

kc
Morato

utilizada para determinar as concentrações de íons de terras raras em YLF:TR (TR = Lu, Nd, Ho, Er e Tm). Os fluoretos são materiais difíceis de dissolver por via úmida, então, foi desenvolvido um método para a preparação das amostras: microfusões da amostra e de um fundente, o metaborato de lítio ou ácido bórico, foram dissolvidas com ácido nítrico. Após a evaporação do ácido obtem-se um precipitado que é facilmente dissolvido em água. Foram analisados vários cristais de YLF, crescidos em nossos laboratórios pelo método de Czochralski, com concentrações iniciais na fusão em torno de 2 mol% de neodímio, 2 mol% de hólmio, 35 mol% de érbio, 10 mol% de tílio e 10, 30 e 50 mol% de lutécio. Os coeficientes de segregação obtidos estão de acordo com os citados na literatura, mostrando assim a acuracidade da técnica e do método de dissolução utilizados. As determinações quantitativas destas terras raras e os respectivos coeficientes de segregação no YLF serão apresentados.

[12/05/99 - Painel - 14:00]

CRESCIMENTO DE CRISTAIS DE $LiY_{1-x-y}Lu_xNd_yF_4$ PARA APLICAÇÕES ÓPTICAS

I. M. RANIERI, L. C. COURROL, H. M. SHIHO MATSU, A. H. A. BRESSIANE, N. M. P. MORAES, S. P. MORATO
IPEN - CNEN/SP

Os cristais de $LiYF_4$ dopados com neodímio (YLF:Nd) são bastante conhecidos por sua utilização como meio laser ativo. O Centro de Lasers e Aplicações IPEN está empenhado na obtenção de lasers de alta potência, e para tanto se faz necessária a obtenção de cristais de altíssima qualidade óptica. Outro fator importante é a obtenção de cristais dopados com neodímio com uma banda de emissão mais larga, que favoreça a produção de pulsos mais curtos. O $LiLuF_4:Nd$ (LuLF:Nd) é a matriz da família de cristais isoestruturais ao YLF que

possue o maior alargamento de banda para o neodímio, porém é um material de alto custo e o neodímio possui um coeficiente de segregação muito pequeno ($k = 0.1$) neste cristal. Neste trabalho serão apresentados detalhes da síntese e crescimento de cristais de YLF dopados com lutécio ($x = 10, 30$ e 50 mol%) e neodímio ($y = 2$ mol%) e LuLF:Nd (2,3 mol%) para as aplicações citadas. A síntese e purificação dos reagentes iniciais foram realizadas em uma atmosfera de ácido fluorídrico e argônio. Os cristais foram crescidos pelo método de Czochralski em atmosfera de argônio e apresentaram boa qualidade óptica. As concentrações de dopantes e de ítrio ao longo dos cristais de YLF foram obtidas utilizando-se tanto um microscópio eletrônico de varredura dotado de um espectrometro de raios-X de energia dispersiva quanto a técnica de cromatografia líquida de alta resolução. O coeficiente de segregação do neodímio não apresentou variações significativas mostrando que este íon entra preferencialmente nos sítios de ítrio. O coeficiente de segregação do lutécio foi determinado como sendo 1,052 (6). Estudos espectroscópicos porém mostraram que a banda de emissão do neodímio é alargada até um máximo de 1,81 nm, que é 98% do valor da largura de banda deste íon no LuLF (1,84 nm) e 25% maior que no YLF (1,45 nm).

PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E DINÂMICAS DE MATERIAIS (Síntese e Crescimento / Estrutura de Monocristais, Policristais e Materiais Vítreos) – 14/05/99

**PRODUÇÃO TÉCNICO CIENTÍFICA DO IPEN
DEVOLVER NO BALCÃO DE EMPRÉSTIMO**

[14/05/99 - Sala P5 - 08:00]

CRESCIMENTO DE CRISTAIS FLUORETOS DOPADOS COM Ce^{3+} PARA LASERS NA REGIÃO UV.

SONIA LÍCIA BALDOCHI
Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - Brasil
KIYOSHI SHIMAMURA, KENJI NAKANO, NA MUJILATU, TSUGUO FUKUDA
Institute for Materials Research - Japão

Pesquisas recentes mostraram a possibilidade de obtenção de lasers de estado sólido sintonizáveis na região UV baseados em matrizes de fluoretos dopados com o elemento Cério. Em particular, cristais de $LiCaAlF_6:Ce^{3+}$ (LiCAF:Ce) mostraram-se como excelentes candidatos para obtenção de ação laser nesta região. Esta matriz pode ser diretamente bombeada pelo quarto harmônico do Nd:YLF, sendo o sistema LiCAF:Ce identificado como o primeiro laser sintonizável totalmente de estado sólido na região ultravioleta. A descoberta desta propriedade tem incentivado pesquisas visando a obtenção desta matriz com qualidade óptica apropriada à este tipo de aplicação, bem como, à procura de novas matrizes-fluoretos com características semelhantes. O objetivo deste trabalho foi o estudo do processo de síntese e crescimento de diversas matrizes dopadas com Ce^{3+} com potencial para lasers

422

(7818)

na região UV. Os seguintes cristais foram estudados: YLF:Ce ($LiYF_4:Ce^{3+}$), BLF:Ce ($BaLiF_3:Ce^{3+}$), LiSAF:Ce ($LiSrAlF_6:Ce^{3+}$) e LiCAF:Ce; sendo investigados os seguintes parâmetros: influência da atmosfera de síntese e crescimento, incorporação de dopante, variação da composição do composto durante o processo de crescimento. O crescimento após tratamento em atmosfera de CF_4 , apresentou resultados similares ao processamento em HF, normalmente utilizado para síntese e/ou tratamento de fluoretos em geral. O uso de um segundo dopante (Na) mostrou-se ineficiente no caso do BLF no que se refere ao aumento da concentração de Ce incorporada na matriz. Em relação as matrizes LiSAF e LiCAF, observou-se que devido a alta evaporação de um dos componentes é necessário iniciar o crescimento a partir de uma composição não estequiométrica.

