

DETERMINAÇÃO DA SIMETRIA DA SUPERESTRUTURA DE HIDROGÊNIO NO HIDRETO METÁLICO $Z_rV_2H_4$

JOSÉ SUASSUNA FILHO

Departamento de Física do Centro de Ciências e Tecnologia da Universidade Federal da Paraíba - Campus II - Campina Grande - PB

Palavras-Chave: hidreto, superestrutura, ressonância

O hidreto $Z_rV_2H_x$ tem despertado considerável interesse científico e tecnológico por ser estável, absorver grande quantidade de hidrogênio em condições normais, além de se constituir num dos poucos hidretos metálicos ternários a exibir uma superestrutura de íons hidrogênio na estequiometria $Z_rV_2H_4$. Neste trabalho nós evoluímos a Hamiltoniana de campo cristalino induzido pelos quatro íons de hidrogênio, assumindo íons negativos (modelo aniônico H) ocupando os quatro sítios intersticiais do tipo 2/2A disponíveis na rede do Z_rV_2 , abaixo da temperatura de transição da superestrutura. Os cálculos evidenciam uma sub-rede de hidrogênio de simetria tetraédral em torno dos átomos de zircônio. Os parâmetros de quarta e sexta ordem do campo cristalino (B_4 e B_6) bem como o parâmetro de Lea, Leask e Wolf (x) foram calculados ($x = -0.1$), resultando num estado fundamental Γ_7 para o íon Er^{3+} substitucional ao Z_r na matriz $Z_rV_2H_4 \cdot Er$. Realizamos experiências de Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE) no hidreto $Z_rV_2H_x$. Er a baixas temperaturas e os resultados experimentais obtidos ($g_{ex} = 6.75 \pm 0.05$) são inteiramente consistentes com um estado fundamental Γ_7 para o Er^{3+} , teoricamente previsto. A carga negativa assumida para os íons de hidrogênio corresponde ao modelo aniônico (H) e está consistente como o modelo de Miedema de transferência de cargas no processo de formação de hidretos metálicos. De acordo com este modelo, elétrons são transferidos de átomos menos eletronegativos (Z_r ou V) para átomos mais eletronegativos (H). Em resumo, cálculos e resultados experimentais de RPE confirmam a ocorrência de uma superestrutura de hidrogênio no $Z_rV_2H_4$ com os íons H ocupando os quatro sítios intersticiais tipo 2/2A ($2Z_r$, $2V$) disponíveis, resultando numa sub-rede de hidrogênio de simetria tetraédral, em torno do átomo Z_r . Nossos resultados estão também consistentes com outros obtidos por difração de neutrons e confirmam a RPE como uma ferramenta poderosa no estudo de hidretos metálicos (CNPq).

ESTUDO DE CRISTAIS LASER ATIVOS ATRAVÉS DA ANÁLISE TÉRMICA: $LiSrAlF_6$

ANA MARIA DO ESPÍRITO SANTO, SONIA LÍCIA BALDOCHI, SPERO PENHA MORATO

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

Divisão de Materiais Optoeletrônicos

JIVALDO DO ROSÁRIO MATOS

Instituto de Química da Universidade de São Paulo - USP

Palavras-Chave: síntese de fluoretos, refino por zona, $LiSrAlF_6$

Atualmente, os lasers de estado sólido são amplamente utilizados em diversas áreas de pesquisa e de desenvolvimento tecnológico. As crescentes aplicações de diferentes monocristais nos dispositivos optoeletrônicos têm incentivado o desenvolvimento paralelo na obtenção de novas matrizes laser ativas. No início dos anos 90, obteve-se ação laser em cristais de $LiSrAlF_6$ e $LiCaAlF_6$ ativados com Cr. Estes compostos apresentam uma combinação de características que os tornam lasers sintonizáveis. Um cristal laser ativo necessita fundamentalmente de uma alta qualidade óptica que está diretamente relacionada ao processo de crescimento. Um fator de extrema importância é o grau de pureza e o processamento dos reagentes para a obtenção do composto final utilizado no crescimento do monocristal. O objetivo deste trabalho é o estudo dos processos de síntese e purificação destes compostos para o crescimento de monocristais com alto grau de pureza. Para tal finalidade, à partir da Termogravimetria (TG) e Análise Térmica Diferencial (DTA), faz-se um controle quanto as características dos reagentes comerciais de partida (óxidos e carbonatos correspondentes) e dos fluoretos-base obtidos através da Hidrofluorinação (SrF_2 , CaF_2 , AlF_3 , CrF_3). O composto quartenário é obtido por fusão dos fluoretos-base em atmosfera reativa e posteriormente purificado através da técnica de Refino por Zona. Foi observado, através da DTA, que a presença de impurezas altera o comportamento da fusão do composto (congruente ou incongruente) e que ocorre alteração da estequiometria de partida devido à evaporação de um dos componentes.

(FAPESP)