S. G. de	21	T1	E06	344
Carbonari, A. W.	19	T1	E09	201	Castrucci, A. M. de L.	19	T1	E11	94
Carbonio, R.	20	T1	E02	228	Castrucci, A. M. de L.	19	T1	E11	93
Cardona, M.	19	T1	E03	298	Caticha, N.	21	T1	E10	170
Cardona, P. S. P.	21	M1	08	134	Caticha, N.	21	T1	E10	171
Cardoso, L.	19	T1	E01	216	Caumo, J. R.	20	T1	E04	185
Cardoso, T. V.	21	T1	E04	125	Cavalcante, E. M.	19	T1	E06	271
Cardoso, V.	19	T1	E06	272	Cavalcante, J. M. M.	20	T1	E10	256
Cardoso, V. L.	19	T1	E02	249	Cavalcanti, R. M.	20	T1	E06	308
Cardoso, V. L.	19	T1	E06	271	Celaschi, S.	19	M1	06	243
Caride, O.	19	T1	E04	138	Celaschi, S.	21	T1	E02	264
Carmo Jr, C. do	21	M1	02	277	Celaschi, S.	19	M1	06	244
Carmo, L. C. S. do	21	M2	09	212	Ceotto Filho, G.	19	T1	E08	110
Carmo, L. C. S. do	21	M1	12	118	Cerdeira, F.	19	T1	E03	293
Carmo, L. C. S. do	19	T1	E08	111	Cerdeira, F.	19	T1	E03	294
Carneiro, C. E. I.	19	T1	E05	142	Cernicchiaro, G. R. C.	19	T1	E07	180
Carrara, S. L. A.	20	M2	07	182	Cesar, C. L.	20	M2	06	254
Carrara, S. L. A.	20	M1	07	181	Cesar, C. L.	21	T1	E02	263
Carrico, A. S.	20	T1	E02	230	Cesar, C. L.	20	T1	E04	183

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Cesar, C. L.	19	T1	E13	112	Coral, C.	20	T1	E04	185
Cesar, C. L.	19	T1	E13	115	Coral, C.	19	M1	06	243
Cesar, C. L.	19	T1	E03	294	Corat, E. J.	21	T1	E05	346
Cescato, L.	19	M2	05	335	Corat, E. J.	19	M2	05	334
Cescato, L.	21	T1	E02	264	Cornelio, M. L.	21	M1	10	98
Cescato, L. H. C.	21	T1	E05	348	Corona, N.	19	M1	10	174
Ceschin, A. M.	19	T1	E08	111	Correa Filho, J. A.	20	T1	E07	300
Chaba, A. N.	20	T1	E10	255	Correa, G. E. D. M.	19	T1	E06	269
Chadwick, A. V.	19	T1	E08	109	Correia, A. L.	20	M2	06	254
Chahine, J.	21	T1	E08	104	Correia, N.	20	M1	04	275
Chamberlain, M.	20	T1	E07	303	Correia, R. R.	21	M1	03	159
Chambouleyron, I.	21	T1	E03	317	Cortez-Maghelly, C.	19	M2	11	91
Chambouleyron, I.	21	T1	E03	317	Cortez, A. C. R. da M.	20	M1	02	281
Chambouleyron, I. E.	20	T1	E07	302	Cortez, A. C. R. da M.	20	T1	E11	284
Chan, I. N.	19	T1	E10	325	Cortezao, S. U.	21	T1	E04	123
Chao, K. A.	20	T1	E01	222	Costa Filho, R. N. da	19	T1	E03	295
Chaves, A. S.	20	T1	E07	303	Costa, B. V. da	20	T1	E05	153
Chaves, F. A. B.	20	T1	E05	149	Costa, B. V. da	20	T1	E01	226
Chaves, F. A. B.	19	T1	E07	180	Costa, B. V. da	21	T1	E09	164
Chevrollier, M.	21	M2	06	258	Costa, B. V. da	21	T1	E09	163
Chevrollier, M.	19	T1	E02	248	Costa, B. V. da	19	T1	E04	141
Chevrollier, M.	20	T1	E10	256	Costa, C. M. S.	19	T1	E11	93
Chiaradia, C.	19	M2	10	175	Costa, F. A. da	19	T1	E05	142
Chien, C. L.	19	T2	03	350	Costa, F. A. da	21	T1	E10	170
Chinaglia, E. de F.	19	T1	E08	112	Costa, F. E. da	21	T1	E02	260
Chinaglia, E. de F.	19	T1	E08	112	Costa, I. F. da	21	T1	E02	264
Chitta, V. A.	20	T1	E07	303	Costa, J. A. P. da	21	T1	E03	313
Chitta, V. A.	19	M2	01	292	Costa, J. A. T. B. da	20	M2	10	337
Choi, C. H.	19	T2	01	352	Costa, J. A. T. B. da	20	T1	E05	152
Chow, W.	19	T1	E03	297	Costa, J. E. R.	20	T1	E01	226
Chubaci, J. F. D.	21	T1	E06	341	Costa, M. A.	19	T1	E04	142
Chubaci, J. F. D.	21	T1	E06	343	Costa, M. C. P.	21	T1	E08	102
Chubaci, J. F. D.	19	T1	E01	221	Costa, M. V. T.	20	T1	E02	230
Chu, C. W.	21	T2	03	357	Costa, M. V. T.	20	T1	E02	230
Cilense, M.	21	T1	E01	240	Costa, P. M.	21	T1	E05	348
Cilense, M.	19	T1	E07	179	Costa, R. M.	21	M2	11	328
Cilense, M.	20	T1	E12	208	Costa, R. M.	19	T1	E10	321
Cizs, L. S.	20	T1	E08	76	Cota, A. B.	20	T1	E12	208
Clerici, J. H.	19	T1	E08	106	Coutinho Filho, M. D.	21	T1	E01	236
Coelho, A. de A.	20	T1	E02	231	Coutinho-Filho, M. D.	19	T1	E04	139
Coelho, A. L.	21	T1	E13	330	Coutinho-Filho, M. D.	21	M1	02	276
Coelho, I. S.	19	T1	E02	251	Coutinho-Filho, M. D.	21	M1	02	277
Coelho, L. F. S.	19	M2	07	73	Coutinho-Filho, M. D.	20	M1	03	147
Coghi, C. A.	19	T1	E03	296	Coutinho, K.	21	M1	07	82
Cohenca, C. H.	21	M1	11	328	Coutinho, K.	20	T1	E05	153
Cohen, L.	20	M2	11	325	Coutinho, K.	21	M1	07	83
Colnago, L. A.	20	T1	E11	286	Coutinho, S.	21	T1	E10	169
Colombo, M. F.	21	M1	10	98	Coutinho, S.	19	T1	E04	141
Colombo, M. F.	21	M1	10	99	Coutinho, S.	21	T1	E10	161
Colombo, M. F.	19	T1	E11	92	Couto, A. A.	20	M1	09	206
Colucci, C. C.	21	T1	E01	238	Covissi, U. D. S.	21	M1	10	98
Colucci, C. C.	21	T1	E01	238	Cox, D. L.	20	T1	E01	225
Continentino, M. A.	20	T1	E01	223	Craco, L.	20	T1	E01	227
Continentino, M. A.	21	T1	E13	330	Craievich, A.	21	M1	08	133
Continentino, M. A.	20	T1	E01	226	Cremona, M.	21	M1	12	118
Coqblin, B.	20	T1	E01	224	Cremona, M.	19	T1	E08	111

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Crestana, S.	20	M1	02	283	Davidovich, L.	20	M1	06	252
Crestana, S.	19	M1	10	174	Davidovich, M. A.	21	M1	01	310
Crestana, S.	20	T1	E04	186	DavidVianna, J. e	20	T1	E09	78
Cruvinel, P. E.	19	M1	10	174	De-Paoli, M. A.	20	M1	04	274
Cruvinel, P. E.	20	T1	E04	186	Degani, M. H.	20	T1	E07	304
Cruvinel, P. E.	20	T1	E04	186	Degreve, L.	20	T1	E05	153
Cruvinel, P. E.	19	T1	E07	176	Degreve, L.	20	T1	E05	150
Cruvinel, P. E.	19	T1	E07	179	Degreve, L.	20	T1	E05	149
Cruz, C. H. B.	20	T1	E06	306	Degreve, L.	20	T1	E05	151
Cruz, C. H. B.	19	M2	06	245	Degreve, L.	20	T1	E05	148
Cruz, C. H. B.	19	T1	E03	294	Delacroix, H.	21	T1	E07	195
Cruz, C. M. S.	20	M1	12	116	Delacroix, H.	20	M1	05	130
Cruz, F. C. da	20	M1	06	253	Delacroix, H.	19	M1	12	190
Cruz, F. C. da	19	M1	07	71	Delacroix, H.	20	M2	05	193
Cruz, F. C. da	21	M2	06	259	Denicolo, I.	19	T1	E12	128
Cruz, F. C. da	21	T1	E02	261	Denis, J. P.	19	T1	E08	108
Cruz, F. da	21	T1	E02	261	Destro, M. G.	21	T1	E02	262
Cruz, F. de	21	M1	11	327	Dexpert, H.	19	T1	E09	203
Cruz, G. K.	20	T1	E04	183	Dhalle, M.	20	M2	11	325
Cruz, G. K.	20	M1	02	282	Diamand, M.	21	T1	E02	262
Cruz, J. M. R.	20	T1	E06	305	Diehl, A.	20	T1	E01	228
Cuffini, S. L.	20	T1	E02	228	Diehl, L. M. A.	20	T1	E05	149
Culshaw, B.	19	T2	06	353	Dietzsch, O.	20	T1	E04	185
Culshaw, B.	20	M1	07	182	Dini, D. C.	21	M2	09	212
Cuminato, J. A.	19	T1	E06	271	Dodonov, V.	21	M1	07	82
Cunha, A. G.	20	T1	E04	188	Dodonov, V.	21	M2	10	338
Cunha, C. R. M. da	19	T1	E06	269	Doetsch, D.	19	T1	E01	217
Cunha, H. N. da	21	M2	02	278	Domingos, J. V.	19	T1	E05	145
Cunha, J. B. M. da	21	M2	04	235	Domingues, P. H.	21	T1	E01	237
Cunha, J. B. M. da	21	T1	E01	236	Domingues, P. H.	21	T1	E01	237
Cunha, M. S.	21	T1	E09	163	Dominguez, A. B.	19	M2	08	321
Cunha, S. F. da	21	T1	E01	236	Dominguez, D. R. C.	20	T1	E03	156
Cunha, S. F. da	21	T1	E01	241	Donatti, D. A.	19	T1	E09	203
Cunha, S. L. S.	21	T1	E12	88	Donelli, S. R.	21	M1	10	98
Curado, E. M. F.	21	T1	E10	161	Dordor, P.	19	T1	E07	179
Curado, E. M. F.	21	M2	03	161	Dordor, P.	20	T1	E12	208
Cusatis, C.	19	T1	E12	128	Doria, M. M.	19	M1	08	320
Custodio, M. C.	19	M1	04	281	Doria, M. M.	21	T1	E13	329
D'Ajello, P. C. T.	21	T1	E06	342	Doria, M. M.	21	T1	E13	331
d'Almeida, F. M. R.	21	T1	E13	329	Doria, R. M.	19	T1	E05	145
D'Aubgne, Y. M.	19	M2	01	292	Doria, R. M.	20	T1	E10	255
Dacal, L. C. O.	19	T1	E12	127	Doria, R. M.	21	T1	E13	331
Dal Pino Jr, A.	20	M2	01	300	Dornelas, J. C. A.	20	T1	E04	184
Dal-Pino Jr, A.	21	T1	E03	313	Drago, V.	21	T1	E06	341
Dall'Aglio, G. A.	19	T1	E13	113	Drago, V.	20	M1	09	206
Dall'Antonia, L. H.	19	T1	E09	204	Droz, M.	19	T1	E05	143
Damiao, A. J.	21	T1	E06	340	Duarte, A. S.	19	T1	E02	249
Dantas, C. M. A.	19	T1	E02	247	Duarte, A. S.	19	T1	E02	249
Dantas, I. F.	19	T1	E06	271	Duarte, A. S.	21	T1	E04	125
Dantas, N. O.	19	T1	E08	112	Duarte, A. S.	19	T1	E06	271
Dardenne, L. E.	20	T1	E08	77	Duarte, D.	20	T1	E08	76
Davidovich, L.	19	T1	E02	246	Duarte, M.	19	T1	E13	114
Davidovich, L.	20	M1	06	252	Duarte, M.	21	M1	12	119
Davidovich, L.	20	M1	06	253	Duarte, P. H.	20	T1	E13	131
Davidovich, L.	19	T1	E02	246	Duek, E. A. R.	20	M1	04	274
Davidovich, L.	19	T1	E02	249	Dumke, V. R.	19	T1	E10	323

