

são metais de transição, metais alcalinos e moléculas de  $H_2O$ ,  $CO_2$  e  $CH_4$ . A água ocupa dois sítios distintos nos canais estruturais. Morganitas e Goshenitas iluminadas com luz ultravioleta (UV) apresentam hidrogênio estável à temperatura ambiente observado por RPE. Vacâncias de oxigênio dão origem a uma banda larga de AO na região do UV e são responsáveis pela estabilização de prótons nas vacâncias ou nos íons OH- adjacentes às vacâncias. A iluminação UV dissocia os íons  $OH^{--}$  deslocando o hidrogênio para um sítio intersticial, onde ele permanece armadilhado. A mudança de cor no berilo submetido a tratamentos térmicos entre 400 e 900 C está relacionada com a redução do  $Fe^{3+}$  para o estado divalente em duas posições diferentes da estrutura cristalina. Tratamentos térmicos acima de 900 C removem a água dos canais estruturais deixando íons alcalinos livres para se mover, favorecendo o processo de redução do ferro. Medidas de CTE e de IR permitem concluir que existe uma competição entre a formação de centros de hidrogênio e o processo de redução do ferro.

#### Forno para crescimento por puxamento de metais e semicondutores com baixo ponto de fusão.

CASTRO, A. C. DE

*Instituto de Física e Química de São Carlos*

Projetamos e construímos um forno para crescimento de cristais com baixo ponto e fusão. O corpo do forno é um tubo de quartzo com 85,5 mm de diâmetro e 450 mm de comprimento fixado a uma estrutura de aço inox por o-rings. O aquecimento é efetuado por uma resistência de grafite fixada por suportes também de grafite no interior do tubo de quartzo. Todas as partes que sofrem aquecimento direto são de grafite ou de quartzo. Os componentes de aço inox que entram em contato com a atmosfera interna são refrigerados a água. Pode operar em temperaturas de até 650°C com atmosfera inerte ou redutora com pressões de  $10^{-6}$  torr a 1 atm. Estão previstos três formas de sustentação do cadinho: 1) fixo para cadinhos maiores que ocupem todo o interior da resistência; 2) móvel para quando há necessidade de se mover o cadinho em relação à resistência (bastante útil no resfriamento de materiais que expandem na solidificação) e 3) sobre uma balança para controle automático de diâmetro (ainda em desenvolvimento). Pelas suas características esse forno é bastante adequado para o crescimento de monocristais de metais com baixo ponto de fusão (*In*, *Sn*, *Pb*, etc.) e de compostos semicondutores com baixo ponto de fusão e pressão de vapor (*InSb*, *Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>* etc.). O tubo de quartzo permite uma ótima visão do interior do forno e do processo de crescimento tornando-o ideal para aulas de demonstração e para o treinamento de técnicos.

#### MODELO GEOMÉTRICO PARA ANOMALIA TÉRMICA DE SÓLIDOS AMORFOS

FURTADO, C. B. S.; MORAES, F.

*Departamento de Física - UFPE*

O comportamento dos sólidos amorfos a baixa energia de excitação, grandes comprimentos de onda, onde o sólido é visto como um continuum, é substancialmente diferente dos sólidos cristalinos. A baixas temperaturas surgem anomalias no calor específico, espectro Raman e na condutividade térmica. Alguns modelos<sup>a</sup> que tentam elucidar estas anomalias invocam potenciais anarmônicos, mas sem explicações para o seu aparecimento. No nosso trabalho mostramos que tais anarmonicidades podem ser justificadas pelo fato da geometria local do sólido sofrer modificações devido ao stress dos defeitos do material. Assim esses defeitos vão provocar uma mudança na curvatura local do continuum contribuindo para a anarmonicidade do potencial. Fazemos um modelo simples considerando osciladores harmônicos em espaços de curvatura constante negativa e positiva e adaptamos a teoria de Debye para estes espaços curvos. Mostramos que no limite de curvaturas pequenas (limite quase-euclidiano) obtemos contribuições anarmônicas para o potencial com as consequentes implicações para o calor específico.

