

ok
v
Mysto

2001

charge states were measured in the wavenumber range from 5900 until 25000 cm^{-1} . Surprisingly, for U^{3+} ($5f^3$) less optical transitions have been detected compared to U^{4+} ($5f^2$). This observation is explained with the symmetry reduction of U^{4+} ion by charge compensating Li vacancies.

[Painel - 14:00]

**DEPOLARIZATION CURRENTS AND
PARAMAGNETIC RESONANCE OF IRON
IN AMETHYST**

SALETE UGATTI CORTÉZÃO, ANA REGINA BLAK
Instituto de Física, USP

This work is mainly concerned with the characterisation of natural Brazilian amethyst species applying Thermally Stimulated Depolarisation Currents (TSDC) and Electron Paramagnetic Resonance (EPR) techniques. A correlation between TSDC and EPR results was observed. The TSDC spectra show four bands of dipole origin. A broad band at 215K originated from the superposition of three bands at 185, 200 and 214K and another one at 257K. The thermal decay of the bands between 373 and 773K is higher for increasing temperatures and for longer treatments. The observed dipole centres are attributed to Fe^{3+} replacing Si^{4+} near an alkali ion in the three possible equivalent sites. The differences in the intensity of the bands are due to the unequal distribution of centres among the three equivalent sites. EPR measurements, at room temperature have been performed in powder and crystal samples. Spectra of very high complexity were obtained. The spectra show a set of lines in the 2000G region, an intense peak at 3050G and three small peaks at 4000, 5400, and 7000G in the position where the magnetic field is parallel to one of the three crystallographically equivalent sites of the amethyst. When the crystal is aligned with the c-axis parallel to the magnetic field, there is a set of lines at 2000G, two intense peaks around 5000G and a small peak at 6800G. Powder samples show a single broad band around 3400G. Fe^{3+} centres provide the dominant features of the EPR spectra of amethyst. Due to the complexity of the crystal EPR spectra, the thermal treatments were performed in powder samples. It was observed a similar thermal reduction of the 3400G band compared to the TSDC results.

[Painel - 14:00]

**DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS DE
REDE DO QUARTZO β UTILIZANDO UM
DIAGRAMA DE DIFRAÇÃO MÚLTIPLA
DE NÊUTRONS**

LUIZ CARLOS DE CAMPOS, CARLOS BENEDICTO
RAMOS PARENTE, VERA LUCIA MAZZOCCHI
IPEN-CNEN/SP
OTAVIANO HELENE

A. M.

IFUSP

Neste trabalho, difração múltipla de nêutrons é utilizada na determinação dos parâmetros a e c da rede hexagonal do quartzo β , uma das fases de alta temperatura da sílica (SiO_2). Para isso foi utilizado um diagrama experimental de difração múltipla de nêutrons, obtido com a reflexão 00.1 de um cristal de quartzo aquecido na temperatura de cerca de 1000 K. A indexação do diagrama do quartzo β , utilizando um programa de computador (INDEXHEX), mostrou uma alta densidade de reflexões secundárias, enquanto que o diagrama experimental mostrava uma baixa densidade de picos. Esta baixa densidade foi confirmada através da simulação do diagrama, utilizando um programa de computador derivado do programa MULTI. Para associar os picos experimentais às reflexões secundárias, indicadas pela indexação e que efetivamente são formadoras dos picos, foi desenvolvido o programa MULTIQZB o qual simula diagramas de difração múltipla de nêutrons para reflexões primárias 00.1 do quartzo β , com bastante precisão. O emprego do MULTIQZB aliado aos programas GAUSS, de ajuste de Gaussianas aos picos, e INDEXHEX, levou à determinação inequívoca das reflexões secundárias predominantes na formação de cada pico do diagrama experimental. A partir da identificação inequívoca das reflexões secundárias que efetivamente são as formadoras dos picos de difração múltipla do quartzo β , verificamos que existem picos cujas posições angulares azimutais (ϕ) são mais sensíveis à variação do parâmetro a da rede do que à variação do parâmetro c. Por outro lado, existem picos cujas posições são mais sensíveis à variação de c do que de a. Tendo por base este fato, e para uma melhor determinação destes parâmetros, os picos foram divididos em duas categorias: aqueles que são mais adequados à determinação de a e aqueles que são mais adequados à determinação de c. A seleção foi feita com base na razão $R = \Delta\phi_a/\Delta\phi_b$, onde as distâncias angulares $\Delta\phi$ s foram obtidas de picos simulados quando um dos parâmetros é mantido fixo e o outro, aquele indicado pelo sub-índice, assume dois valores diferentes. Para valores de $R \gg 1$, os resultados mostram que as posições azimutais dos picos selecionados são mais sensíveis à variação de c do que de a. Neste caso, os picos são mais adequados à determinação de c. Inversamente, para valores de $R \ll 1$, as posições azimutais dos picos são mais sensíveis à variação de a do que de c, sendo os picos mais adequados à determinação de a. No caso em que $R \approx 1$, os picos são igualmente sensíveis a ambos os parâmetros. Deve ser acrescentado que de um modo geral a determinação de um parâmetro é tanto melhor quanto maior for o valor algébrico de R. Este processo de seleção foi estendido para todos os picos do diagrama experimental anteriormente selecionados para serem utilizados no processo de determinação dos parâmetros. Com esta classificação tornou-se possível empregar um método iterativo para a determinação de ambos os parâmetros.