[14/05/99 - Sala P5 - 08:30]

**ESTUDO COMPARATIVO DOS
PARÂMETROS QUE DETERMINAM O
PROCESSO DE OBTENÇÃO DE CRISTAIS
DE CALCITA.**

CEZÁRIO ALVES SOUZA JÚNIOR, JOSÉ FERNANDES
DE LIMA, MÁRIO ERNESTO GIROLDO VALERIO, LUIZ
AUGUSTO CARVALHO SOBRAL
Depto de Física - UFS

A ciência dos materiais abrange uma grande variedade de compostos naturais e sintéticos existentes e também o estudo das múltiplas propriedades que eles podem apresentar nos campos da óptica, da eletricidade, da termodinâmica. Devido ao fato de que medidas de termoluminescência permitem a determinação da idade de formações geológicas e de fósseis, é cada vez mais notável o interesse no conhecimento das propriedades termoluminescentes da calcita, por esta apresentar o comportamento óptico de birrefringência e possuir uma estrutura cristalina relativamente simples. Além disso a calcita apresenta bandas de absorção na região do infravermelho, o que tem chamado a atenção dos pesquisadores para a possibilidade de se produzir lasers. Os cristais de calcita encontrados na natureza, são razoavelmente grandes e muitos deles apresentam excelentes qualidades ópticas, porém elas não podem ser controladas facilmente, o que dificulta a possibilidade de se introduzir uma concentração previamente conhecida de uma determinada impureza. A forma cristalina e o tamanho das partículas de um precipitado dependem das condições de formação do mesmo, sempre levando-se em conta características individuais de cada substância em particular, como também o seu tratamento após a precipitação. Neste trabalho estamos fazendo um estudo comparativo, produzindo cristais de calcita utilizando as reações do Nitrato de Cálcio com o Carbonato de Sódio e do Cloreto de Cálcio com o Carbonato de Amônio estudando alguns parâmetros que influenciam na denominada fase calcita. Para as duas reações, variamos a pressão exercida durante o período de cristalização de 30 lbf/in² a 100 lbf/in², e a temperatura da reação de 0°C a 75°C, mantendo as concentrações das soluções de Nitrato de Cálcio e Cloreto de Cálcio em 1,0M e as concentrações das soluções de Carbonato de Sódio e Carbonato de Amônio em 0,5M. Em condições de pressão igual a 80 lbf/in² e temperatura igual a 25°C,

obtivemos cristais com tamanho médio igual a 163 e 159 micra, em um tempo inferior a 48 horas, demonstrando que nestas condições obtivemos cristais maiores e bem definidos para ambas as reações.

[14/05/99 - Sala P5 - 08:45]

**THE CAUSE OF THE "PEACOCK-BLUE"
COLOR IN ALEXANDRITES FROM
MALACACHETA REGION IN MINAS
GERAIS, BRASIL**

MAURÍCIO VELOSO BRANT PINHEIRO
*CDTN-CNEN, C.P. 941, CEP 30123-970, Belo Horizonte,
MG, Brasil*

MÁRCIO SOARES BASÍLIO
*Dep. de Química, CEFET-MG, CEP 30480-000, Belo
Horizonte, MG, Brasil*

KLAUS KRAMBROCK, MARIA SYLVIA SILVA DANTAS,
ROBERTO PANIAGO, ANDRÉ LUIZ ASSUNÇÃO
*UFMG, Departamento de Física, ICEX, CP 702,
30.123-970 Belo Horizonte, Brasil*

ANTÔNIO CARLOS PEDROSA-SOARES
*Dep. de Geologia, IGC, UFMG, C.P. 702, CEP
30123-970, Belo Horizonte MG, Brasil*

A rare and very attractive variety of the alexandrite gemstone usually called "peacock-blue" alexandrite from Malacacheta, Minas Gerais (Brazil), was investigated by electron paramagnetic resonance (EPR), optical absorption, photoluminescence and x-ray photoelectron spectroscopy (XPS). Alexandrite is a chrysoberyl, a beryllium alluminate gem material with chemical composition $BeAl_2O_4$. Unlike the more common iron-bearing yellow chrysoberyl, alexandrite contains also chromium substituting for Al^{3+} . The peacock-blue alexandrite is known for its strong pleochroism ranging from blue to green or greenish-yellow, as well as its strong color-changing effect showing blue or greenish blue in daylight and reddish purple in incandescent light. The results presented herein show that the rare bluish colors of the peacock-blue alexandrite are related to a critical balance between Fe^{3+} and Cr^{3+} substituting for Al^{3+} in the sites with mirror symmetry, while the concentration of Cr^{3+} in the sites with inversion symmetry is negligible (less than 10%) as confirmed by EPR measurements. From XPS we found the Cr/Fe molar ratio to be about 0.8. Cr^{3+} shows strong absorption bands at 570, 410 and 300 nm, while Fe^{3+} absorbs