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Durand, A. P.	20	M1	02	283	Fazzio, A.	20	T1	E08	78
Durand, D.	21	T1	E04	123	Fazzio, A.	19	T2	04	351
Duran, J. E. R.	20	M1	11	95	Feitosa, C. A. C.	20	T1	E06	307
Duran, J. E. R.	21	T1	E04	122	Feitosa, C. C. de A.	21	T1	E02	260
Duran, J. E. R.	19	M1	10	173	Feitosa, E.	19	T1	E11	93
Dyment, F.	21	M1	09	211	Feitosa, E.	21	T1	E08	102
Early, E. A.	20	M2	11	326	Fernandes, A. A. R.	19	T1	E10	325
Eberhardt, K.	19	M1	05	333	Fernandes, A. S.	20	T1	E03	157
Eckern, U.	19	T1	E10	324	Fernandes, P. R. G.	19	M2	12	192
Eiras, J. A.	21	T1	E01	241	Fernandes, R. M.	19	T1	E09	201
Eiras, J. A.	20	M2	12	117	Fernandes, R. M.	19	T1	E09	202
Eiras, J. A.	21	T1	E04	122	Fernandes, R. M.	21	M1	09	211
Eiras, J. A.	20	M1	12	116	Ferrari, C. A.	20	T1	E08	77
Eiras, J. A.	21	M1	12	119	Ferrari, C. A.	21	T1	E12	85
El-Shazly, O. M. M.	19	M2	08	321	Ferraz, A.	20	M2	03	222
ElMassalami, M.	19	T1	E10	323	ferraz, A.	20	M2	04	148
Elzubair, A.	19	T1	E10	323	Ferraz, A.	21	T1	E11	166
Emmel, P. D.	20	T1	E06	308	Ferraz, A. C.	21	M2	01	312
Emura, M.	19	T1	E01	216	Ferraz, A. C.	20	T1	E06	306
Engelsberg, M.	19	M1	04	281	Ferraz, A. C.	20	T1	E06	306
Engelsberg, M.	19	M2	10	175	Ferraz, A. C.	20	T1	E06	306
Erichsen Jr, R.	19	M2	03	137	Ferraz, A. C.	20	T1	E06	304
Esperidiao, A. S. C.	21	M1	03	159	Ferraz, M. C. C.	20	T1	E12	210
Evangelista, L. R.	19	M1	12	190	Ferraz, M. C. C.	20	T1	E12	210
Evangelista, L. R.	21	T1	E07	194	Ferraz, M. C. C.	20	T1	E12	209
F. Neto, J. M. de	19	T1	E05	145	Ferraz, W. B.	20	T1	E12	208
Fabris, J. D.	19	T1	E09	204	Ferreira, G. L.	19	T1	E06	271
Fagotto, E.	20	T1	E06	305	Ferreira, J. M.	19	T1	E10	324
Fajardo, F.	21	T1	E03	317	Ferreira, J. M.	19	T1	E10	324
Fantini, M. C. A.	20	T1	E13	131	Ferreira, J. M.	19	T1	E07	177
Fantini, M. C. A.	21	M1	08	134	Ferreira, J. M.	21	M2	11	328
Fantini, M. C. A.	19	T1	E10	323	Ferreira, J. P.	20	T1	E07	301
Fantini, M. C. de A.	19	T1	E08	107	Ferreira, J. P.	20	T1	E07	301
Faria Junior, M.	21	T1	E08	104	Ferreira, J. R. F.	19	T1	E05	143
Faria, A. C. de	19	T1	E05	143	Ferreira, L. G.	20	T1	E09	80
Faria, C. C. de	19	T1	E07	178	Ferreira, L. G.	19	M2	07	73
Faria, C. F. de M.	21	T1	E12	85	Ferreira, M. S.	21	M2	04	235
Faria, I. C.	21	M1	08	134	Ferreira, N. A. M.	20	T1	E12	208
Faria, N. V. de C.	19	M2	07	73	Ferreira, N. G.	21	T1	E05	348
Faria, R. M.	19	T1	E06	268	Ferreira, P. I.	20	M1	09	206
Faria, R. M.	21	M2	02	278	Ferreira, S. J.	19	T1	E04	138
Faria, R. M.	19	T1	E06	269	Fichtner, P. F.	21	M1	09	211
Faria, R. M.	21	M2	02	278	Fiedler-Ferrara, N.	20	T1	E03	155
Faria, R. M.	20	M1	04	274	Fiedler-Ferrara, N.	21	T1	E08	100
Faria, R. M.	19	M2	02	267	Figueira, M. S.	20	T1	E01	225
Faria, R. M.	19	T1	E06	274	Figueiredo Neto, A. D. de	20	T1	E03	158
Faria, R. M.	19	T1	E06	270	Figueiredo Neto, A. M.	21	T1	E07	197
Faria, R. M.	20	M1	04	276	Figueiredo Neto, A. M.	19	M2	12	191
Farias, G. A.	21	T1	E06	344	Figueiredo Neto, A. M.	21	T1	E07	194
Farrell, D. E.	21	M1	11	327	Figueiredo Neto, A. M.	19	M2	12	192
Fazan, T. A.	21	T1	E06	344	Figueiredo Neto, A. M.	19	M2	12	192
Fazzio, A.	21	T1	E03	317	Figueiredo Neto, A. M.	19	M2	12	191
Fazzio, A.	21	T1	E03	316	Figueiredo Neto, A. M.	21	T1	E07	196
Fazzio, A.	20	M2	01	300	Figueiredo Neto, A. M.	21	T1	E07	197
Fazzio, A.	20	T1	E09	81	Figueiredo Neto, A. M.	21	T1	E07	196
Fazzio, A.	21	M1	07	83	Figueiredo Neto, A. M.	19	M1	12	190

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Figueiredo Neto, A. M.	21	T1	E07	198	Frejlich, J.	19	M1	06	244
Figueiredo, M. T.	19	T1	E06	271	Frejlich, J.	19	T1	E08	106
Figueiredo, W.	20	T1	E03	156	Freund, M. T. L.	19	T1	E11	94
Figueiredo, W.	19	T1	E04	139	Freund, M. T. L.	19	T1	E11	93
Figueiredo, W.	20	T1	E03	157	Fries, T.	19	M1	03	135
Figueiredo, W.	19	T1	E04	139	Frossati, G.	19	T1	E07	177
Figueireso Neto, A. M.	21	T1	E07	198	Frossati, G.	19	T1	E07	177
Fisher, M. P. A.	20	T2	03	354	Frota-Pessoa, S.	21	T1	E01	240
Fittipaldi, I. P.	19	T1	E04	140	Frota-Pessoa, S.	21	T1	E06	342
Flacker, A.	20	T1	E04	185	Frota-Pessoa, S.	21	T1	E01	242
Flemming, J.	21	T1	E12	87	Frota-Pessoa, S.	21	T1	E01	236
Flocchini, R. G.	20	T1	E04	186	Froyen, S.	19	T1	E04	140
Florencio Jr, J.	21	T1	E11	165	Fugivara, S.	20	M2	07	182
Florencio, O.	19	T1	E09	201	Fujii, A. T.	21	T1	E05	346
Florencio, O.	21	M1	09	211	Fujimoto, F.	21	T1	E06	341
Florencio, O.	19	T1	E09	203	Fujimoto, F.	21	T1	E06	343
Florencio, O.	21	M1	09	211	Fujimoto, J. G.	21	M2	06	259
Flores, F.	21	M1	01	310	Fullerton, E. E.	19	M1	08	319
Florez, L. T.	21	M1	01	310	Furquim, T. A. C.	19	T1	E11	95
Foerster, B.	20	T1	E11	284	Furquim, T. A. C.	19	T1	E11	94
Foglio, M. E.	20	T1	E01	225	Furtado, C. B. S.	19	T1	E08	108
Folhadela Neto, J.	19	T1	E02	251	Furtado, C. B. S.	21	T1	E04	126
Fonseca, A. L. de A.	19	T1	E06	272	Furuzawa, S. K.	20	T1	E04	185
Fonseca, T. L.	21	M1	02	277	Fuzikawa, K.	19	T1	E13	115
Fontenelle, M. T.	20	M1	06	253	Gabrielli, C.	20	M1	04	275
Fontes, M. B.	20	T1	E02	228	Galembeck, F.	20	M1	02	281
Fontes, M. R. de M.	19	T1	E12	127	Gallo, H.	19	M1	06	244
Fornes, J. A.	21	T1	E08	100	Gallo, N. J. H.	19	T1	E08	106
Fornes, J. A.	21	T1	E08	104	Galvao, D. S.	21	M1	02	277
Fortin, W.	19	T1	E08	110	Galvao, L.	21	M1	02	277
Fossey, M. A.	21	T1	E08	102	Galzerani, J. C.	19	T1	E03	294
Fragalli, J. F.	19	T1	E03	295	Galzerani, J. C.	21	T1	E03	315
Fragalli, J. F.	20	T1	E07	302	Galzerani, J. C.	21	T1	E04	122
Fragalli, J. F.	19	T1	E03	296	Gama, S.	19	T1	E01	215
Fragalli, J. F.	21	T1	E03	313	Gama, S.	20	T1	E04	184
Fraguito, H. L.	19	T1	E02	249	Gama, S.	21	T1	E01	238
Fraguito, H. L.	19	T1	E02	249	Gama, S.	21	T1	E01	238
Fraguito, H. L.	19	T1	E03	294	Gama, S.	19	T1	E01	216
Fraguito, H. L.	21	T1	E04	125	Gandra, F. G.	20	T1	E02	232
Fraguito, H. L.	19	T1	E06	271	Gandra, F. G.	20	T1	E11	286
Franca, A.	20	T1	E09	79	Gandra, F. G.	20	M1	02	281
Franceschini, D.	20	M2	10	337	Garbesi, A.	20	T2	06	356
Francisco, R. H. P.	19	T1	E09	201	Garcia, A. L.	21	T1	E04	124
Francisco, T. B. B. e	20	T1	E04	188	Garcia, A. L.	19	T1	E08	109
Franco, B. J. de O.	21	T1	E09	164	Garcia, A. L.	21	T1	E04	124
Franco, B. J. de O.	21	T1	E09	163	Garcia, C. R. S.	21	T1	E02	263
Franco, R. W. de A.	20	T1	E11	285	Garcia, D.	20	M2	12	117
Franzan, A. H.	21	T1	E04	125	Garcia, D.	21	T1	E04	122
Freire Jr, F. L.	20	M2	10	337	Garcia, G. A.	20	M1	06	253
Freire, H. J. P.	19	M2	06	244	Garcia, G. A.	19	M1	07	71
Freire, P. de T. C.	21	M2	09	213	Garcia, G. de A.	21	T1	E02	261
Freire, T.	20	T1	E12	208	Garcia, J. B. C.	20	T1	E03	157
Freire, V. N.	19	T1	E03	295	Garcia, V. H.	19	T1	E01	220
Freitas, D. de	20	T1	E12	209	Gargano, R.	20	T1	E08	75
Freitas, L. C. G.	20	T1	E08	77	Garg, V. K.	19	T1	E09	204
Freitas, U de	20	T1	E10	256	Garllip, W.	21	T1	E01	240

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Garrat, R. C.	19	T1	E12	127	Gossard, A.	21	M1	01	310
Garrido, M. O.	20	T1	E01	223	Gottarelli, G.	21	T1	E07	195
Gavillet, J.	20	M1	09	206	Gottarelli, G.	20	T2	06	356
Gelfuso, V. C.	19	M1	10	173	Gottlieb, D.	20	T1	E01	223
Gennaro, A. M.	20	M1	02	281	Gouvea, M. E. de	19	T1	E04	141
Gentili, M.	21	M2	09	212	Graeff, C. F. de O.	20	T1	E07	302
Geoffroy, O.	19	T1	E01	219	Graeff, C. F. de O.	19	M1	05	333
Germano, J. S. E.	19	M2	07	73	Grandi, B. C. S.	20	T1	E03	156
Germano, J. S. E.	20	T1	E09	78	Grandini, C. R.	19	T1	E09	201
Germano, J. S. E.	20	T1	E09	79	Grandini, C. R.	21	M1	09	211
Ghiner, A.	21	M2	07	84	Grandini, C. R.	19	T1	E09	203
Ghiner, A. V.	19	M2	06	245	Grandini, C. R.	19	T1	E09	202
Ghivelder, L.	20	M2	11	325	Grandini, C. R.	21	M1	09	211
Ghivelder, L.	19	T1	E10	325	Grandi, T. A.	20	M1	09	206
Gilli, J. M.	19	M1	12	190	Grieneisen, H. H.	21	M1	10	97
Gimenes, O.	19	M2	12	192	Grimsditch, M.	19	T1	E02	251
Giotto, M. V.	20	T1	E11	287	Grivickas, V.	19	T1	E02	248
Giuliano, A. D.	20	T1	E04	186	Grivickas, V.	20	M1	01	299
Givord, D.	19	T1	E01	219	Grivickas, V.	19	T1	E03	295
Givord, D.	21	M2	04	235	Gross, G.	21	M1	11	327
Gobbi, A. L.	19	M1	01	291	Guedes, I.	20	T1	E08	78
Gobbi, A. L.	19	T1	E03	295	Guedes, I.	19	M1	07	72
Gobbi, A. O. M.	21	T1	E01	241	Guedes, I.	19	M1	07	71
Godfrin, H.	19	M2	04	215	Guedes, I.	21	T1	E12	86
Godinho, C. F. L.	20	T1	E08	76	Guedes, I.	19	M2	06	244
Goff, A. H.	19	T1	E06	273	Guedes, I.	19	T1	E03	296
Goffman, M. F.	21	M1	11	327	Guenzburger, D.	21	T1	E12	85
Gomes, A. A.	21	T1	E01	238	Guenzburger, D.	21	T1	E01	240
Gomes, A. A. G.	20	T1	E01	227	Guerra, E. S.	20	M1	06	253
Gomes, A. G.	21	T1	E01	240	Guerra, E. S.	20	T1	E10	255
Gomes, A. K. B.	19	T1	E10	324	Guimaraes Neto, J. M.	19	M2	02	267
Gomes, L.	21	T1	E04	122	Guimaraes, A. P.	20	T1	E02	231
Gomes, M. A. de F.	20	M2	04	148	Guimaraes, A. P.	20	T1	E02	231
Gomes, M. A. de F.	20	T1	E03	157	Guimaraes, A. P.	21	T1	E01	240
Gomes, M. A. de F.	21	T1	E09	162	Guimaraes, A. P.	21	T1	E01	238
Gomide, J. V. B.	20	M1	06	253	Guimaraes, B. G.	20	T1	E13	131
Gomide, J. V. B.	19	M1	07	71	GUIMARAES, F. E. G.	21	M2	01	311
Gomide, J. V. B.	21	T1	E02	261	Guimaraes, P. S. S.	21	M1	01	310
Gomide, J. V. B.	21	M2	06	259	Guimaraes, P. S. S.	20	T1	E07	304
Gomide, J. V. B.	21	T1	E02	261	Guimaraes, P. S. S.	20	T1	E07	303
Goncalves, D.	20	M1	04	274	Guimpel, J.	19	M1	08	319
Goncalves, J. L.	19	T1	E08	106	Guimpel, J.	19	T1	E10	325
Goncalves, L. C. D.	21	T1	E04	121	Guivelder, L.	20	M2	11	325
Goncalves, L. L.	19	T1	E04	142	Gulik-Krzywicki, T.	20	M1	05	130
Goncalves, L. L.	21	M1	07	83	Gulik-Krzywicki, T.	20	M2	05	193
Goncalves, M. A. M. S.	21	T1	E05	349	Gulik, A.	20	M1	05	130
Goncalves, M. C.	21	T1	E05	345	Gupta, H. M.	21	T1	E03	316
Goncalves, W. M.	20	T1	E11	283	Gusev, G.	20	T1	E07	301
Gonzales, P.	20	T1	E07	301	Gusev, G.	20	T1	E07	301
Gonzalez, C.	20	T1	E11	287	Gusev, G. M.	19	M2	01	292
Goodwin, D. G.	21	T1	E05	346	Gusev, G. M.	20	T1	E07	301
Gorenstein, A.	21	M1	08	134	Gusmao, M. A. C.	20	T1	E01	224
Gorenstein, A.	20	M1	04	274	Gusmao, M. A. C.	20	T1	E01	228
Gorenstein, A.	21	T1	E05	345	Gusmao, M. A. C.	21	T1	E13	329
Gorenstein, A.	20	M1	10	336	Gusmao, M. A. C.	20	T1	E01	227
Gornsztejn, T.	21	M1	01	310	Gussev, G.	21	T1	E03	313

