

18-D.1.4 CONSTANTE DIELÉTRICA LONGITUDINAL EM POÇOS QUÂNTICOS FORMADOS POR GaAs - AlGaAs. L. Ioriatti e R. Tsu (Departamento de Física e Ciência dos Materiais, Instituto de Física e Química de São Carlos, Universidade de São Paulo).

Calculamos a constante dielétrica longitudinal para uma estrutura formada por poços quânticos múltiplos no sistema GaAs-AlGaAs. A contribuição total à constante dielétrica foi tomada como uma soma sobre as contribuições provenientes das imediações dos pontos de simetria Γ , X e L da zona de Brillouin. Uma vez que os estados de elétron e buraco são quantizados nos poços quânticos formados pelas barreiras da heterojunção, a constante dielétrica estática é substancialmente reduzida. Para uma largura de poço de 2nm e barreiras formadas por $Al_{.35}Ga_{.65}As$ a redução é de aproximadamente 20%.

19-D.1.4 RELAXAÇÃO NUCLEAR INTRÍNSECA DO ^{19}F NO CONDUTOR SUPERIÔNICO $K_{0.36}Bi_{0.64}F_{2.22}$. J.P. Donoso, L.N. Oliveira, H. Panepucci (Departamento de Física e Ciência dos Materiais - Instituto de Física e Química de São Carlos - USP), A. Cassanho (Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares-IPEN).

Os resultados medidos dos tempos de relaxação nuclear spin-rede (T_1) do ^{19}F do condutor superiônico $K_{0.36}Bi_{0.64}F_{2.22}$, em função da frequência (10-36 MHz) e da temperatura (500-750 K) apresentam um comportamento particular devido à forte assimetria do mínimo na curva $\ln T_1$ vs $T^{-1}(1)$. Nós examinamos este problema(2) e mostramos um método gráfico que permite extrair, a partir dos dados experimentais, a função densidade espectral e a função de correlação de spins, e desta maneira, indicar a origem desta assimetria como devida ao decaimento rápido, quase logarítmico da função de correlação de spin para tempos que são pequenos na escala da taxa de saltos dos íons. Este procedimento nos permite distinguir os comportamentos intrínsecos (ou seja, associado com a interação dipolar) do extrínsecos, devido a interações com impurezas magnéticas. Por outra parte, o fato de ter conseguido determinar a função de correlação de spin, constitui num importante ponto de partida para o desenvolvimento de uma teoria microscópica da cinética do transporte iônico nos condutores superiônicos aqui considerados.

(1) Solid State Comm. 48, 95 (1983)

(2) J. of Physics C (submetido)

Trabalho subvencionado pelo CNPq e FINEP.

20-D.1.4 ENERGIA DE FORMAÇÃO DE DEFEITOS NO CONDUTOR SUPERIÔNICO $K_{0.39}Bi_{0.61}F_{2.2}$. J.P. Donoso, L. N. Oliveira, H. Panepucci (Departamento de Física e Ciência dos Materiais, Instituto de Física e Química de São Carlos - USP), A. Cassanho (Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN).

Utilizando um espectrômetro de ressonância magnética nuclear pulsada operando na frequência de Larmor de 23 MHz, medimos os tempos de relaxação nuclear spin-rede (T_1) e spin-spin (T_2) em função da temperatura (300 - 900 K) no condutor superiônico $K_{0.39}Bi_{0.61}F_{2.2}$. Estudamos os efeitos da ciclagem da temperatura durante a realização da experiência fazendo as medidas, tanto aumentando, como diminuindo a temperatura em todo o intervalo mencionado. Independentemente foram realizadas medidas numa outra amostra nova, depois de fazer-lhe um "quenching", esquentando-a à 500 °C por 30 min. e depois esfriando-a rapidamente. Os resultados de T_2 mostraram diferentes comportamentos dependendo se a amostra estava sendo aquecida pela primeira vez ou esfriada. Como os resultados obtidos na parte do aquecimento do ciclo concordam com aqueles obtidos para a amostra tratada termicamente ("quenched"), e comparando com o tempo de relaxação medido na parte de esfriamento do ciclo, podemos separar duas energias de ativação associadas com os saltos do íon F, e desta maneira estimar a energia de formação de defeitos no condutor superiônico aqui considerado. Trabalho subvencionado pelo CNPq e FINEP.

21-D.1.4 ANISOTROPIA PLÁSTICA DO SILÍCIO. V.R. Dumke, R.E. Uhlmann e I.A. Hümmelgen (Departamento de Física da Universidade Federal do Paraná).

A plasticidade do silício é observada em temperaturas superiores a 500°C, e se caracteriza por uma pronunciada anisotropia no intervalo 500-850°C. Amostras de Si puro e dopado receberam a aplicação de cargas concentradas, (20-50p), através de ponta de diamante Vickers, com diversas orientações em relação às direções cristalinas. Além da medida das impressões, foi procedido o ataque químico para revelar os padrões de discordâncias, e posterior observação com microscopia de reflexão e varredura. Os sistemas de deslizamento $\{111\} \langle 110 \rangle$, que acomodam os movimentos das discordâncias ficam caracterizados nas impressões produzidas nas diversas temperaturas, orientações da pirâmide de penetração, bem como a ativação de outras direções. As impressões e observações foram feitas em superfícies, (100), (110), (111). Apoio Financeiro CNPq.

22-D.1.4 ESTRUTURA ELETRÔNICA DE AGLOMERADOS PELO MÉTODO APW. José Rezende Pereira Neto e Kazunori Watari (Instituto de Física da Universidade de São Paulo, São Paulo).

O modelo muffin-tin para o potencial de um aglomerado é reconhecido como a causa dos maiores erros nos cálculos da estrutura eletrônica. Uma melhoria foi obtida substituindo a média em volume pela média esférica (Método Celular). Neste trabalho estamos propondo um método de cálculo de estrutura eletrônica no qual o modelo do potencial é a média esférica em esferas atômicas (região I), e, na região onde o muffin-tin o potencial é constante, (região II) o potencial Coulombiano é o potencial verdadeiro ($V(\vec{r})$) e o potencial de exchange é também verdadeiro em 1ª ordem de aproximação. O método usado para o cálculo de estrutura eletrônica é o de ondas planas aumentadas APW. O programa computacional já foi implantado e estamos no estágio dos primeiros testes com a molécula H_2^+ .