

persiste após longos tempos de moagem. O tamanho de grão, deduzido dos dados XRD, sofre uma forte redução nas primeiras horas de moagem, estabilizando-se em cerca de 15 nm. As amostras foram espalhadas em fita gomada de kapton e foram registrados espectros de estrutura fina de absorção estendida de raios-X (EXAFS) na faixa de 1.000 eV após as bordas K do Cu e do Fe, no modo de transmissão. Os dados obtidos confirmam a mudança observada no ambiente local pela técnica XRD. Após 72 h de moagem, as oscilações EXAFS nas bordas K do Cu e do Fe portam o padrão característico de estruturas *fcc*. A incorporação do Fe-alfa (*bcc*) na estrutura do Cu (*fcc*) ocorre entre 6 e 24 h de moagem. Os resultados obtidos fornecem forte evidência de ligação química a nível atômico entre Fe e Cu na liga Fe₃₀Cu₇₀, com estrutura final determinada pela rede do Cu, obviamente dominada pela concentração usada.

Variação do Nível de Fermi na Liga Fe₃₀Cu₇₀ Formada por Moagem Severa

ROGÉRIO NETTO SUAVE

Universidade Federal do Espírito Santo (UFES) e
Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS)

CARLOS LARICA

Universidade Federal do Espírito Santo

ANTONIO RUBENS BRITTO DE CASTRO

Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP) e

Laboratório Nacional de Luz Síncrotron

GUILHERME BUENO FRAGUAS

Laboratório Nacional de Luz Síncrotron

Sabe-se que os elementos ferro e cobre são imiscíveis entre si, exceto para concentrações atômicas muito pequenas em ambos os lados do diagrama de fases. Através da técnica de moagem severa, usando-se um moinho vibratório mecânico na UFES, foi promovida a formação da liga Fe₃₀Cu_{70at%}. A mudança estrutural, indicando incorporação do ferro-alfa (*bcc*) na matriz do cobre (*fcc*), foi acompanhada com espectros de difração de raios-X em função do tempo de moagem ($t = 6, 24, 34, 48$ e 72 h). As amostras, em pó, foram distribuídas em fita gomada dupla face e fixadas a um manipulador $xyz\phi$ dentro da câmara de amostras na linha TGM do LNLS. Foram registrados espectros de refletividade na faixa do ultravioleta de vácuo 45 – 100 eV. A transição da banda $M_{2,3}$ para a banda de valência é caracterizada por um pico cuja energia varia de acordo com o tempo de moagem, saturando em 0,8 eV (após $t = 48$ h). Atribuímos tal variação a uma transferência de carga do orbital 4s-4p do Fe para a banda 3d do Cu, responsável pela elevação do nível de Fermi ϵ_F da liga. Utilizando o modelo de elétrons livres, onde a concentração de portadores é proporcional a $\epsilon_F^{3/2}$, encontramos que a transferência de carga é de 0,17 e /átomo para o Cu ($\epsilon_F = 7.0$ eV). Este resultado é consistente com um resultado teórico baseado em cálculo variacional da densidade local de estados, que prevê a transferência de

0,1 e /átomo em um *cluster* Fe₁₄Cu_{48átomos} (equivalente a Fe₂₃Cu_{77at%}).