Autor	Dia	Periodo	Sala	Pág.	Autor	Dia	Periodo	Sala	Pág.
Gutterres, R. F.	20	T1	E05	152	Imassato, H.	19	T1	E11	91
Haetinger, C. M.	19	T1	E10	325	Inacio, E. C.	21	T1	E09	164
Hall, D. R.	19	T2	06	352	Inacio, E. C.	21	T1	E09	163
Halvorsen, E.	20	T1	E01	222	Inacio, F. A.	19	T1	E01	215
Harbison, J. P.	21	M1	01	310	Ioriatti Jr, L.	20	T1	E06	309
Haroche, S.	20	M1	06	252	Ippen, E. P.	21	M2	06	259
Hawksworth, S.	20	T1	E07	303	Isotani, S.	19	T1	E02	251
Heeger, A. J.	20	T2	01	356	Ito, A. S.	19	T1	E11	95
Helayel-Neto, J. A.	21	T1	E13	331	Ito, A. S.	19	T1	E11	94
Helena, E. L. de S.	19	T1	E04	139	Ito, A. S.	19	M2	11	90
Helman, J. S.	20	T1	E11	283	Ito, A. S.	21	T1	E08	101
Henini, M.	20	T1	E07	303	Itri, R.	20	M2	05	193
Henini, M.	20	T1	E07	303	Iulek, J.	19	T1	E12	129
Henriques, A. B.	21	T1	E04	121	Izzo, D.	20	M2	04	148
Henriques, E. F.	19	T1	E05	146	Jaaskelainen, T.	19	T1	E08	106
Henriques, V. B.	19	M2	11	91	Jackson, R. A.	19	T1	E08	109
Henriques, V. B.	21	T1	E08	101	Jacome, M. M.	19	M2	08	320
Henriques, V. B.	19	T1	E05	146	Jalbert, G.	19	M2	07	73
Henriquez, C.	21	M1	02	276	Japiassu, G. M.	20	T1	E01	223
Hernandes, A.	21	T1	E04	125	Japiassu, G. M.	21	T1	E13	330
Hernandes, A. C.	20	T1	E12	209	Japiassu, G. M.	20	T1	E01	226
Hernandes, A. C.	19	T1	E13	114	Jaramillo, J. M.	21	T1	E02	262
Hernandes, A. C.	19	T1	E08	106	Jardim, R. F.	20	T1	E12	210
Hernandes, A. C.	20	M2	12	117	Jardim, R. F.	21	M1	11	328
Hernandes, A. C.	19	T1	E13	113	Jardim, R. F.	20	M2	11	326
Hernandes, A. C.	19	T1	E08	106	Jardim, R. F.	20	M2	11	326
Hernandes, C. S.	21	T1	E03	314	Jarrell, H. C.	20	T1	E11	285
Herrera-Perez, J. L.	21	T1	E02	261	Jenkins, G. M.	20	T2	01	355
Herrmann Jr, P. S. de P.	19	T1	E07	176	Jesus, E. F. O. de	21	T1	E08	103
Hessan, D.	19	M1	01	290	Jesus, J. C. O. de	20	T1	E02	228
Hill, G.	20	T1	E07	303	Jesus, J. T. de	19	M1	06	243
Hipolito, O.	20	T1	E06	308	Jesus, J. T. de	19	M1	06	244
Hirata, J. H.	20	T1	E04	185	Jordao, J. A.	21	M1	09	211
Hoffmann, V.	19	T2	01	352	Jordao, J. A. R.	19	T1	E09	201
Holanda, J. N. F. de	20	T1	E12	207	Jordao, J. A. R.	19	T1	E09	203
Holanda, J. N. F. de	20	T1	E12	209	Jordao, J. A. R.	21	M1	09	211
Hopkins, P.	21	M1	01	310	Jr, A. T. da C.	20	T1	E02	230
Horjales, E.	19	T1	E12	127	Juliao, J. F.	19	T1	E08	107
Hoyos, F. J. de	20	T1	E04	184	Julienne, P.	19	T1	E02	247
Hubler, R.	21	T1	E06	342	Junior, J. S. de A.	21	M2	12	120
Hubler, R.	21	T1	E06	342	Jurelo, A. R.	19	T1	E10	323
Hubler, R.	20	M2	10	338	Juriollo, A.	19	M1	06	244
Hubler, R.	21	T1	E06	341	Jyk, T. I.	20	T1	E03	157
Hummelgen, I. A.	21	T1	E03	316	Kadigrobov, A. M.	19	T1	E01	220
Husseim, M.	19	M1	04	280	Kaito, C.	20	T1	E02	233
Ibanez, A.	19	T1	E09	203	Kaminski, J.	21	M1	01	310
Ibarra, M. R.	19	M2	04	214	Kam, K. Y.	21	T1	E02	260
Iglesias, J. R.	19	M2	03	137	Kamo, T.	21	M1	11	327
Iglesias, J. R.	21	T1	E10	170	Kamphorst, S. O.	21	T1	E09	162
Iglesias, J. R.	20	T1	E01	224	Kamphorst, S. O.	21	T1	E09	162
Iglesias, J. R.	21	M1	03	160	Kamshilin, A. A.	19	T1	E08	106
Iglesias, J. R.	20	T1	E03	154	Kanda, D. H. F.	19	T1	E06	270
Iglesias, J. R.	21	T1	E13	329	Kapitulnik, A.	21	M1	11	327
Iglesias, J. R.	21	T1	E13	329	Kappler, J. P.	20	T1	E02	229
Iikawa, F.	19	T1	E03	298	Kapusta, S.	19	M2	08	321
Imaizumi, M.	20	T1	E02	232	Katagiri, K.	19	T1	E01	221

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Kawamura, M. R. D.	19	T1	E11	95	Lara, D. P.	19	T1	E05	146
Kawase, L. R.	21	T1	E02	263	Lara, G. A.	20	M2	03	222
Keay, B.	21	M1	01	310	Lara, G. A.	20	T1	E01	225
Keddam, M.	20	M1	04	275	Larica, C.	19	T1	E01	218
Keller, J.	20	M2	03	222	Larica, C.	21	M2	04	235
Keller, J.	20	T1	E01	227	Las, W. C.	19	T1	E07	179
Keller, W. A.	21	M1	08	133	Las, W. C.	20	T1	E12	208
Keller, W. A.	21	M1	08	133	Latge, A.	20	T1	E07	302
Khoury, A. Z.	19	T1	E02	246	Latge, A.	20	M2	01	299
Khoury, A. Z.	19	T1	E02	249	Lavarda, F. C.	21	M1	02	277
Kintop, J.	20	T1	E09	81	Leal, C. E.	20	M2	03	222
Kirtman, B.	21	M1	02	277	Leal, C. E.	20	T1	E01	227
Kishore, R.	21	T1	E13	330	Leal, E. P.	20	T1	E09	80
Kist, T. B. L.	21	M1	10	97	Leal, E. P.	20	T1	E09	81
Kiwi, M.	20	T1	E03	154	Leao, S. A.	20	T1	E07	304
Kiyohara, P. K.	19	T1	E08	111	Lederman, D.	19	T1	E10	325
Kleemann, W.	19	M2	04	214	LeGoues, F. K.	19	T2	04	351
Kleiman, G. G.	21	T1	E06	344	Leitao, U. A.	19	T1	E02	250
Kleiman, G. G.	19	M1	05	332	Leitao, U. A.	19	T1	E02	248
Kleiman, G. G.	19	M1	05	332	Leitao, U. A.	19	T1	E02	248
Knobel, M.	19	T1	E01	218	Leitao, U. A.	19	M2	04	214
Koch, S.	19	T1	E02	246	Leite, C. A. F.	21	T1	E12	87
Koch, S.	19	T1	E03	297	Leite, C. A. F.	19	T1	E03	296
Koide, K.	20	T1	E04	185	Leite, C. V. B.	21	T1	E12	88
Kokshenev, V. B.	19	T1	E05	143	Leite, C. V. de B.	21	T1	E12	87
Kolenda, J.	20	M1	01	299	Leite, J. R.	19	T1	E08	111
Kolenda, J.	19	T1	E03	295	Leite, J. R.	21	T1	E03	315
Kolenda, J.	20	T1	E07	302	Leite, M. A. S.	20	T1	E11	287
Kolenda, J.	19	T1	E03	296	Leite, N. F.	19	M2	05	334
Kondo, A. A.	19	M2	02	268	Leite, N. F.	19	M2	05	334
Kopeliovich, A. I.	20	T1	E02	232	Leme, D. G.	21	T1	E05	348
Kordecki, R.	19	T1	E01	217	Lemes, J. C.	20	T1	E04	188
Krebs, P. R.	21	T1	E10	170	Lemke, N.	20	T1	E03	154
Kremer, G. M.	20	T1	E03	157	Lemos, A. de J.	19	T1	E08	110
Kremer, G. M.	20	T1	E03	157	Lemos, V.	21	M2	09	213
Krylov, I. P.	21	M1	11	327	Lente, M. H.	20	M2	12	117
Kugel, G.	19	T1	E08	110	Lepiński, C. M.	20	T1	E12	207
Kunzler, J. V.	19	T1	E10	325	Lerner, E.	20	T1	E05	149
Kunzler, J. V.	21	M2	11	328	Lesche, B.	21	T1	E02	264
Kurmaev, E. Z.	19	T1	E10	324	Lesske, H. M.	21	T1	E07	197
Kuromoto, N. K.	20	M1	09	206	Leyva, M. de D.	19	M1	01	290
Kuva, S. M.	21	T1	E10	171	Lezarna, A.	19	T1	E02	248
Lacerda, M. de M.	21	T1	E02	264	Libero, V. L.	20	T1	E01	225
Lacerda, M. M.	19	M1	06	243	Licinio, P.	21	T1	E09	164
Lagos, R. E.	20	M2	03	222	Licinio, P.	21	T1	E09	163
Lagos, R. E.	20	T1	E01	225	Li, J.	19	M2	08	321
Lagos, R. E.	20	T1	E01	226	Li, M. S.	20	T1	E04	184
Laks, B.	21	M1	02	277	Li, M. S.	19	T1	E13	114
Lamas, A. C.	19	M1	01	291	Li, M. S.	20	M1	12	117
Lamas, A. C.	19	T1	E03	295	Li, M. S.	20	M1	12	116
Landers, R.	21	T1	E06	344	Li, M. S.	21	T1	E03	318
Landers, R.	21	T1	E06	344	Li, M. S.	19	T1	E06	268
Landers, R.	19	M1	05	332	Lima-Junior, J. O.	19	T1	E07	177
Landers, R.	19	M1	05	332	Lima, A. P.	19	T1	E08	111
Lang, A.	19	M2	06	245	Lima, C. J. de	20	T1	E04	183
Lanza, A. C.	20	T1	E04	185	Lima, C. J. de	20	T1	E04	188

