

ESTUDO DA INTERAÇÃO DE ÁTOMOS DE HIDROGÊNIO COM IMPUREZAS EM METAIS DE TRANSIÇÃO

José Mestnik Filho, Artur Wilson Carbonari, Willi Pendl Jr., Rajendra Narain Saxena
Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, São Paulo

Palavras-Chave: defeitos, hidretos metálicos, correlação angular γ - γ perturbada

A interação entre átomos de hidrogênio e impurezas, ambos diluídos em metais e/ou ligas de metais de transição, é investigada pela técnica de correlação angular perturbada de raios gama utilizando núcleos sonda de ^{181}Ta formados a partir do decaimento β^- do ^{181}Hf , previamente dissolvido nas matrizes metálicas de Ti, Pd e Rh_3Zr . É de se esperar que impurezas substitucionais com raios atômicos maiores que os dos átomos da matriz hospedeira, porém de natureza química similar, atraiam átomos de hidrogênio. O mesmo é esperado para impurezas situadas à esquerda, na tabela periódica, em relação aos átomos da matriz⁽¹⁾. Surpreendentemente não foi observada nenhuma interação entre átomos de hidrogênio e átomos de Hf e/ou Ta em temperaturas acima de 77 K em quaisquer das redes metálicas estudadas. Resultados obtidos após absorção de oxigênio pelas redes metálicas, são completamente distintas quando comparadas com o caso da absorção de hidrogênio. São várias as interpretações possíveis para o resultado obtido. 1) A interação entre átomos de hidrogênio e as impurezas é tal que resulta numa mudança desprezível do gradiente de campo elétrico próximo ao átomos de Hf/Ta, hipótese pouco provável uma vez que são observadas mudanças em concentrações elevadas de hidrogênio. 2) O efeito de atração compete com efeitos energeticamente mais favoráveis como a formação de precipitados. Este efeito é difícil de se controlar na prática, porém é minimizado ao se realizar as medidas em função de concentrações variáveis de hidrogênio e com vários tratamentos térmicos diferentes antes das medidas. 3) O perfil da distribuição de cargas ao redor da impureza de Hf/Ta é tal que favorece a aproximação de átomos de hidrogênio na primeira vizinhança mas desfavorece na segunda vizinhança. Esta é uma hipótese muito interessante que estaria de acordo com os resultados obtidos.

(1) A.I. Shirley and C.K. Hall. Acta Metall. 32(1) (1984) 49.

ESTUDO DAS PROPRIEDADES ÓTICAS DE GARNETS $\text{Ca}_3\text{Ga}_2\text{Ge}_3\text{O}_{12}$ DOPADOS COM OS ÍONS Er^{3+} E Cr^{3+}

Ricardo Costa de Santana, Maria Cristina Terrile, Luís Antônio de Oliveira Nunes e Heitor Cury Basso

Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Gaston Eduardo Barberis

Instituto de Física Gleb Wataghin - Universidade de Campinas

Palavras-chave: Garnet, Tetrahédrico, Dodecahédrico.

Monocristais com estrutura "garnet", quando dopados com elementos de transição e/ou terras-raras são, particularmente, utilizados como meios ativos na construção de LASERS de estado sólido. Neste trabalho investigamos as propriedades ópticas do garnet $\text{Ca}_3\text{Ga}_2\text{Ge}_3\text{O}_{12}$ (CGGG) dopado com íons Er^{3+} e duplamente dopado com Er^{3+} e Cr^{3+} , em diferentes concentrações, através de técnicas de espectroscopia óptica (absorção, luminescência e espectroscopia seletiva de sítios) em diferentes temperaturas. No CGGG os íons Er^{3+} substituem, habitualmente, os íons Ca^{2+} em sítios com simetria dodecahédrica (D_{2d}), enquanto que os íons Cr^{3+} substituem íons Ga^{3+} em sítios tetrahédricos (T_d)⁽¹⁾. Em reuniões anteriores foram apresentados estudos destes garnets através da técnica de RPE com a qual foi descoberta a existência de mais de um sítio de diferente simetria ocupado pelo íon Er^{3+} , e foi calculado o fator-g para este mesmo íon⁽²⁾. Espectros de fluorescência foram obtidos para as transições $^4\text{S}_{3/2} \rightarrow ^4\text{I}_{15/2}$ ($\lambda \approx 550\text{nm}$), $^4\text{S}_{3/2} \rightarrow ^4\text{I}_{13/2}$ ($\lambda \approx 858\text{nm}$) e $^4\text{F}_{9/2} \rightarrow ^4\text{I}_{15/2}$ ($\lambda \approx 660\text{nm}$) a partir dos quais determinamos as estruturas dos estados fundamental, $^4\text{I}_{15/2}$, e primeiro estado excitado $^4\text{I}_{13/2}$ do íon érbio. A dependência da fluorescência correspondente à transição $^4\text{S}_{3/2} \rightarrow ^4\text{I}_{15/2}$ também é analisada. Determinamos, então, a partir das medidas de fluorescência os valores dos parâmetros de campo cristalino $B_0^2, B_4^0, B_4^4, B_6^0, B_6^4$ e o fator-g para o íon Er^{3+} em sítio com simetria D_{2d} . Das medidas de absorção constatamos, mais uma vez, a existência de mais do que um sítio de diferente simetria ocupados pelos íons Er^{3+} . Utilizaremos a técnica de espectroscopia seletiva de sítios para identificar quais transições observadas correspondem aos diferentes sítios.

⁽¹⁾Y. Gao e col. J. Phys. Cond. Matter, vol. 4, 7307 (1992) ⁽²⁾J.L. Moraes e col. Sol. Stat. Comm., vol. 95(4), 251 (1995)