

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  $\beta^-$  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.