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Lima, C. J. de	20	T1	E12	209	Lubyshev, D. L.	21	T1	E03	313
Lima, C. J. de	19	T1	E13	114	Lubyshev, D. L.	20	T1	E07	301
Lima, C. J. de	21	T1	E04	125	Lucena, L. dos S.	21	M2	03	161
Lima, C. J. de	19	T1	E08	106	Lucena, L. S.	19	T1	E06	271
Lima, C. J. de	19	T1	E08	110	Luetgemeier, H.	19	T1	E01	217
Lima, C. R. A. de	21	T1	E02	264	Luis, G. M. R. de S.	21	T1	E02	261
Lima, E. G.	20	M2	06	254	Lunazzi, J. J.	21	T1	E02	262
Lima, E. G. de	20	M1	06	252	Lunazzi, J. J.	21	T1	E02	262
Lima, E. J.	21	T1	E05	345	Lunazzi, J. J.	19	M1	06	244
Lima, G. A. R.	20	T1	E09	81	Luz, D. M.	21	T1	E11	165
Lima, I. C. da C.	20	T1	E06	308	Luz, M. G. E. da	20	T1	E08	76
Lima, J. C. de	20	M1	09	206	Luzzati, V.	20	M1	05	130
Lima, J. de	21	T1	E04	122	Luzzati, V.	20	M2	05	193
Lima, J. de	19	T1	E08	109	Maan, J. C.	20	T1	E07	303
Lima, J. F. de	21	M2	12	120	Macchione, E. L. A.	20	T1	E04	185
Lima, L. C. S. de	21	T1	E01	241	MacDiarmid, A. G.	19	T1	E06	269
Lima, M. A. P.	20	T1	E09	80	Macedo, M. A.	19	T1	E09	205
Lima, M. A. P.	20	T1	E09	79	Macedo, M. A. de	19	T1	E09	204
Lima, M. A. P.	19	M2	07	73	Macedo, W. A. de A.	19	T1	E08	107
Lima, M. A. P.	20	T1	E09	79	Macedo, Z. S.	19	T1	E11	95
Lima, M. A. P.	19	M2	07	73	Macedo, Z. S.	19	T1	E11	94
Lima, M. A. P.	20	T1	E09	78	Machado, A. J. S.	20	T1	E12	210
Lima, M. A. P.	20	T1	E09	79	Machado, A. J. S.	20	T1	E12	207
Lima, M. A. P.	19	M2	07	73	Machado, A. M.	20	T1	E09	80
Lima, M. S. F. de	21	M1	09	212	Machado, A. M.	19	T1	E03	296
Lima, N. B. de	21	T1	E04	121	Machado, F. L. A.	19	T1	E01	220
Lima, N. F.	21	T1	E08	101	Machado, F. L. A.	19	T1	E01	215
Lima, O. F. de	19	T1	E10	322	Machado, F. L. de A.	20	T1	E02	228
Lima, O. F. de	19	T1	E10	322	Machado, K. D.	20	T1	E05	151
Lima, O. F. de	19	M1	08	319	Machado, L. E.	20	T1	E09	80
Lima, O. F. de	19	M2	08	321	Machado, L. E.	20	T1	E09	80
Lima, O. F. de	21	M2	11	328	Machado, L. E.	20	T1	E09	80
Lino, A. T.	21	T1	E03	315	Machado, L. E.	20	T1	E09	81
Lino, J. L. da S.	19	M2	07	73	Machado, R. F.	20	T1	E05	149
Lino, J. L. da S.	20	T1	E09	78	Maciel, H. S.	21	T1	E05	346
Lino, J. L. S.	20	T1	E09	79	Magalhaes, A. C. N.	19	T1	E04	138
Lisboa, J. A.	20	T1	E08	76	Magalhaes, A. C. N. de	21	T1	E09	164
Litvin, L. V.	19	M2	01	292	Magalhaes, C. S. de	19	T1	E03	295
Liu, X.	19	M1	01	290	Magalhaes, M.	21	T1	E07	196
Lobo, M. P.	19	T1	E05	144	Magela e Silva, G.	21	M1	02	277
Lobo, R. P. S. M.	21	M2	12	120	Magela e Silva, G.	19	T1	E06	272
Lobo, S. M.	19	T1	E06	273	Magnea, N.	19	M2	01	292
Longo, E.	19	T1	E06	273	Magon, C. J.	20	T1	E11	285
Longo, E.	20	T1	E13	132	Magon, C. J.	20	T1	E02	232
Longo, E.	20	T1	E13	131	Magon, C. J.	20	T1	E11	286
Lopes, F. J. P.	21	T1	E08	102	Magon, C. J.	20	T1	E11	287
Lopes, L. C.	20	T1	E02	233	Ma, H.	19	T1	E02	251
Lopes, R. T.	21	T1	E08	103	Mahmood, A.	19	M2	08	321
Lopez, J. V.	19	T1	E08	109	Maia, D. L.	21	T1	E06	341
Lopez, L. F.	19	T1	E05	146	Maior, R. S.	20	M1	04	275
Losch, W.	19	M1	05	333	Majlis, N.	21	T1	E06	340
Loural, M. S. S.	21	T1	E02	261	Majlis, N.	20	T1	E05	152
Lourenco, M. A.	21	T1	E04	124	Makiuchi, N.	20	T1	E08	75
Lubshev, D. I.	19	T1	E03	294	Makiuchi, N.	20	T1	E08	77
Lubshev, D. I.	20	T1	E07	301	Makiuchi, N.	20	T1	E09	78
Lubyshev, D. I.	20	T1	E07	301	Makler, S. S.	21	M1	01	310

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Malbouisson, L. A. C.	21	M1	07	82	Martins, R. B.	19	T1	E03	296
Maldonado, E. P.	21	T1	E02	260	Mascarenhas, S.	20	T1	E04	186
Maltez, R. L.	19	M2	02	267	Mascarenhas, Y. P.	19	T1	E07	178
Malvezzi, A. L.	21	T1	E11	167	Mascarenhas, Y. P.	20	T1	E12	210
Mammana, A. P.	21	T1	E07	197	Mascarenhas, Y. P.	20	T1	E12	210
Mammana, V.	21	M1	12	119	Mascarenhas, Y. P.	20	T1	E12	209
Mancini, M. W.	19	T1	E09	201	Mascarenhas, Y. P.	20	M1	05	130
Mansur, R. A.	21	T1	E01	239	Masetti, E.	19	M2	10	175
Mansur, R. A.	21	T1	E01	238	Massa, N. E.	20	T1	E02	228
Maple, M. B.	21	M1	11	328	Massi, M.	21	T1	E05	346
Maple, M. B.	20	M2	11	326	Massunaga, M. S.	20	T1	E03	156
Maple, M. B.	20	M2	11	326	Mastelaro, V. R.	19	T1	E09	203
Marcal, N.	21	T1	E05	345	Mathon, J.	20	T1	E02	231
Marcassa, L. G.	19	M1	07	71	Matias, J. G. N.	19	T1	E08	107
Marcassa, L. G.	20	M2	06	253	Matos, J. M. O.	21	M1	07	83
Marcassa, L. G.	20	M2	06	254	Matos, M.	21	T1	E05	349
Marcassa, L. G.	19	T1	E02	247	Matsuda, S.	21	M1	11	327
Marcassa, L. G.	21	T1	E12	85	Matsuoka, M.	21	T1	E04	123
Marchioli, M. A.	21	T1	E11	167	Mattievitch, E.	21	T1	E01	237
Marchioli, M. A.	21	T1	E11	167	Mattos, C.	21	T1	E10	170
Marchioli, M. A.	21	T1	E11	167	Mattoso, L. H. C.	19	T1	E06	269
Marciano, V. R. P. R. O.	19	T1	E08	107	Mattoso, L. H. C.	19	T1	E06	274
Margulis, W.	21	T1	E02	263	Matuo, C. Y.	21	T1	E07	197
Margulis, W.	19	M2	06	245	Matusoka, M.	19	T1	E08	112
Margulis, W.	19	M1	06	243	Matusoka, M.	19	T1	E08	112
Margulis, W.	21	T1	E02	264	Matvienko, B.	19	T1	E03	297
Margulis, W.	19	T1	E03	296	Matvienko, B.	20	M1	01	299
Margulis, W.	20	M2	07	182	Maule, C. R. N.	20	T1	E04	185
Margulis, W.	21	T1	E02	264	Mauricio, C. L. P.	20	M1	02	282
Mariani, P.	21	T1	E07	195	Mauricio, M. H. P.	21	M2	09	212
Mariani, P.	20	M1	05	130	Mauricio, M. H. P.	21	M1	12	118
Mariani, P.	20	T2	06	356	Mauro, E. Di	20	T1	E11	286
Mariani, P.	19	M1	12	190	Mayerhof, W. E.	20	M2	02	74
Mariani, P.	20	M2	05	193	Mazzali, C.	19	T1	E02	249
Mariette, H.	19	M2	01	292	Mazzali, C.	19	T1	E06	271
Mariz, A. M.	20	T1	E03	158	Mazzaro, I.	20	M1	10	335
Mariz, A. M.	19	T1	E05	142	Mazzocchi, V.	19	T1	E01	216
Marques, G. E.	20	T1	E07	304	Mazzocchi, V. L.	19	T1	E13	113
Marques, C.	19	M1	04	280	Mcelfresh, M.	20	T1	E02	233
Marques, F. das C.	19	T1	E08	109	Meckenstock, R.	19	T1	E01	217
Marques, J. F.	19	T1	E11	94	Medeiros Neto, J. A.	19	T1	E03	294
Marquezini, M. V.	20	T1	E04	183	Medeiros Neto, J. A. de	19	T1	E02	249
Martinez, E. C.	19	T1	E10	324	Medeiros-Ribeiro, G. de	21	T1	E03	315
Martinez, G.	21	T1	E13	330	Medeiros, D.	20	T1	E01	227
Martinez, G.	21	T1	E13	329	Medeiros, S. M. de	20	T1	E07	304
Martinez, G.	19	M1	08	319	Medina Neto, A.	20	T1	E02	232
Martini, M.	20	M1	04	274	Medina Neto, A.	20	T1	E11	286
Martins, C. S.	19	T1	E01	220	Medina Neto, A.	20	M1	02	281
Martins, G. B.	20	M1	02	281	Medugno, A. C.	19	T1	E10	323
Martins, J. V.	20	M1	10	336	Mello, D. F. de	20	T1	E02	231
Martins, M.	21	M2	05	289	Mello, E. V. L. de	21	T1	E11	168
Martins, M. E. Q.	21	M1	10	99	Mello, J. L. N. de	20	M2	03	221
Martins, M. L.	20	T1	E03	155	Mello, L. A. D.	21	T1	E01	240
Martins, M. L.	20	T1	E03	154	Mello, S. V.	19	T1	E06	274
Martins, M. L.	21	M1	03	159	Melo, C. P. de	21	M2	02	278
Martins, O. G.	21	T1	E07	196	Melo, C. P. de	21	M1	02	277

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Melo, C. P. de	20	M1	04	275	Miwa, R. H.	20	T1	E06	306
Melo, C. P. de	21	M1	02	277	Miyakawa, W.	20	T1	E04	184
Melo, F. E. A.	20	M1	12	116	Mizrahi, S.	21	M1	07	82
Melo, F. E. A.	20	M2	12	117	Mizrahi, S. S.	19	T1	E02	246
Melo, F. E. de A.	19	T1	E02	249	Mizrahi, S. S.	21	T1	E11	168
Melo, F. E. de A.	21	T2	04	358	Mizrahi, S. S.	21	T1	E11	167
Melo, G. da S. V. de	20	M2	04	148	Mizrahi, S. S.	21	T1	E11	167
Mendes Filho, J.	19	T1	E13	113	Mizrahi, S. S.	21	T1	E11	167
Mendes Filho, J.	19	T1	E08	107	Moehlecke, S.	21	M1	11	327
Mendes Filho, J.	21	M2	12	120	Mohallem, N. D. S.	21	M2	12	120
Mendes Filho, J.	21	T2	04	358	Mokross, B. J.	21	M2	12	121
Mendes Filho, J.	19	T1	E02	249	Mombach, J. C. M.	21	M1	03	160
Mendonca, C.	21	T1	E01	239	Monaco, R. E. L.	20	T1	E09	81
Mendonca, C. A. C. de	20	T1	E07	303	Monaco, R. E. L.	21	T1	E11	166
Mendonca, J. P. R. F. de	21	T1	E02	264	Mondragon, J. C. T.	19	T1	E10	322
Meneses, E. A.	19	T1	E03	294	Montarroyos, E.	20	T1	E02	228
Meneses, E. A.	20	T1	E07	303	Monteiro, H. S.	19	M1	06	243
Menezes Sobrinho, I. L.	21	T1	E09	162	Monteiro, W. A.	20	T1	E12	208
Menezes, E. A.	20	T1	E07	303	Monteiro, W. A.	19	M1	09	199
Menezes, J. V. de	20	T1	E02	233	Montenegro, E. C.	20	M2	02	74
Menezes, L. de S.	20	T1	E04	184	Montenegro, E. C.	20	M2	02	74
Menezes, R. P.	20	T1	E11	283	Montenegro, F. C.	19	T1	E04	139
Mesquita, O. N. de	21	M1	03	159	Montenegro, F. C.	20	T1	E02	228
Messaddeq, Y.	21	M2	09	213	Montenegro, F. C.	21	T1	E01	236
Messaddeq, Y.	21	M2	09	212	Montenegro, F. C.	19	M1	03	136
Mestnik Filho, J.	19	T1	E09	201	Montenegro, F. C.	20	T1	E01	223
Mestnik Filho, J.	20	T1	E08	76	Montenegro, M.	20	M2	01	299
Micaroni, L.	20	M1	04	274	Montenegro, N.	21	M1	12	118
Micklitz, H.	19	M2	08	320	Montereali, R. M.	19	T1	E08	111
Milori, D. M. B. P.	20	T1	E08	78	Montereali, R. M.	20	T1	E09	80
Milori, D. M. B. P.	19	M1	07	72	Monzani, A. L.	21	T1	E04	125
Milori, D. M. B. P.	19	M1	07	71	Moraes, A. C. de	19	T1	E08	108
Milori, D. M. B. P.	21	T1	E12	86	Moraes, F.	21	T1	E04	126
Milori, D. M. B. P.	21	T1	E12	86	Moraes, F.	21	T1	E09	163
Minami, E.	21	T1	E03	318	Moraes, F.	21	T2	01	359
Mirage, A.	21	T1	E02	262	Moraes, F. J. S.	21	M2	07	84
Mirage, A.	21	M2	06	259	Moraes, I. J.	20	T1	E11	285
Mirage, A.	21	T1	E02	261	Moraes, I. J.	20	M1	02	282
Miranda Neto, J. A. de	21	T1	E09	163	Moraes, I. J.	19	M1	07	72
Miranda, C. T. de	19	T1	E07	181	Moraes, J. C. S.	21	M2	06	258
Miranda, J.	20	T1	E04	186	Moraes, J. C. S. de	21	T1	E02	262
Miranda, J. R.	20	M1	11	97	Moraes, J. C. S. de	19	T1	E04	139
Miranda, L. C. M.	21	M1	10	99	Moraes, J. N. B. de	21	T1	E05	345
Miranda, L. C. M.	20	T1	E11	284	Moraes, M. A. B. de	21	T1	E05	345
Miranda, M. G. M.	19	T1	E01	215	Moraes, M. A. B. de	21	T1	E07	195
Miranda, P. E. V.	20	M1	09	206	Morais, M. M. D.	20	T2	06	356
Miranda, R. M. N.	20	M2	10	337	Morais, M. M. D.	19	M1	12	191
Misoguti, L.	19	T1	E03	295	Morais, P. C. de	19	M1	12	191
Misoguti, L.	20	T1	E07	302	Morais, P. C. de	19	T1	E13	113
Misoguti, L.	19	T1	E03	296	Morato, S. P.	21	M1	12	119
Misoguti, L.	21	T1	E03	313	Morato, S. P.	21	T1	E02	260
Missell, F. P.	19	T1	E01	216	Morato, S. P.	19	T1	E08	111
Missell, F. P.	19	T1	E01	217	Morato, S. P.	19	T1	E08	108
Mitani, S. E.	21	T1	E05	348	Morato, S. P.	21	T1	E02	265
Mitteregger, L. M. F. G.	21	T1	E04	121	Morato, S. P.	21	T1	E02	260
Mitzi, D. B.	21	M1	11	327	Moreira, E. N.	21	M1	12	119