UM MODELO COMPLETO E CONSISTENTE PARA DINÂMICA DE REDE DE METAIS HCP: APLICAÇÃO PARA O MAGNÉSIO

CARLOS ROBERTO GRANDINI, MADAN MOHAN SHUKLA

Universidade Estadual Paulista, Departamento de Física,
Câmpus de Bauru

A dinâmica de rede de metais vem sendo estudada teoricamente e experimentalmente por diversas décadas. Os modelos teóricos que reproduzem completamente as curvas de dispersão de fônons medidas são os melhores modelos para metais. Existem na literatura dois tipos de modelos de metais, conhecidos como modelo do primeiro princípio e modelo fenomenológico. Poucos autores trabalharam com o modelo do primeiro princípio devido ao fato de que tanto a Física quanto os cálculos computacionais envolvidos são bastante complicados. Por outro lado, os modelos fenomenológicos contêm poucos parâmetros e o cálculo computacional envolvido é mais simples e muitas vezes reproduzem a curva de dispersão com mais exatidão que o modelo do primeiro princípio. Em 1993, Wallis et al propuseram um modelo para metal cúbico onde consideraram força central de pares, força angular e utilizaram a condição de equilíbrio do cristal. O cálculo foi baseado no pseudopotencial. Nós, utilizando a idéia deles, desenvolvemos o modelo completo e consistente para metais cúbicos, baseando-se no modelo fenomenológico. Nós aplicamos nosso modelo para cálculo de fônons em sódio e cobre e encontramos uma boa concordância com valores experimentais. No presente trabalho, consideramos nossa idéia usada para metais cúbicos e aplicamos para metais hcp. Os metais hcp possuem dois átomos na célula unitária. A interação de um átomo com outro se divide em força central, força angular pelo método de Clark e força eletônica pelo método de Krebs. Nós também utilizamos a condição de equilíbrio do cristal. Aplicamos o presente modelo para calcular a curva de dispersão de fônons em duas direções de simetria, i.e., [0001] e [0110] para magnésio. Nós comparamos nossos cálculos de fônons com medidas experimentais apresentadas na literatura e encontramos uma boa concordância.

EFEITO DA TEMPERATURA E DOSE DE IRRADIAÇÃO ELETRÔNICA NA FORMAÇÃO DE CENTROS DE COR EM BaLiF₃

LÚCIA PRADO, SONIA LÍCIA BALDOCHI, SPERO PENHA MORATO, NILSON DIAS VIEIRA JUNIOR
IPEN-Divisão de Materiais Optoeletrônicos, C.P. 11049,
CEP 05422-970, São Paulo, S.P., Brazil

PRODUÇÃO TÉCNICO CIENTÍFICA
DO IPEN
DEVOLVER NO BALCÃO DE
EMPRÉSTIMO

7696

1072

14 268

212
C
Mpanato
2 de junho

7696

Fluorperovskitas constituem materiais amplamente investigados como meios potencialmente laser ativos. Entre eles centros Pb^{2+} em $BaLiF_3:Pb^{2+}$ apresentaram boas propriedades óticas do ponto de vista de um possível candidato a meio laser ativo. Visto que esses centros resultam da interação entre impurezas de Pb^{2+} e centros de cor, foi necessário efetuar-se um estudo otimizado da formação de defeitos induzidos pela irradiação tanto em cristais de $BaLiF_3$ puro como em cristais contendo impurezas de chumbo. No presente trabalho apresentamos os resultados referentes à influência da temperatura e da dose de irradiação com elétrons de alta energia na formação de centros de cor no $BaLiF_3$ puro crescido ao longo de duas direções: $\langle 100 \rangle$ e $\langle 111 \rangle$. Apresentamos também alguns dados referentes a experimentos de iluminação com luz ultravioleta dos defeitos formados durante o processo de irradiação a fim de verificar sua estabilidade fotônica. Além disso foi possível efetuar algumas atribuições quanto à natureza dos defeitos observados não só por comparação dos nossos resultados experimentais com aqueles obtidos para cristais de $KMgF_3$ e LiF como também por intermédio de previsão teórica da absorção de alguns agregados de centros F (F_2 , F_2^+ , F_3 e F_3^+) no cristal de $BaLiF_3$. Para essa previsão teórica foi utilizado um modelo modificado baseado na estimativa dos níveis de energia das moléculas de H_2 e seus derivados (H_2^+ , H_3 , H_3^+) imersos num meio de constante dielétrica equivalente à do cristal estudado. Essa comparação é pertinente visto que a absorção de agregados de centros F depende essencialmente das distâncias intervacâncias. Apoio - FAPESP

Caracterização da saturação da emissão do Ho no sistema Tm:Ho:YLF.

