

sões, reproduzimos (para o diagrama de fases) todos os resultados exatos conhecidos, e em três dimensões, não detectamos a fase adicional (além das existentes no caso bi-dimensional) sugerida por Kohmoto et. al. (1981). Concluimos ser o método adequado para o estudo do modelo bidimensional, enquanto no caso tridimensional uma análise mais elaborada torna-se necessária para uma afirmativa, mais conclusiva, acerca da presença da nova fase. (CNPq).

72-D.1.4 CALOR ESPECÍFICO E ANÁLISE TÉRMICA DIFERENCIAL (DTA) PARA O ESTUDO DE TRANSIÇÕES DE FASE DOS CRISTAIS DE FLUORBORATO DE ZINCO HEXAHIDRATADO COM Ni^{2+} . João Baptista Domiciano, Klemensas Rimgaudas Juraitis, Eduardo Di Mauro e João Carlos Botelho Carrero^(*) (Departamento de Física da Universidade Estadual de Londrina).

Efetuamos medidas de Análise Térmica Diferencial (DTA) e Calor Específico em monocristais de Fluorborato de Zinco Hexahidratado dopados com Ni^{2+} , no intervalo de temperaturas de 80K a 300K, com o objetivo de confirmar, por estas técnicas, a existência de transições de fase nestes cristais. Em 1980, Domiciano e col. haviam detectado uma transição de fase "aparente" em cristais, em torno de 180K, através da análise do comportamento do parâmetro D do campo cristalino em função da temperatura, utilizando-se das teorias até então disponíveis para tratamento de dados de Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE). Com o desenvolvimento do "Modelo de Pares", Domiciano (1985) e Ochi (1986), a variação do parâmetro D na região de 180K é explicada pela estrutura das linhas de RPE e não mais como originária de transição de fase. As medidas de DTA e calor específico por nós efetuados têm mostrado, de fato, a não existência de transições, cabendo, para uma confirmação definitiva, o refinamento das medidas, o que ora estamos realizando. (CNPq, FUEL/CPG). (*) bolsista de Iniciação Científica do CNPq

73-D.1.4 ADSORÇÃO DE HIDROGÊNIO SOBRE A SUPERFÍCIE (100) e (110) DO W. Dionei Luis Gomes Andreatta e Bernardo Laks (Departamento de Física Aplicada do Instituto de Física "Gleb Wataghin" da Universidade Estadual de Campinas).

Apresentamos o estudo da estrutura eletrônica induzida pela adsorção de átomos de hidrogênio sobre um substrato de metal de transição (W). A dinâmica do sistema é descrita por um hamiltoniano de ligação forte que contém efeitos de hibridizações spd. Os parâmetros de interação H-W foram obtidos ajustando-se o cálculo APW feito para um cristal fictício W-H com estrutura de CsCl por Smith e Mattheiss¹. Os hidrogênios são supostos interagirem com os primeiros vizinhos do substrato metálico bem como da camada gasosa adsorvida.

¹ Phys. Rev. Letters, 37, 1497 (1976)

74-D.1.4 SÍNTESE, PURIFICAÇÃO, CRESCIMENTO E CARACTERIZAÇÃO DE CRISTAIS DE $SmCl_3$. Marilene Gonçalves Pena*, Nelson Batista de Lima e Spero Penha Morato. (Instituto Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN/CNEN/SP).

Este trabalho consiste em se obter cristais de haletos de terras raras de qualidade óptica para serem empregados em lasers. Partindo-se dos óxidos de terras raras faz-se a síntese úmida obtendo-se os trihaletos hidratados. A seguir é feito a desidratação sob atmosfera protetora de haletos de hidrogênio com argônio, até o ponto de fusão. A partir daí o cristal é purificado pelo método de refino por zona e a seguir caracterizado por difração de raio-X. Cuidados especiais são usados para se evitar a formação de oxihaleto bem como com a alta higroscopicidade de cloretos de terras raras como o $SmCl_3$, que foi o cristal com que iniciamos este trabalho.

* Bolsista de Mestrado FAPESP

75-D.1.4 ESTADOS LOCALIZADOS NUMA REDE DE BETHE DESORDENADA. José Ernesto Ure (Instituto de Física da Universidade Federal Fluminense).

Utilizando a representação da matriz de transferência em forma de fração contínua calculamos por simulação numérica o raio de convergência da mesma em função da desordem diagonal para um modelo tipo Anderson. Esse valor da energia que separa estados localizados de estados estendidos permite estabelecer um critério de borda de mobilidade que coincide parcialmente com modelos teóricos e com cálculos numéricos da condutividade. O método é estendido a outros tipos de redes.