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Moreira, F. G. B.	19	T1	E04	141	Nakamura, O.	19	T1	E09	204
Moreira, F. M. A.	19	T1	E10	322	Nakamura, O.	20	T1	E12	208
Moreira, J. E. C.	21	T2	04	358	Nakamura, O.	19	M1	08	319
Moreira, J. E. de C.	19	T1	E02	249	Namontov, I. V.	21	T1	E06	342
Moreira, J. G.	21	T1	E09	162	Nascente, P. A. de P.	21	T1	E06	344
Moreira, J. G.	20	T1	E05	149	Nascente, P. A. de P.	21	T1	E06	344
Moreira, J. G.	21	T1	E09	162	Nascente, P. A. de P.	19	M1	05	332
Moreira, J. G.	21	T1	E09	162	Nascente, P. A. de P.	19	M1	05	332
Moreira, L. de F.	21	T1	E01	237	Nascimento, A. E. do	19	T1	E08	109
Moreira, M.	21	T1	E08	103	Nascimento, G. C. do	19	M1	04	281
Moreira, M. V. B.	21	T1	E03	316	Nascimento, G. C. do	19	M2	10	175
Moreira, R. L.	21	M2	12	120	Nascimento, G. C. do	19	T1	E07	177
Moreira, R. L.	19	T1	E06	273	Nascimento, J. F.	20	T1	E11	287
Moreira, S. G. C.	20	M1	12	116	Nascimento, M. A. C.	21	M2	07	84
Moreira, S. G. C.	20	M2	12	117	Nascimento, M. A. C.	19	M1	02	266
Moreno, J. D.	19	T1	E13	113	Nascimento, O. R.	21	M2	02	278
Morgoon, V.	19	T1	E01	220	Nascimento, O. R.	20	M1	04	276
Morgoon, V. N.	20	T1	E02	232	Nascimento, O. R.	20	T1	E11	284
Morosini, M. B. Z.	21	T1	E02	261	Nastaushev, Y. V.	19	M2	01	292
Mors, P. M.	20	M1	10	335	Neirotti, J. P.	21	T1	E11	168
Mors, P. M.	21	T1	E06	340	Neri, J. W.	21	T1	E02	262
Moruzzi, G.	19	M1	07	72	Neta, E. C. de R.	20	M1	09	206
Mosca Jr, D. H.	20	M1	10	335	Neto, J. M.	21	T1	E01	237
Mosca, D. H.	21	T1	E06	339	Neugebauer, M.	19	M1	05	333
Mota, R.	21	M1	07	83	Neves, A. C. D.	19	T1	E11	92
Mota, R. P.	21	T1	E05	345	Neves, J. M. C.	19	T1	E08	107
Moura Filho, J. J. de	21	T1	E12	87	Neves, U. P. da C.	20	T1	E05	151
Moura Filho, J. J. de	21	T1	E12	88	Nicola, J. H.	21	T1	E05	345
Moura, J. A. S.	21	M1	04	234	Nicolosky, R.	19	T2	01	352
Moura, J. I. de	19	T1	E09	201	Nikitov, S. A.	20	M1	02	281
Moura, J. I. de	20	T1	E08	76	Nikitov, S. A.	20	T1	E11	284
Moura, M. A. de	19	T1	E02	251	Nilsson, S.	19	M1	01	290
Moura, M. A. de	20	T1	E10	255	Nishiyama, L.	19	T1	E07	181
Moussa, M. H. Y.	19	T1	E02	246	Nishiyama, S.	21	T1	E06	343
Moussa, M. H. Y.	21	T1	E11	168	Nobre, F.	21	T1	E10	169
Mu-Tao, L.	20	T1	E09	80	Nobre, F. D.	20	T1	E03	158
Mu-Tao, L.	20	T1	E09	80	Nobre, F. D.	19	T1	E05	142
Mu-Tao, L.	20	T1	E09	80	Nobre, F. D.	21	T1	E10	171
Mu-Tao, L.	20	T1	E09	81	Nobre, F. D.	21	T1	E10	171
Mukherjee, P.	21	M1	07	83	Nobre, F. D.	21	T1	E10	170
Mulato, M.	21	T1	E03	317	Nobrega, B. N.	19	M2	05	334
Mulato, M.	21	T1	E03	317	Nogueira Junior, E.	21	T1	E10	169
Mundin, K. C.	21	T1	E08	101	Nogueira, J. de S.	19	T1	E06	268
Mundin, K. C.	19	M2	11	90	Nogueira, R.	19	T1	E05	143
Muniz, R. B.	21	M2	04	235	Notari, A. C.	19	T1	E03	294
Muniz, R. B.	20	T1	E02	230	Novackoski, V.	21	T1	E06	340
Muniz, R. B.	20	T1	E02	231	Novak, M. A.	19	M2	04	214
Muramatsu, M.	21	T1	E02	262	Novak, M. A.	19	T1	E01	219
Muribeca, R. A.	21	T1	E05	345	Novak, P.	19	T1	E01	217
Nagai, E. Y.	21	T1	E12	85	Nunes, A. C.	20	T1	E06	307
Nagai, Y. E.	20	T1	E08	77	Nunes, C. B.	19	M1	08	320
Nagamine, L. C. M. M.	19	M2	04	214	Nunes, F. D.	19	M1	06	243
Nagashima, H. N.	19	T1	E06	273	Nunes, F. D.	21	M2	12	120
Nagashima, H. N.	19	T1	E06	270	Nunes, F. D.	21	T2	04	358
Nahory, R. E.	21	M2	01	311	Nunes, R. A.	21	M2	09	212
Nakagaito, A. N.	20	T1	E07	302	Nunes, R. A.	21	M1	12	118

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Nunes, R. A.	19	T1	E08	111	Oliveira, L. N. de	20	T1	E01	224
Oberli, D.	19	M2	01	291	Oliveira, M. C. de	20	T1	E05	150
Ogata, K.	21	T1	E06	341	Oliveira, M. I. T. de	20	M1	12	116
Ogata, K.	21	T1	E06	343	Oliveira, M. I. T. de	19	M1	04	281
Ohmura, Y.	20	M2	03	222	Oliveira, M. I. T. de	21	T1	E04	123
Oiwa, N. N.	20	T1	E03	155	Oliveira, M. J. de	21	T1	E11	168
Oiwa, N. N.	21	T1	E08	100	Oliveira, M. J. de	19	M2	03	137
Okuno, E.	19	T1	E13	113	Oliveira, N. A. de	20	T1	E01	227
Okuno, E.	21	T1	E04	125	Oliveira, N. T.	21	T1	E06	344
Okuno, E.	21	M2	12	120	Oliveira, P. M. C. de	19	M2	03	137
Oliva, G.	19	T1	E12	127	Oliveira, P. M. C. de	21	T1	E10	171
Oliva, G.	20	M1	05	129	Oliveira, P. M. C. de	19	T1	E04	140
Oliveira Jr, A. T.	20	T1	E07	303	Oliveira, P. M. C. de	20	T1	E03	155
Oliveira Jr, N. F.	19	T1	E07	177	Oliveira, P. M. C. de	19	T1	E05	145
Oliveira Jr, N. F.	19	T1	E07	177	Oliveira, P. M. C. de	20	T1	E03	155
Oliveira Jr, N. F.	19	T1	E07	176	Oliveira, R. B.	20	M1	11	97
Oliveira Jr, O. N.	19	T1	E06	274	Oliveira, S. M. de	20	T1	E03	155
Oliveira Jr, O. N.	19	T1	E06	270	Oliveira, S. M. de	21	M2	09	212
Oliveira, A. C. de	19	T1	E10	322	Oliveira, S. M. de	19	T1	E05	145
Oliveira, A. C. de	20	T1	E04	184	Oliveira, V. S.	20	T1	E11	286
Oliveira, A. C. de	19	T1	E01	215	Oliveira, W. C. de	20	M2	03	221
Oliveira, A. C. de	20	T1	E04	188	Olivieri, J. R.	19	T1	E11	91
Oliveira, A. de	20	T1	E07	300	Olzon-Dionysio, M.	21	T1	E01	237
Oliveira, A. de	20	T1	E07	303	Onari, S.	21	T1	E05	346
Oliveira, A. G. de	20	T1	E07	304	Onody, R. N.	20	T1	E05	152
Oliveira, A. G. de	19	T1	E03	293	Onody, R. N.	20	T1	E05	151
Oliveira, A. G. de	21	T1	E03	315	Onori, S.	20	M1	02	282
Oliveira, A. G. de	21	T1	E03	314	Onuchic, J. N.	21	T1	E08	100
Oliveira, A. G. de	21	T1	E03	314	Oppenheim, I.	19	T1	E01	217
Oliveira, A. G. de	20	M1	01	298	Orellana, W. M.	21	T1	E03	312
Oliveira, A. J. A. de	21	T1	E01	241	Oria, M.	19	M1	07	71
Oliveira, C. R. M. de	19	T1	E03	294	Oria, M.	21	M2	06	258
Oliveira, E. A. de	19	M1	12	190	Oria, M.	19	T1	E02	248
Oliveira, E. A. de	21	T1	E07	196	Oria, M.	20	T1	E10	256
Oliveira, F. A. M. de	20	M2	06	254	Ornellas, F. R.	19	M1	02	266
Oliveira, F. A. M. de	20	M1	06	252	Ortiz, J. F. S.	20	M1	12	115
Oliveira, F. F. de	20	T1	E02	229	Ortiz, W. A.	19	M1	10	173
Oliveira, F. F. de	20	T1	E02	229	Ortiz, W. A.	19	T1	E10	322
Oliveira, I. G. de	19	M1	08	320	Ortiz, W. A.	19	T1	E07	178
Oliveira, J. B.	20	T1	E07	301	Ortiz, W. A.	21	T1	E01	241
Oliveira, J. B. B.	20	T1	E07	301	Osorio, R.	20	T1	E06	307
Oliveira, J. B. B. de	20	T1	E07	303	Osorio, R.	19	T1	E04	140
Oliveira, J. de	19	T1	E01	220	Otani, Y.	19	T1	E01	219
Oliveira, J. R. de	19	T1	E02	251	Otero, D.	21	T1	E11	168
Oliveira, L.	19	T1	E13	114	Pacheco, M. T. T.	20	M2	07	183
Oliveira, L.	20	M1	12	117	Pacheco, M. T. T.	19	M1	10	174
Oliveira, L.	20	M1	12	116	Pacobahyba, L. H.	19	M1	04	281
Oliveira, L.	19	T1	E06	268	Padmanabhan, K.	21	M1	08	134
Oliveira, L. C.	19	M2	06	244	Padmanabhan, K. P.	21	M1	08	134
Oliveira, L. de	21	T1	E03	318	Padua, A. de	21	T1	E09	163
Oliveira, L. de	20	M2	03	221	Paduan-Filho, A.	19	M1	03	135
Oliveira, L. E.	20	M2	01	299	Pagnano, C. A. G.	21	T1	E04	125
Oliveira, L. E.	19	M1	01	290	Paixao, F. J. da	19	M2	07	73
Oliveira, L. E.	20	M2	01	300	Paixao, F. J. da	20	T1	E09	79
Oliveira, L. M. de	21	T1	E08	102	Palacio, F.	19	M1	03	135
Oliveira, L. N.	21	M2	10	338	Palandi, J.	20	T1	E03	154