7695
LUIZ VICENTE GOMES TARELHO, LAÉRCIO GOMES, IZILDA MÁRCIA RANIERI, EDISON PUIG MALDONADO, NILSON DIAS VIEIRA JR
Supervisão de Materiais Optoeletrônicos - IPEN - CNEN

O sistema Tm:Ho:YLF é um dos sistemas laser mais estudados atualmente devido à relevância das aplicações que emissões no infravermelho possuem nos domínios das telecomunicações e medicina. Depois do desenvolvimento de lasers de semicondutor baratos na região de bombeamento (780 nm) tornou-se vantajoso utilizar esse sistema para produção de emissão em $2 \mu m$, ao invés da utilização de lâmpadas flash. No presente trabalho estudou-se a saturação que ocorre na emissão do íon de Hólmio quando bombeado intensamente pelo diodo, ocasionando somente um aumento da emissão do íon de Túlio. A espectroscopia de emissão realizada permitiu uma integração quantitativa, obtendo-se o número de fótons emitidos para cada canal luminescente, permitindo assim quantificar essa saturação de transferência de energia. Foram determinadas as eficiências de luminescência para as emissões do Túlio

e Hólmio bem como das emissões de conversão ascendente, balanceando os números de fótons e população dos níveis envolvidos. Quando utilizada uma amostra de Tm(6%):Ho(1%):YLF o bombeamento não deve ultrapassar 2 W pois não há aumento da emissão do Ho. As eficiências de transferência de energia foram determinadas em três sistemas para os quais a concentração de Ho variava de 0,4, 1 e 2 mol % enquanto a concentração de Tm permaneceu em 6%. A principal contribuição do trabalho é indicar a faixa ótima de potência que permite a obtenção de ação laser eficiente laser.

A EMISSÃO TERMOLUMINESCENTE DO NIOBATO DE LÍTIU

ZÉLIA SOARES MACEDO, JOSÉ FERNANDES DE LIMA, MÁRIO ERNESTO GIROLDO VALERIO
Departamento de Física - CCET - Universidade Federal de Sergipe

ANTONIO CARLOS HERNANDES
Instituto de Física de S. Carlos, Universidade de São Paulo

O Niobato de Lítio ($LiNbO_3$) é um material dielétrico com uma larga faixa de aplicações tecnológicas, como por exemplo em transdutores, moduladores de fase, geradores de segundo harmônico, defletores de feixes, conjugadores de fase, guias de ondas dielétricos e elementos de memória, para citar algumas. Esta imensa gama de aplicações deve-se principalmente às propriedades piezoelétricas, piezoelétricas, eletro-ópticas e fotoelásticas deste material, que apresenta ainda birrefringência e um forte efeito fotovoltaico. Neste trabalho, estudamos o comportamento termoluminescente (TL) deste cristal que, de forma semelhante ao comportamento da Turmalina, continua apresentando emissão mesmo após aquecimentos sucessivos, sem que se tenha que excitar novamente a amostra (através de luz UV ou radiação γ , por exemplo). A curva de emissão TL de amostras nominalmente puras deste cristal apresenta dois picos bastante intensos, em torno de 130 e 300°C, superpostos por uma série de emissões rápidas. O pico em 300°C não é observado durante o processo de resfriamento, ou em aquecimentos posteriores da mesma amostra, o que constitui o comportamento padrão dos materiais termoluminescentes. Este pico, no entanto, volta a ser observado se a amostra receber luz visível. Por outro lado, o pico a 130°C continua presente tanto no processo de resfriamento quanto em aquecimentos posteriores do mesmo material. A repetição do ciclo de aquecimento/resfriamento, realizado com a mesma amostra, revelou que a intensidade deste pico chega a crescer cerca de 40%, após 8 medidas sucessivas, e tem uma forte dependência com a taxa de aquecimento empregada. Uma interpretação proposta para este comportamento é a existência de um mecanismo piroeletroluminescente no "bulk" do cristal, responsável pela série de emissões rápidas, enquanto o pico de TL estaria relacionado com a recombinação de cargas devida