<sup>a</sup> V.G. Karpov, M.I. Klinger and F.N. Ignat'ev, Sov. Phys. JETP 57, (2), 439-448, (1989); V. Buchenav, Yu. M. Galperin, V.L. Gurevich, and H.R. Schober, Phys. Rev. B43, (6), 5039-5045.

#### MEDIDAS DINÂMICAS DA FLUORESCÊNCIA DE CENTROS $Pb^{+}(1)$ EM $BaLiF_3:Pb$

PRADO, L.; VIEIRA JUNIOR, N. D.; BALDOCHI, S. L.; MORATO, S. P.

*Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares-IPEN/CNEN/SP*

DENIS, J. P.; TERCIER, N.

*Laboratoire de Physicochimie des Matériaux-Meudon, France*

Centros de cor associados a íons de  $Pb^{2+}$  em matrizes de  $KMgF_3$  apresentaram ação laser sintonizável entre 855 e 965 nm. Esses centros podem ser descritos pela mesma aproximação teórica aplicada aos centros laser ativos de  $Tl^0(1)$  em cristais de KCl. Centros isoeletrônicos  $Pb^{+}(1)$  foram criados anteriormente em cristais de  $BaLiF_3:Pb$  submetidos a irradiação com elétrons de alta energia. Esses defeitos apresentaram três bandas de absorção centradas em 735, 476 e 305 nm (17 K) às quais corresponde uma única banda de emissão assimétrica centrada em 880 nm. No presente trabalho foram determinados outros parâmetros espectroscópicos importantes para a análise desse tipo de centro como um possível meio laser ativo tais como tempo de decaimento e sua evolução com a temperatura para a emissão característica de 880 nm. O valor obtido foi da ordem de 1.25  $\mu s$  e permaneceu praticamente inalterado no intervalo de temperaturas compreendidas entre 10 e 300

K. São apresentados ainda dados referentes à espectroscopia resolvida no tempo dessa emissão obtidos com o intuito de se analisar mais detalhadamente a assimetria da banda observada.

Apoio CNPq-RHAE, FAPESP

**Limites para determinação da energia de ativação dos processos termicamente estimulados usando o método da subida inicial**

NASCIMENTO, A. E. DO; VALÉRIO, M. E. G.;

LIMA, J. DE

UFS

Boa parte do esforço empregado no estudo dos processos termicamente estimulados tem sido no sentido de desenvolver métodos de análise que permitam extrair dados dos resultados experimentais. O método da subida inicial é comumente empregado para determinação da energia de ativação desses processos devido a facilidade de aplicação. Neste trabalho simulamos, usando um microcomputador, as curvas de emissão termoluminescentes a partir de diferentes expressões para intensidade TL. O método da subida inicial é utilizado para diferentes frações da altura de pico, e as energias de ativação são calculadas a partir das retas com os melhores coeficientes de correlação. São discutidos os limites para utilização do método, as correções necessárias e as aplicações do mesmo em outros processos termicamente estimulados.

**Interacciones Hipérfinas en el BaBiO<sub>3</sub> y Ba<sub>2</sub>BiO<sub>4</sub>**

GARCIA, A. L.; PRESA, P. DE LA

Universidad Nac. de La Plata - La Plata

Los compuestos BaBiO<sub>3</sub> y Ba<sub>2</sub>BiO<sub>4</sub> han sido estudiados para determinar, además de otras características, el estado de oxidación del Bi. En estos materiales los estados de oxidación han sido propuestos como 3+ y 5+ en lugar de 4+. Estudiamos ambos sistemas mediante Correlaciones Angulares Perturbadas Diferenciales en el Tiempo en el rango de temperaturas de 73 K a 1073 K. El análisis de los espectros muestra un factor de atenuación correspondiente a un proceso de relajación rápido que permanece aproximadamente constante en todo el rango de temperaturas. Por otro lado este comportamiento con la temperatura es similar al BaHfO<sub>3</sub> cúbico y a otras perovskitas cúbicas que también muestran un parámetro de relajación admiten un estado 4+ en el metal rodeado por el octaedro de oxígenos.