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Palangana, A. J.	21	T1	E07	194	Pendl Junior, W.	21	T1	E01	237
Palangana, A. J.	21	T1	E07	194	Pendl Junior, W.	21	T1	E01	237
Palange, E.	19	T1	E02	249	Pendl Junior, W.	19	T1	E09	201
Palange, E.	19	T1	E02	249	Penna, A.	20	M2	06	254
Palange, E.	19	T1	E06	271	Penna, A. F. S.	20	T1	E08	77
Panepucci, H.	20	T1	E11	284	Penna, A. F. S.	21	T1	E12	85
Panepucci, H.	21	M2	05	289	Penna, T. J. P.	19	M2	03	137
Panepucci, H. C.	20	M1	02	283	Penna, T. J. P.	21	T1	E10	171
Panepucci, H. C.	20	T1	E11	287	Penna, T. J. P.	20	T1	E03	155
Pannetier, B.	19	T1	E01	219	Penna, T. J. P.	20	T1	E03	155
Paola, J. C. C. D.	20	M1	09	206	Penna, T. J. P.	20	T1	E03	158
Parente, C. B. R.	19	T1	E13	113	Peratello, S. H.	20	M1	09	205
Parente, C. B. R.	19	T1	E01	216	Pereira Jr, M. F.	19	T1	E02	246
Parente, C. B. R.	19	M2	09	201	Pereira Jr, M. F.	19	T1	E03	297
Parma, M.	20	T1	E04	187	Pereira Jr, M. F.	19	T1	E03	297
Partiti, C. S. M.	19	T1	E01	216	Pereira, A. C.	21	M1	10	99
Partiti, C. S. M.	20	T1	E11	287	Pereira, D.	21	M2	06	258
Pasa, A. A.	19	M1	05	333	Pereira, D.	21	T1	E02	262
Pascoal, H. B.	21	T1	E03	313	Pereira, D.	19	M1	07	72
Pascual, M. F.	19	T1	E05	145	Pereira, D.	21	T1	E02	261
Pascual, M. F.	19	T1	E05	143	Pereira, D.	20	T1	E04	187
Pascutti, P. G.	21	T1	E08	101	Pereira, D.	20	M1	06	253
Pascutti, P. G.	19	M2	11	90	Pereira, D.	19	M1	07	71
Pashley, M. D.	20	T2	04	355	Pereira, D.	21	T1	E02	261
Passamani, E.	19	T1	E01	218	Pereira, D.	21	M2	06	259
Passamani, E. C.	19	T1	E01	218	Pereira, D.	21	T1	E02	261
Passos, F. B.	19	M1	05	332	Pereira, E. C.	21	M2	02	278
Passos, M. E. A.	20	T1	E02	228	Pereira, E. C.	20	M1	04	276
Pastawski, H. M.	21	M1	01	310	Pereira, J. A. de A. M.	19	T1	E01	217
Pastoriza, H.	21	M1	11	327	Pereira, J. A. M.	21	T1	E12	87
Patel, N. B.	21	T1	E02	261	Pereira, J. A. M.	21	T1	E12	88
Paula, A. M. de	19	T1	E03	293	Pereira, R. A. R.	21	T1	E07	197
Paula, A. M. de	19	M1	01	290	Perelmuter, G.	19	M2	06	245
Paula, C. A. D.	21	T1	E06	342	Peres, R. C. D.	20	M1	04	274
Paula, E. de	20	T1	E11	285	Perez, C. A. S.	21	T1	E01	236
Paula, G. L. S.	20	T1	E03	157	Periotto, R.	20	M1	11	96
Paula, R. de	19	T1	E06	273	Persiano, A. I. C.	21	T1	E01	239
Pavao, A. C.	19	T1	E10	324	Persiano, A. I. C.	21	T1	E01	238
Pavao, A. C.	19	T1	E10	324	Perzynski, J. B.	21	T1	E07	198
Pavao, S.	19	M1	10	174	Pessoa, J. D. C.	19	T1	E07	178
Pawlicka, A.	21	M2	02	278	Petraconi Filho, G.	21	T1	E05	346
Pawlicka, A.	19	T1	E06	270	Petri, A.	21	T1	E09	164
Pawlicka, A.	20	M1	04	276	Petrilli, H. M.	21	T1	E01	240
Pedrini, C.	19	T1	E13	114	Petrilli, H. M.	21	T1	E01	236
Pedroso, C. B.	19	T1	E09	204	Peyla, P.	19	M2	01	292
Peduto, P. R.	21	T1	E06	342	Peytavin, S.	19	T1	E09	203
Peiro, G. P.	21	T1	E02	265	Piano, E.	19	T1	E13	113
Pelatti, I.	20	M1	11	96	Pilla, O.	21	M2	09	213
Pelegri, F.	19	M1	12	191	Pimenta, M. A.	19	T1	E13	115
Pelegri, F.	19	M1	12	191	Pimenta, M. A.	21	T1	E09	164
Pelegri, F.	19	T1	E06	273	Pimenta, M. A.	21	T1	E09	163
Pelzl, J.	19	T1	E01	217	Pimentel, R.	20	T1	E04	187
Pena, A. F. V.	19	T1	E08	107	Pinatti, D. G.	19	M1	08	320
Pena, A. F. V.	21	T1	E08	105	Pinhal, N. M.	21	T1	E08	103
Penaforte, J. C.	20	T1	E10	256	Pinkse, P.	20	T1	E07	301
Pena, M. J. F.	20	T1	E05	153	Pinto, A. V. de A.	21	T1	E07	196

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Pinto, A. V. de A.	21	T1	E07	194	Quintale Junior, C.	20	T1	E05	148
Pinto, N. M. A. C.	19	M2	11	90	Quivy, A. A.	19	T1	E08	111
Piolho, F. A. P.	21	T1	E10	171	Rabbani, S. R.	20	M1	12	116
Piquini, P. C.	20	M2	01	300	Rabbani, S. R.	19	M1	04	281
Piquini, P. C.	20	T1	E08	78	Rabbani, S. R.	21	T1	E04	123
Pires., A. S.	19	T1	E04	141	Rabbani, S. R.	19	M1	04	280
Pires, A. S. T.	20	T1	E01	224	Rabello, L. M.	20	T1	E04	186
Pires, A. S. T.	20	T1	E01	223	Rabelo, A. P. B.	21	T1	E03	315
Pires, A. S. T.	20	T2	03	354	Rabelo, J. N. T.	19	T1	E05	144
Pires, M. P.	20	T1	E07	302	Rabelo, J. N. T.	19	T1	E05	144
Pizani, P. S.	21	T1	E03	315	Rabelo, J. N. T.	19	T1	E05	143
Pizani, P. S.	21	T1	E04	122	Raggio, G. A.	21	T1	E11	168
Pizzani, P. S.	19	T1	E03	294	Raimond, J. M.	20	M1	06	252
Planas, S. A.	19	T1	E06	271	Rainer, D.	19	T2	01	352
Planas, S. A.	19	T1	E06	272	Ramos, A. S.	19	T1	E10	324
Planas, S. S.	19	T1	E02	249	Ramos, A. S.	21	M2	11	328
Plascak, J. A.	19	T1	E05	146	Randi, S.	20	M2	06	254
Plascak, J. A.	19	T1	E05	143	Rand, R. P.	21	T2	06	359
Plascak, J. A. A. O.	20	T1	E03	156	Ranieri, I. M.	21	T1	E02	260
Plentz Filho, F. O.	19	T1	E03	294	Ranieri, I. M.	19	T1	E08	111
Plentz, F.	20	T1	E07	303	Ranieri, I. M.	21	T1	E02	260
Plon, J.	20	T1	E10	255	Raposo, E. P.	19	T1	E04	139
PolICASTRO, A. P.	20	T1	E09	80	Raposo, M. T.	21	T1	E01	239
PolICASTRO, A. P.	19	M2	07	73	Rapp, R. E.	19	M2	04	215
Politis, C.	19	T1	E10	324	Recami, E.	21	T1	E11	166
Pontiggia, C.	19	T1	E13	113	Rechenberg, H. R.	20	M1	09	206
Pontuschka, W. M.	20	M1	12	116	Rechenberg, H. R.	19	T1	E01	216
Pontuschka, W. M.	20	T1	E11	283	Rechenberg, H. R.	19	M2	04	214
Pontuschka, W. M.	21	T1	E04	123	Redinz, J. A.	21	T1	E09	164
Pontuschka, W. M.	19	M1	04	280	Reggiani, A. E.	19	T1	E02	249
Portal, J. C.	20	T1	E07	301	Reggiani, A. E.	19	T1	E06	271
Prado, C. P. C. do	21	T1	E09	162	Reggiani, A. E.	19	T1	E06	272
Prado, L.	21	T1	E04	122	Reggiani, A. E.	19	M2	02	267
Prado, L.	19	T1	E08	108	Reggiani, L.	19	M2	08	321
Presa, P. de	21	T1	E04	124	Rego, A. C. B.	19	M1	06	243
Presa, P. de la	19	T1	E08	109	Rego, A. C. B.	21	M1	06	257
Procopio, J.	21	T1	E08	104	Rego, L. G. C.	20	T1	E06	306
Procopio, J.	21	T1	E08	101	Rego, L. G. C.	20	T1	E07	302
Prokofief, V. V.	19	M1	06	244	Reich, S.	19	T1	E10	325
Prokofiev, V. V.	19	T1	E08	106	Reich, S.	20	M2	11	325
Prokofiev, V. V.	19	T1	E08	106	Reigada, D. C.	21	T1	E02	263
Pudensi, M. A. A.	21	T1	E03	313	Reinehr, E.	19	T1	E04	139
Punte, G.	19	T1	E12	128	Reis, F. D. A. A.	20	M2	04	147
Pureur, P.	20	M2	11	325	Reis, L. M. dos	21	T1	E08	99
Pureur, P.	19	T1	E10	325	Ren, T. I.	20	T1	E03	157
Pureur, P.	20	M2	11	325	Resende, H. F. V. de	19	T1	E04	138
Pureur, P.	21	M2	11	328	Rettori, C.	20	M1	02	281
Pureur, P.	19	T1	E10	321	Revoredo, W. C.	20	M2	06	254
Pusiol, D. J.	20	T1	E11	287	Reynoso, V. C.	20	M2	12	118
Pusiol, D. J.	19	M1	04	280	Reynoso, V. C. S.	19	T1	E13	112
Pusiol, D. J.	19	M1	04	280	Reynoso, V. C. S.	19	T1	E13	115
Quadros, S. G. de A.	19	T1	E04	140	Rezende, S. M.	20	T1	E02	228
Queiroz, F. H.	20	T1	E04	186	Rezende, S. M.	21	M2	03	160
Queiroz, J. R. O.	19	T1	E09	201	Rezende, S. M.	21	M1	04	234
Quintale Junior, C.	20	T1	E05	149	Rezende, S. M.	21	T1	E01	236
Quintale Junior, C.	20	T1	E05	151	Riano, L. P. N.	20	M1	10	336

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Ribeiro, A. L.	21	T1	E02	260	Rossi, A. M.	21	T1	E08	103
Ribeiro, E.	19	T1	E03	294	Rossi, J. C.	19	T1	E03	297
Ribeiro, E. M. S.	20	T1	E09	80	Rossi, J. C.	21	T1	E03	313
Ribeiro, E. M. S.	20	T1	E09	80	Rossi, J. C.	20	T1	E07	301
Ribeiro, G. M.	20	T1	E07	304	Rossi, J. C.	20	M1	01	299
Ribeiro, G. M.	21	T1	E03	314	Rossi, J. C.	19	T1	E03	294
Ribeiro, R. M.	19	T1	E03	296	Rossi, J. C.	20	T1	E07	301
Ribeiro, R. M.	20	M2	07	182	Rossi, J. C.	20	T1	E07	301
Ribeiro, W. de S.	20	T1	E13	132	Rossi, W. de	21	T1	E02	260
Riedi, P. C.	21	T1	E01	238	Rossler, J.	21	M1	02	276
Riegel, D.	19	T2	03	350	Roth, A. P.	19	T1	E03	294
Riera, R.	20	M2	04	147	Roux, S.	21	M2	03	161
Rigby, S. E. J.	20	M1	11	96	Rovira, P. I.	19	T1	E08	111
Righi, A.	19	T1	E02	248	Rubim, J. C.	19	M2	05	334
Righi, A.	19	T1	E02	248	Rubo, E. A. A.	20	T1	E12	210
Rino, J. P.	20	T1	E05	153	Ruffino, M.	20	M1	02	282
Rino, J. P.	20	T1	E05	150	Ruffino, M. S. P.	19	T1	E07	176
Ritz, D.	19	T1	E08	110	Ruggiero Neto, J.	21	T1	E08	104
Riul Jr, A.	19	T1	E06	274	Ruggiero Neto, J.	21	M1	10	98
Rivera, A. R.	20	T1	E02	228	Ruggiero Neto, J.	21	T1	E08	102
Rivero, B. E.	19	T1	E12	128	Runho, A.	20	T1	E07	301
Roccatto, A.	19	T1	E01	216	Runho, A.	20	T1	E07	301
Rocco, A. M.	20	M1	04	274	Ruocco, G.	21	T1	E09	164
Rocco, M. T. M.	21	T1	E02	264	S. Neto, J. J.	20	T1	E08	75
Rocha Filho, T. M. da	20	T1	E08	75	Saab, S. da C.	20	T1	E11	284
Rocha Filho, T. M. da	20	T1	E03	158	Sabioni, A. C. S.	20	T1	E12	208
Rodrigues Jr, P.	20	M2	11	325	Saenger, J. F.	19	T1	E01	218
Rodrigues Jr, P.	20	M2	11	325	Saito, M.	20	T1	E07	303
Rodrigues Junior, P.	21	M2	11	328	Saitovitch, H.	19	M1	05	332
Rodrigues, A. M. G. D.	19	T1	E09	201	Saito, Y.	20	T1	E02	233
Rodrigues, A. R.	19	T1	E07	177	Sakai, T.	21	T1	E06	343
Rodrigues, A. R.	19	T1	E07	177	Sakamoto, W. K.	19	T1	E06	273
Rodrigues, A. R. D.	19	T1	E07	178	Sakamoto, W. K.	19	T1	E06	270
Rodrigues, C.	20	T1	E06	307	Sakane, K. K.	21	T1	E12	86
Rodrigues, E.	21	T1	E02	262	Salem-Sugui Jr, S.	21	M2	11	328
Rodrigues, E. S.	19	T1	E04	140	Sales, J. A.	20	T1	E03	155
Rodrigues, K. C.	19	T1	E01	216	Sales, T. R. de M.	20	T1	E03	157
Rodrigues, N. A. S.	21	T1	E02	262	Sales, T. R. de M.	21	T1	E09	162
Rodrigues, N. A. S.	21	T1	E02	260	Salgado, E. G. C.	21	T1	E04	125
Rodrigues, N. A. S.	21	M1	06	258	Salgado, E. G. C.	19	M2	05	334
Rodrigues, P. A. M.	19	T1	E03	293	Salinas, S. R. A.	21	T1	E10	169
Rodrigues, S. G.	20	T1	E01	224	Salinas, S. R. A.	19	T1	E04	138
Rodrigues, V. A.	20	T1	E12	208	Salinas, S. R. A.	19	T1	E05	146
Rodriguez, V. A. P.	19	T1	E01	218	Salinas, S. R. de A.	19	T1	E04	140
Rojas, R. F.	19	T1	E13	112	Salvadori, M. C.	21	M1	12	119
Rojas, R. F.	19	T1	E13	115	Salvador, V. L. R.	21	T1	E05	348
Rojas, R. F. C.	20	M2	12	118	Sampaio, A. J. da C.	19	T1	E03	295
Romano, A.	21	T1	E02	263	Sampaio, J. de	20	T1	E07	304
Romano, J. A.	20	M1	02	281	Sampaio, L. C.	19	T1	E01	219
Romano, J. A.	20	T1	E11	284	Samuelson, L.	19	M1	01	290
Romero, E.	19	M1	04	280	Sanches, M. P. R.	19	T1	E02	249
Rossi, A. M.	21	T1	E08	103	Sanches, M. P. R.	19	T1	E06	271
Rossi, A. M.	20	M1	11	96	Sanches, M. P. R.	19	M2	02	267
Rossi, A. M.	21	T1	E08	103	Sanches, R.	21	M1	10	98
Rossi, A. M.	21	T1	E08	102	Sanchez, M. P. R.	19	T1	E06	272
Rossi, A. M.	20	T1	E11	285	Sano, W.	20	T1	E11	286