9007

A iteração se estendeu até 8 ciclos de cálculos de cada parâmetro. De acordo com Chechev e Egorov (Applied Radiation and Isotopes, 52:601-608, 2000), os valores médios dos parâmetros, em cada ciclo, foram calculados pela média ponderada e as incertezas associadas à média ponderada foram calculadas em termos da consistência do conjunto de dados. Os valores encontrados após os 8 ciclos de iteração foram: $a = 4,9964 \pm 0,0018$ e $c = 5,46268 \pm 0,00052 \text{ \AA}$.

[Painel - 14:00]

DIFUSÃO DE ÍONS DE Mn, V, Cr e Fe EM CRISTAIS DE BERILO INCOLOR

JUAN C. R. MITTANI, SHIGUEO WATANABE
IFUSP

Difusão é um processo pelo qual a matéria é transportada através da matéria. Os defeitos nas redes cristalinas podem ser estudados através da observação e análise do transporte dos seus átomos. Os estudos de difusão nos sólidos conduzem diretamente ao estudo da migração dos átomos, migração esta que é analisada em termos de seqüências de saltos dos átomos para diferentes posições na rede cristalina. Os estudos destes mecanismos estão ligados aos defeitos cristalinos, e, em particular aos defeitos pontiformes. Os estudos de difusão dão informações sobre as propriedades destes defeitos, particularmente, no que concerne à sua formação e migração.

No presente trabalho é feito o estudo da difusão de íons de manganês Mn em cristais de berilo incolor ou chamado também de goshenita. A difusão é feita sobre placas do cristal as quais foram cortadas paralelo e perpendicular ao eixo C do cristal. Para o processo de difusão é usado sal de cloreto de manganês, cromo, vanádio e ferro. Uma camada fina do sal é depositado nas faces entre dois cristais de goshenita, estas faces foram polidas previamente. Os cristais na forma ABA (onde A é o cristal e B a camada fina do sal) foram colocados dentro de um forno e recozidos gradativamente até atingir a temperatura de 700°C. Os tempos de recozimento usados foram de 6,048E5 para uma primeira amostra 1,2096E6 de uma segunda e 1,8144E6 para uma terceira amostra. Medidas do coeficiente de difusão, absorção óptica e ressonância paramagnética EPR foram medidas nas amostras após a difusão.

[Painel - 14:00]

DIPOLE DEFECTS IN $\text{Al}_2\text{O}_3:\text{Mg}$, Cr

ANA REGINA BLAK, KATIÚSCIA NADYNE
CASSEMIRO, VLADIMIR GOBBI JR, FREDERICO
AYRES DE OLIVEIRA NETO
Instituto de Física, USP

Al_2O_3 is a well-known material that has been extensively studied during the past decades. In this work, dipole defects are investigated applying the Thermally

Stimulated Depolarisation Currents (TSDC) technique. The TSDC spectrum of the Al_2O_3 doped with Mg and Cr shows an intense band at 250K of dipole origin. It has been observed an increase of the band with γ -irradiation and a thermal decrease after heat treatments at 1000K. Impurity neutron activation analysis shows that magnesium, chromium and iron content varies from 15 to 60ppm. Optical Absorption (OA) measurements confirm the presence of both, chromium and iron. OA spectra show a broad band centred in 3.1eV associated with holes trapped in the form of O^- ions adjacent to sites of positive charge deficiency. This may indicate, following Vila and Jiménez de Castro(1), that a substitutional Mg^{2+} ion with a trapped hole localised on one of the six oxygen ions surrounding the magnesium impurity is the dipole responsible for the observed TSDC band.

(1)Vila R. and Jiménez de Castro M. (1994) Physical Review B49, 1696-1704

[Painel - 14:00]

ENERGETIC HEAVY ION RADIATION EFFECT ON BRAZILIAN EMERALDS.

E. KUZMANN

Department of Nuclear Chemistry, Eötvös University,
Budapest, Hungary.

V. K. GARG, A. C. DE OLIVEIRA, G. C. B. BRAGA,
R. GARG

Institute of Physics, University of Brasília, 70910-900
Brasília, Brazil.

The dark green coloured emeralds are a Cr-containing variety of beryl, $\text{Be}_3\text{Al}_2\text{Si}_6\text{O}_{18}$. Their colour is a result of Cr cations acting as colour centres in the structure. Emerald has a hexagonal crystal structure in which Al^{3+} and Be^{2+} cations are coordinated with oxygen ions in an octahedral and tetrahedral configuration, respectively. Beryls can contain a small amount of iron as well. Price et al used Fe^{57} Mössbauer spectroscopy to study the location of iron in the structure of beryl. Their sample contained Fe^{2+} at two different sites in the structure of beryl. One of the sites was identified as the regular site of Be^{2+} , and the other as the regular site of Al^{3+} . Apart from Fe^{2+} ; they found the existence of a relatively small amount of Fe^{3+} in their samples. At the same time by applying a heat treatment on 600°C for 1h they observed an evidence for a heat-induced reduction of Fe^{3+} to Fe^{2+} . Their results indicated that Fe^{3+} occupies Al^{3+} as well as Be^{2+} sites in the structure, just like Fe^{2+} cations do. Platonov et al. have shown that in beryls containing iron the heat induced reduction of Fe^{3+} to Fe^{2+} is connected to the colour change of beryl observed simultaneously. To study the effect of irradiation on the valence state of iron (Fe^{3+} to Fe^{2+} transformation) Brazilian emerald samples originating from Goiás, Brazil, containing a significant portion of Fe^{3+} beside Fe^{2+} , were irradiated