**INFLUÊNCIA DA TEMPERATURA DE DEPOSIÇÃO NA ESTRUTURA DE LIGAS DE a-GeN<sub>x</sub>:H**

LOPEZ, J. V.; MARQUES, F. DAS C.

Inst. de Física-UNICAMP

Os nitretos de germânio amorfo hidrogenados (a-GeN<sub>x</sub>:H) podem ser potencialmente utilizados como semicondutores, camadas isolantes, ou camadas an-

tirefletoras devido à possibilidade de preparação destas ligas com diferentes banda proibida dependendo do conteúdo de nitrogênio. Neste trabalho apresentamos resultados de análises de espectros de infravermelho na faixa de 400-4000cm<sup>-1</sup> de amostras de a-GeN<sub>x</sub>:H. Os filmes foram preparados por rf-sputtering utilizando um alvo de Ge em atmosferas de i) Ar + N<sub>2</sub> + H<sub>2</sub> e ii) Ar + NH<sub>3</sub>, mantendo as mesmas condições, variando apenas a temperatura de deposição. Os espectros de infravermelho da maioria das amostras apresentam modos vibracionais em torno de 700, 1150 e 3200cm<sup>-1</sup>, associados aos modos Ge-N stretching, e N-H bending e stretching respectivamente. As concentrações de hidrogênio e nitrogênio foram estimadas pela integração do coeficiente de absorção destas bandas. observamos que à medida que diminuimos a temperatura de deposição dos filmes a concentração de nitrogênio e hidrogênio aumentam. Além disso, observa-se um aumento de intensidade de uma banda de absorção centrada em 1520cm<sup>-1</sup>, associada ao modo N-H<sub>2</sub> bending, que aparece muito fracamente nos filmes preparados em temperatura elevadas. Neste trabalho também apresentamos um estudo sistemático dos espectros de infravermelho em função do tempo de exposição ao meio ambiente. Observamos que nas amostras preparadas em temperaturas superiores a 100°C não se observa alterações significativas nos espectros infravermelho. Entretanto, as amostras preparadas em temperaturas abaixo de 100°C não são estáveis, apresentando contaminação atmosférica, observado pelo surgimento de várias bandas em torno de 2700-3800, 1450 e 500 cm<sup>-1</sup>. Apoio: CAPES FAPESP.

**AGREGAÇÃO INDUZIDA PELO Al<sup>3+</sup> EM SOLUÇÕES SÓLIDAS DE FLUORETO DE CÁLCIO COM AlF<sub>3</sub>, YbF<sub>3</sub> E LaF<sub>3</sub>**

VALERIO, M. E. G.

Depto. de Física - UFSE

BLAK, A. R.

UFUSP

TRZESNIAK, P.

Depto de Física - EFEI

CHADWICK, A. V.

Chemical Laboratory - University of Kent at Canterbury

JACKSON, R. A.

Chemical Department - University of Keele

Apresentamos, pela primeira vez, estudos empregando Simulações Computacionais Estáticas e TSPC e TSDC em soluções sólidas de CaF<sub>2</sub> com AlF<sub>3</sub>, YbF<sub>3</sub> e LaF<sub>3</sub>. Os espectros de TSDC revelaram que: i) abaixo de 270K, as amostras só com Yb<sup>3+</sup>, La<sup>3+</sup> e as multipodadas possuem a banda dos dipolos 1|0|0|1<sub>1</sub> e dos defeitos 1|0|1|2<sub>1</sub>, e as amostras pura ou só com Al<sup>3+</sup> não apresentam nenhuma banda; ii) acima de 270K, as amostras pura ou só com La<sup>3+</sup> apresentam uma banda em 300K, atribuída a deslocamentos, e uma relaxação próxima à temperatura de polarização. As de-