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Sant'Anna, M. M.	20	M2	02	74	Scalabrin, A.	20	M1	06	253
Santana Filho, L. C.	20	T1	E06	308	Scalabrin, A.	19	M1	07	71
Santana, R. C.	21	T1	E04	125	Scalabrin, A.	21	T1	E02	261
Santiago, R. B.	20	M2	01	300	Scalabrin, A.	21	M2	06	259
Santin Filho, O.	20	M2	05	193	Scalabrin, A.	21	T1	E02	261
Santo, A. M. E.	19	T1	E08	111	Scalvi, L. V. de A.	21	T1	E03	318
Santoro, M. M.	19	M1	11	89	Schaf, J.	20	M2	11	325
Santos, A. D. dos	19	T1	E01	219	Schaf, J.	21	M2	11	328
Santos, A. D. dos	21	M2	04	235	Schaf, J.	19	T1	E10	321
Santos, A. M. M. dos	20	T1	E12	208	Schelp, L. F.	21	M1	04	234
Santos, C. A. dos	20	M2	10	337	Schelp, L. F.	19	T1	E01	221
Santos, C. A. dos	21	M2	04	235	Scherer, C.	20	M2	10	337
Santos, C. A. dos	21	M1	04	234	Scherer, C.	21	M1	09	211
Santos, C. B. dos	20	T1	E05	152	Scherer, C.	19	T1	E01	220
Santos, C. de O. P.	20	T1	E13	132	Scherer, C.	21	T1	E11	166
Santos, C. de O. P.	20	T1	E13	131	Schettini, C.	19	T1	E07	177
Santos, C. G. dos	20	M1	04	275	Schilling, O. F.	21	M1	11	327
Santos, D. I. dos	20	T1	E12	210	Schlenker, M.	19	T1	E01	219
Santos, F. L. dos	21	M2	02	278	Schmerber, G.	20	T1	E02	229
Santos, J. G. dos	19	M1	04	280	Schmidt, J. E.	19	T1	E07	179
Santos, J. H. R. dos	21	M1	09	211	Schmidt, J. E.	21	T1	E06	339
Santos, M. B. F.	19	T1	E09	204	Schmidt, J. E.	19	T1	E07	176
Santos, M. B. L.	21	T1	E07	195	Schmidt, J. E.	21	M1	04	234
Santos, M. B. L.	21	T1	E07	195	Schmidt, J. E.	21	T1	E06	340
Santos, M. C. dos	21	M1	02	276	Schmidt, J. E.	20	M1	10	335
Santos, M. C. dos	19	T1	E06	270	Schmidt, J. E.	19	T1	E01	221
Santos, M. C. dos	21	M1	02	277	Schmidt, T. M.	21	T1	E03	317
Santos, M. C. dos	20	M1	03	147	Schmidt, T. M.	21	T1	E03	316
Santos, M. dos	20	T1	E04	185	Schramm, D. U. da S.	21	T1	E08	103
Santos, M. S.	21	M2	06	258	Schreier, S.	19	T1	E11	94
Santos, M. S.	21	T1	E12	87	Schreier, S.	20	T1	E11	285
Santos, P. E. dos	21	M2	12	120	Schreiner, W.	19	T1	E01	217
Santos, R. J. V. dos	19	T1	E04	141	Schreiner, W.	20	M2	10	338
Santos, R. R. dos	21	T1	E11	165	Schreiner, W. H.	21	T1	E06	339
Santos, R. R. dos	21	T1	E11	165	Schreiner, W. H.	20	M1	10	335
Santos, R. R. dos	20	M1	03	147	Schreiner, W. H.	21	T1	E06	340
Santos, R. T. dos	21	T1	E07	198	Schreiner, W. H.	21	T1	E05	347
Santos, V. H. F. dos	20	M1	09	206	Schreiner, W. H.	21	T1	E06	340
Sa, P. C. A.	19	T1	E10	324	Schreiner, W. R.	21	M1	04	234
Sarma, S. D.	19	M1	01	291	Schuller, I. K.	19	M1	08	319
Sarthour, R.	21	T1	E01	238	Schuller, I. K.	19	T1	E10	325
Sartorelli, J. C.	20	T1	E11	283	Schulz, P. A.	21	M1	01	309
Sartori, C. S.	20	T1	E09	79	Schulz, P. A.	20	T1	E06	305
Sato, I. M.	21	T1	E05	348	Schwab, C.	21	T1	E02	262
Satulovsky, J. E.	20	T1	E05	150	Schwarzburg, K.	21	T1	E05	347
Sauerwein, R. A.	21	T1	E11	168	Scorzelli, R. B.	20	T1	E02	233
Saul, C. K.	21	T1	E05	347	Scorzelli, R. B.	19	M2	08	320
Saxena, R. N.	21	T1	E01	237	Scorzelli, R. B.	20	T1	E02	233
Saxena, R. N.	21	T1	E01	237	Seifert, W.	19	M1	01	290
Saxena, R. N.	19	T1	E09	201	Selzer, S.	21	T1	E06	340
Saxena, R. N.	19	M2	09	200	Selzer, S.	20	T1	E05	152
Scalabrin, A.	21	M2	06	258	Sereni, J. G.	20	T1	E02	229
Scalabrin, A.	21	T1	E02	262	Sermage, B.	19	M1	01	290
Scalabrin, A.	19	M1	07	72	Severino, A. M.	19	T1	E01	216
Scalabrin, A.	21	T1	E02	261	Shah, M. B.	20	M2	02	74
Scalabrin, A.	20	T1	E04	187	Shapira, Y.	19	M1	03	135

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Sharipov, F.	20	T1	E03	157	Silva, M. I. N. da	20	T1	E07	300
Shelp, L. F.	21	T1	E06	339	Silva, M. P. da	19	M2	10	175
Shibli, S. M.	19	T1	E08	111	Silva, M. R. da	19	M2	12	192
Shibuya, C.	20	T1	E11	284	Silva, P. R. de J.	19	M1	05	332
Shi, D.	19	M2	08	321	Silva, R. B. da	20	M2	07	182
Shida, C. S.	19	T1	E11	93	Silva, R. B. da	20	T1	E04	187
Shigue, C. Y.	20	T1	E11	284	Silva, R. C. da	20	T1	E06	306
Shkadarevich, A. P.	21	M1	12	119	Silva, R. M.	20	T1	E13	131
Shukla, M. M.	20	T1	E02	232	Silva, R. T. da	21	T1	E10	169
Shukla, M. M.	20	T1	E02	231	Silva, S. W. da	21	T1	E03	315
Shukla, M. M.	19	T1	E09	202	Silva, W. J. da	21	M1	10	99
Shulz, P. A.	20	T1	E07	303	Silva, X. A. da	20	T1	E02	231
Sigaud, G. M.	19	M1	07	72	Silva, X. A. da	20	T1	E02	231
Sigaud, G. M.	20	M2	02	74	Silveira Jr, L.	20	T1	E04	183
Sigoli, F. A.	21	T1	E01	239	Silveira Jr, L.	20	M2	07	182
Silva Junior, E. F. da	19	M1	05	333	Silveira Jr, L.	20	T1	E04	187
Silva Junior, E. F. da	20	M2	01	299	Silveira, A. C. F. da	21	T1	E02	261
Silva Sobrinho, A. S. da	21	T1	E06	341	Silveira, E. F. da	21	T1	E05	349
Silva, A. de S.	19	T1	E02	247	Silveira, E. F. da	21	T1	E12	87
Silva, A. M. da	19	M1	10	174	Silveira, E. F. da	21	T1	E12	88
Silva, B. L. da	19	T1	E01	215	Silveira, H. V. da	20	T1	E05	149
Silva, C. C.	20	M1	09	205	Silveira, H. V. da	20	T1	E06	308
Silva, C. M. da	21	T1	E01	240	Simoes, A. S. da R.	21	T1	E13	330
Silva, C. R. S. da	21	M1	09	211	Simoes, A. S. da R.	20	T1	E01	224
Silva, E. A. de A. e	20	T1	E06	308	Simoes, M.	21	T1	E07	194
Silva, E. C.	20	M1	02	281	Singh, P.	21	T1	E13	330
Silva, E. C. da	19	T1	E01	217	Sinnecker, J. P.	19	T1	E01	218
Silva, E. C. da	19	M1	09	199	Siqueira, A. F.	21	T1	E09	163
Silva, E. G. da	20	T1	E02	233	Siqueira, F. C. S.	21	M2	03	160
Silva, E. P. da	20	T1	E09	79	Soares Neto, J. J.	20	M2	02	74
Silva, E. Z. da	21	M2	11	328	Soares, D. A. W.	21	T1	E03	314
Silva, F. L. B. da	20	T1	E05	148	Soares, E. A.	20	M1	10	336
Silva, G. J. da	19	M1	12	191	Soares, I. M.	20	T1	E04	188
Silva, H. F. da	21	M2	12	120	Soares, R. F.	21	T1	E10	171
Silva, I. R.	21	T1	E04	122	Sobral, R. R.	20	T1	E02	231
Silva, J. B. da	20	T1	E01	224	Sobral, R. R.	20	T1	E02	231
Silva, J. J. da	21	M2	07	84	Sobral, R. R.	21	T1	E01	240
Silva, J. K. L. da	21	T1	E09	162	Sobral, R. R.	21	T1	E08	103
Silva, J. K. L. da	21	T1	E09	162	Soeta, A.	21	M1	11	327
Silva, J. K. L. da	19	T1	E05	143	Sokolov, A. I.	19	T1	E10	324
Silva, J. L.	19	M1	11	89	Soltz, D.	19	M2	05	335
Silva, J. R. G.	19	T1	E09	201	Soltz, D.	21	T1	E05	347
Silva, J. R. G. da	21	M1	09	211	Sombra, A. S. B.	19	T1	E09	205
Silva, L. C. da	20	T1	E05	153	Sombra, A. S. B.	20	T1	E06	307
Silva, L. F. D.	19	T1	E09	202	Somma, F.	21	M2	09	212
Silva, L. R. da	21	M2	03	161	Somma, F.	21	M1	12	118
Silva, L. R. da	19	T1	E06	271	Somma, F.	19	T1	E08	111
Silva, M. A. A.	19	T1	E03	293	Sommer, R. L.	21	T1	E01	238
Silva, M. A. A. da	21	M2	03	160	Souche, Y.	19	T1	E01	219
Silva, M. A. A. da	21	T1	E08	104	Souche, Y.	21	M2	04	235
Silva, M. A. A. da	20	T1	E05	152	Sousa, A. A.	20	T1	E08	75
Silva, M. A. P.	20	M1	12	116	Sousa, A. J. F.	19	T1	E04	141
Silva, M. de A. P. da	21	T1	E06	344	Sousa, J. R. de	19	T1	E04	140
Silva, M. de F. da	19	M2	12	191	Sousa, P. L. de	19	T1	E07	180
Silva, M. de F. da	21	T1	E07	198	Sousa, P. L. de	20	M1	11	97
Silva, M. de F. da	19	M2	12	191	Sousa, P. L. de	20	M1	11	96

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Souto, A. A.	21	T1	E12	88	Suzuki, P. A.	19	T1	E10	323
Souto, A. L. C. F.	19	T1	E11	95	Suzuki, Y.	21	T1	E06	343
Souza Junior, P. A. DE	19	T1	E09	204	Svensson, S.	20	M1	04	275
Souza, A. M. C. de	21	M2	03	161	Svisero, D. P.	19	T1	E08	107
Souza, A. M. C. de	19	T1	E04	141	Swart, J. W.	21	T1	E03	314
Souza, A. M. C. de	20	T1	E03	154	Tabacniks, M. H.	20	M1	10	336
Souza, A. R. de	21	T1	E06	341	Tabak, M.	19	T1	E11	92
Souza, A. R. de	20	T1	E05	148	Tabak, M.	19	T1	E11	91
Souza, D. do N.	21	T1	E04	122	Tabosa, J. W. R.	21	T1	E02	260
Souza, E. P. de	19	M2	04	215	Tabosa, J. W. R.	20	M2	06	254
Souza, E. R. de	19	M2	11	90	Tagliaferri, A. A.	21	T1	E02	263
Souza, E. S.	20	T1	E03	158	Takahashi, H.	21	T1	E06	344
Souza, J. P. de	21	T1	E03	313	Takahashi, H.	21	T1	E06	344
Souza, J. P. de	21	T1	E03	314	Takenouti, H.	20	M1	04	275
Souza, M. A. R.	20	T1	E07	304	Takenouti, H.	19	T1	E06	273
Souza, M. A. S. de	20	T1	E08	76	Takeuchi, A. Y.	21	T1	E01	241
Souza, M. F. D.	21	M1	10	98	Tamargo, M. C.	21	M2	01	311
Souza, P. H. de	20	T1	E11	285	Tamarit, F. A.	20	T1	E03	154
Souza, P. L.	20	T1	E07	302	Tannus, A.	20	T1	E11	284
Souza, P. L. de	19	M1	01	290	Tannus, A.	20	M1	02	283
Souza, R. E. de	19	M1	04	281	Tannus, A.	21	M2	05	289
Souza, R. R. de	20	T1	E02	232	Tatsch, P. J.	19	T1	E08	106
Souza, R. R. de	20	M1	02	282	Tatumi, S. H.	19	T1	E08	112
Souza, S. D. de	21	T1	E01	237	Tatumi, S. H.	19	T1	E08	112
Souza, S. S.	21	T1	E04	124	Tavares, D.	19	T1	E06	271
Spada, G. P.	21	T1	E07	195	Tavares, M. R. da S.	20	T1	E07	304
Spada, G. P.	20	T2	06	356	Teixeira Filho, R. M.	21	M1	07	82
Speziali, N. L.	20	T1	E13	131	Teixeira, C.	20	M1	11	96
Speziali, N. L.	19	T1	E12	128	Teixeira, C. V.	20	M2	05	193
Spina, F. D.	20	T1	E04	183	Teixeira, S. R.	19	T1	E09	204
Spina, F. D.	20	T1	E04	188	Tejima, H.	19	T1	E09	201
Stanton, C. J.	21	M2	06	259	Tejima, H.	21	M1	09	211
Stefani, V.	21	T1	E12	88	Tejima, H.	19	T1	E09	203
Stein-Barana, A. C. M.	20	T1	E01	225	Tejima, H.	21	M1	09	211
Stilck, J. F.	20	T1	E05	151	Telles, E. M.	21	M2	06	258
Stipp, A. C. M.	20	M1	11	95	Telles, E. M.	21	T1	E02	262
Stroud, D.	21	M1	11	328	Tellez, D. L.	19	T1	E10	322
Stroud, D.	20	M2	11	326	ter-Haar, E.	19	T1	E07	177
Strumia, F.	19	M1	07	72	ter-Haar, E.	19	T1	E07	177
Studart Filho, N.	20	T1	E05	149	Tercier, N.	19	T1	E08	108
Studart, N.	20	T1	E06	308	Termignoni, C.	21	M1	10	97
Sturge, M.	19	M2	01	292	Terra, J.	21	T1	E12	85
Stutzmann, M.	20	T1	E07	302	Terrile, M. C.	20	T1	E11	285
Stutzmann, M.	19	M1	05	333	Terrile, M. C.	20	M1	02	282
Su, C.	19	T1	E02	246	Terrile, M. C.	20	T1	E11	284
Sunta, C. M.	19	M1	09	200	Terrile, M. C.	21	T1	E04	125
Sunta, C. M.	19	T1	E13	113	Terrile, M. C.	20	M1	02	282
Surdutovich, G.	21	T1	E03	313	Teschke, O.	21	M1	08	132
Surdutovich, G.	20	M1	01	299	Tessis, A. C. S. da C.	21	M1	10	98
Surdutovich, G. I.	19	T1	E02	250	Theumann, A.	21	T1	E10	169
Surdutovich, G. I.	19	M1	07	71	Theumann, A.	21	T1	E11	166
Surdutovich, G. I.	19	T1	E02	248	Theumann, W. K.	19	M2	03	137
Surdutovich, G. I.	19	M2	06	245	Theumann, W. K.	21	T1	E10	170
Surdutovich, G. I.	19	M1	07	72	Theumann, W. K.	21	T1	E10	171
Surdutovich, G. I.	21	T1	E12	86	Theumann, W. K.	20	T1	E03	156
Surdutovich, G. I.	21	M2	07	84	Tholence, J. L.	19	M2	04	214

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Tholence, J. L.	19	T1	E01	219	Ugarte, D.	20	T2	04	355
Tinto, M. H.	19	T1	E11	91	Ulman, M.	21	M2	06	259
Toledo, M. P. de	20	T1	E12	208	Urruchi, W. I.	19	M1	10	174
Tolentino, H.	21	M1	08	133	Valenca-Filho, M. M.	19	T1	E07	177
Tolentino, H.	19	T1	E12	128	Valente, L. C. G.	21	T1	E02	263
Tolentino, H.	19	T1	E12	127	Valente, L. C. G.	20	M1	07	181
Tome, T.	19	M2	03	137	Valerio, M. E. G.	21	T1	E04	122
Tondelli, L.	21	T1	E07	195	Valerio, M. E. G.	19	T1	E08	109
Tonissi Jr, S. A.	19	T1	E07	176	Valerio, M. E. G.	19	T1	E08	109
Torikachvili, M.	21	M1	11	327	Vallee, F. G.	21	M2	06	259
Toropov, A. I.	19	M2	01	292	Varela, J. A.	20	T1	E13	132
Torre Neto, A.	19	T1	E07	176	Varela, J. A.	20	T1	E12	208
Torre, A.	19	M1	10	174	Varela, J. A.	20	T1	E13	131
Torres, B. C. M.	19	T1	E07	180	Vargas, H.	19	T1	E09	204
Torresi, R. M.	20	M1	04	275	Vargas, H.	21	M1	10	99
Torresi, S. I. C. de	20	M1	04	275	Vargas, H.	20	M1	02	281
Torresi, S. I. C. de	19	T1	E06	273	Vargas, H.	20	T1	E11	284
Torres, J. H. S.	21	M1	11	327	Vargas, H.	21	T1	E07	197
Torriani, H. H.	19	T1	E05	144	Vargas, R.	20	M1	05	130
Torriani, I. L.	21	M1	08	132	Varriale, M. C.	21	T1	E11	166
Torriani, I. L.	21	T1	E03	317	Vasconcellos, E. da C. C.	21	T1	E12	86
Tosin, G.	21	M1	04	234	Vasconcellos, M. A. Z.	20	M2	10	337
Tourinho, F. A.	21	T1	E07	197	Vasconcellos, M. Z.	19	T1	E01	221
Tourinho, F. A.	19	M1	12	191	Vasconcelos, D. S. de	21	M1	08	133
Tourinho, F. A.	19	M1	12	191	Vasconcelos, D. S. de	21	M1	08	133
Trallero-Giner, C.	19	T1	E03	298	Vasconcelos, E. A. de	20	M2	01	299
Tranicapocchi, J. D.	21	M1	09	212	Vasconcelos, E. F.	21	T1	E06	344
Trava-Airoldi, V. J.	19	M2	05	334	Vasconcelos, G. L.	19	M1	03	136
Trava-Airoldi, V. J.	19	M2	05	334	Vasconcelos, S. S.	20	T1	E04	185
Trein, P. E.	21	T1	E06	340	Vasquez, A.	21	T1	E01	236
Tretyakov, N. P.	20	M1	12	115	Velasquez, E. L. Z.	20	T1	E13	131
Trippe, S. C.	19	T1	E08	112	Venegas, P. A.	21	M1	02	276
Trippe, S. C.	19	T1	E08	112	Venezuela, P. P. M.	21	T1	E03	317
Tronconi, A. L.	19	M1	12	191	Venezuela, P. P. M.	21	T1	E03	316
Tronconi, A. L.	19	M1	12	191	Ventura, L.	19	M2	10	175
Troper, A.	20	T1	E01	223	Verani, N. F.	20	M1	11	96
Troper, A.	21	T1	E13	330	Verzola, R. M. M.	20	M1	11	96
Troper, A.	20	T1	E01	226	Veziroglu, T. N.	21	M2	12	121
Troper, A.	20	T1	E01	227	Vianna, C. A. P.	21	T1	E04	121
Trovarelli, O.	20	T1	E02	229	Vianna, J. D. M.	21	M1	07	82
Trzesniak, P.	19	T1	E08	109	Vianna, S. S.	21	T1	E02	260
Tsai, S. H.	19	T1	E04	138	Vianna, S. S.	20	M2	06	254
Tsallis, C.	19	T1	E04	138	Vicentin, F. C.	21	M1	08	133
Tsallis, C.	21	M2	03	161	Vicentin, F. C.	19	T1	E12	127
Tsallis, C.	20	T1	E03	154	Vidal, B. C.	21	M1	10	99
Tsallis, C.	21	M1	03	159	Vidoto, E.	21	M2	05	289
Tsallis, C.	19	T1	E06	271	Viegas, A. D. C.	21	T1	E06	339
Tsao, C.	19	T1	E02	247	Viegas, A. D. C.	19	T1	E07	176
Tsuda, S.	19	M2	06	245	Vieira Jr, N. D.	21	M1	12	119
Tuboy, A. M.	21	M2	06	258	Vieira Jr, N. D.	21	T1	E02	265
Tuboy, A. M.	21	T1	E12	87	Vieira Jr, N. D.	21	T1	E02	260
Tuboy, A. M.	19	T1	E02	248	Vieira Junior, N. D.	21	T1	E02	260
Tulinsky, A.	19	T1	E12	129	Vieira Junior, N. D.	21	T1	E04	122
Turchiello, R. de F.	21	T1	E07	196	Vieira Junior, N. D.	19	T1	E08	108
Turtelli, R. S.	19	T1	E01	218	Vieira Junior, N. D.	21	M1	06	257
Tuyarot, D. E.	21	M1	01	310	Vieira, F. de M. C.	21	M1	03	160

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Vieira, F. de M. C.	21	T1	E08	101	Winnewisser, B.	19	M1	07	72
Vieira, M. M. F.	19	T1	E13	114	Winnewisser, M.	19	M1	07	72
Vieira, M. M. F.	21	M1	12	119	Wisniewski, C.	19	T1	E12	128
Viet, N. A.	21	T1	E11	166	Wolfenson, A. E.	19	M1	04	281
Vilela, M. J.	20	T1	E03	154	Wolf, G.	20	M2	10	338
Villani, M. F.	19	T1	E02	249	Woney Filho, W.	20	T1	E11	287
Villani, M. F.	19	T1	E06	271	Wuchner, S.	21	M2	04	235
Villani, M. F.	19	T1	E06	272	Wu, T. P.	21	M1	08	134
Vinha, D.	21	T1	E04	122	Xavier Junior, I. de M.	21	M2	07	84
Vinhas, R. de C. G.	19	M1	05	332	Xia, S. K.	19	T1	E01	218
Vitlina, R.	19	T1	E02	250	Xia, S. K.	21	M2	04	235
Vitlina, R.	19	T1	E02	248	Xia, S. K.	20	M1	09	207
Vitlina, R.	20	M1	01	299	Yagushita, E. M.	20	T1	E04	184
Vitlina, R.	21	T1	E03	313	Yamaguti, M.	21	T1	E09	162
Voiron, J.	21	M2	04	235	Yamamoto, T.	21	T1	E06	343
Vollet, D. R.	19	T1	E09	203	Yamamoto, T.	19	T1	E01	221
Vugman, N. V.	20	M1	11	96	Yeyati, A. L.	21	M1	01	310
Vugman, N. V.	21	T1	E08	103	Yokoi, C. S. O.	21	T1	E10	169
Vugman, N. V.	21	T1	E08	102	Yonashiro, M.	19	T1	E06	270
Vyas, R.	20	T1	E10	255	Yoshida, M.	21	M2	10	338
Wajenberg, E.	19	T1	E11	95	Yoshimura, E. M.	19	T1	E13	113
Wajenberg, E.	21	M1	05	288	Yoshimura, E. M.	21	T1	E04	125
Wakai, R. T.	20	M1	11	96	Yoshimura, E. M.	21	M2	12	120
Waki, M.	20	T1	E06	309	Yükimitu, K.	19	T1	E09	202
Walmsley, L.	21	M2	02	278	Zaghete, M. A.	20	T1	E12	208
Walmsley, L.	20	M1	04	276	Zaghete, M. A.	20	T1	E13	131
Wang, M. S. E.	19	T1	E06	268	Zagury, N.	20	M1	06	253
Wang, M. S. E.	21	M2	02	278	Zagury, N.	20	M1	06	252
Wang, Y.	20	M2	06	254	Zagury, N.	20	T1	E10	255
Wang, Y.	19	T1	E02	247	Zanatta, A. R.	21	T1	E03	317
Wasiela, A.	19	M2	01	292	Zanchet, D.	19	T1	E12	128
Watanabe, M. M.	19	T1	E01	217	Zangaro, R. A.	20	T1	E04	183
Watanabe, S.	19	T1	E08	112	Zangaro, R. A.	20	M2	07	182
Watanabe, S.	19	T1	E09	202	Zangaro, R. A.	20	T1	E04	185
Watanabe, S.	19	T1	E08	112	Zangaro, R. A.	20	T1	E04	187
Watanabe, S.	21	T1	E06	341	Zanotto, E. D.	21	T1	E05	347
Watanabe, S.	21	T1	E06	343	Zapata, R. A. V.	19	T1	E10	322
Watanabe, S.	19	T1	E01	221	Zawislak, L. I.	21	M2	04	235
Watanabe, S.	21	T1	E04	123	Zebende, G. F.	20	T1	E03	158
Watari, K.	21	M2	01	312	Zerbetto, M.	21	M1	10	99
Watari, K.	20	T1	E06	306	Zerbetto, S. C.	21	T1	E12	86
Watari, K.	20	T1	E09	81	Zeri, A. C.	19	T1	E11	91
Watari, K.	20	T1	E06	309	Zhu, S.	19	T1	E02	246
Weber, G.	19	M1	01	290	Ziemath, E. C.	19	M2	05	334
Weberszpil, J.	19	M1	05	332	Ziemath, E. C.	21	T1	E05	347
Wegrowe, J. E.	19	T1	E01	219	Ziemath, E. C.	19	T1	E02	249
Weid, J. P.	20	T1	E07	302	Zier Jr, H. J.	20	M2	07	182
Weiner, J.	20	M2	06	254	Zilio, S. C.	19	M1	07	71
Weiner, J.	19	T1	E02	247	Zilio, S. C.	20	M2	06	253
Weinketz, S.	20	T1	E01	227	Zilio, S. C.	20	T1	E08	78
Weinketz, S.	20	T1	E01	226	Zilio, S. C.	19	M1	07	72
Wentzovitch, R. M.	20	M1	01	298	Zilio, S. C.	19	M1	07	71
Werneck, A. dos S.	20	T1	E09	78	Zilio, S. C.	21	T1	E12	86
Westfahl Jr, H.	20	T1	E01	227	Zilio, S. C.	19	M2	06	244
Westphal, C. H.	21	M1	11	327	Zilio, S. C.	21	T1	E02	261
Westphal, C. H.	21	M1	11	328	Zilio, S. C.	19	T1	E03	295

Autor	Día	Período	Sala	Pág.	Autor	Día	Período	Sala	Pág.
Zilio, S. C.	19	T1	E03	296	Zubov, V. I.	20	M1	12	115
Zotti, G.	19	T1	E06	270	Zubov, V. I.	19	T1	E05	144
Zuben, A. A. de G. V.	21	T1	E02	261	Zubov, V. I.	19	T1	E05	143
Zubov, V. I.	19	T1	E05	145	Zubov, V. I.	19	T1	E05	145
Zubov, V. I.	21	T1	E06	342	Zukerman-Schpector, J.	19	T1	E12	129
Zubov, V. I.	21	M2	10	339					
Zubov, V. I.	19	T1	E05	144					
