

6-10 junho, 1995

N / CNEN - SP
BIBLIOTECA
Produção Científica**ESTUDOS DE TRANSIÇÕES DE FASE ESTRUTURAIS POR ESPALHAMENTO DE LUZ**

ROBERTO LUIZ MOREIRA, MARCOS ASSUNÇÃO PIMENTA

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais

JEAN-YVES GESLAND

Université du Maine, UMC, Le Mans, França

As técnicas de espectroscopia óptica, em particular Raman e Infra-vermelho, constituem ferramentas poderosas, elegantes e bastante acessíveis na caracterização das fases cristalinas dos materiais. No presente trabalho nós procuraremos exemplificar a aplicação dos métodos utilizados pelo espectroscopista Raman nos estudos de transições de fase estruturais. O sistema cristalino a ser abordado será o Li_3ThF_7 e os dados apresentados constituem pesquisa original que visa contribuir para o debate acerca de uma transição de fase que lhe é atribuída a 341K. Através de uma análise dos espectros obtidos em geometria de retro-espalhamento Raman, nós mostraremos que a evolução térmica dos espectros é coerente com uma transição de fase tetragonal-ortorrômbica, como recentemente proposto via análise por difração de neutrons, mas que várias divergências aparecem em relação à literatura. Em particular, amostras crescidas pela técnica de Czochralski apresentam temperatura de transição bem mais elevada, e encontramos evidências de outra transição de fase abaixo da temperatura ambiente. Nossos dados são complementados por medidas de birrefringência (in-situ) e de calorimetria (DSC).

Financiamento: FAPEMIG, CNPq e FINEP.

CARACTERIZAÇÃO ESPECTROSCÓPICA DE CRISTAIS DE $BaLiF_3:Co^{2+}$

MARCOS DUARTE, EVELY MARTINS, SONIA LÍCIA BALDOCHI, NILSON DIAS VIEIRA JR, MARTHA MARQUES FERREIRA VIEIRA

IPEN - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares

Foi feito um estudo do cristal iônico $BaLiF_3$ dopado com duas concentrações do íon de metal de transição Co^{2+} : 0,05 e 0,44 mol%, à temperatura ambiente (300 K) e a 10 K. Ambos os cristais apresentam propriedades espectroscópicas típicas do Co^{2+} em simetria octaédrica pura. A importância desses cristais está no fato de apresentarem emissão na região do infravermelho próximo, sendo então um potencial meio laser ativo, na categoria dos lasers vibrônicos. O $BaLiF_3:Co^{2+}$ possui duas bandas intensas de absorção, na região de 20000 cm^{-1} (500 nm), correspondente à transição ${}^4T_1({}^4F) \rightarrow {}^4T_1({}^4P)$ e na região de 8264 cm^{-1} (1210 nm), correspondente à transição ${}^4T_1({}^4F) \rightarrow {}^4T_2({}^4F)$, com larguras de banda da ordem de 20%, e uma banda mais fraca em 16667 cm^{-1} (600 nm), correspondente à transição ${}^4T_1({}^4F) \rightarrow {}^4A_2({}^4F)$. Este sistema possui uma única emissão na região de 6297 cm^{-1} (1588 nm), correspondente à transição ${}^4T_2({}^4F) \rightarrow {}^4T_1({}^4F)$, com largura espectral (FWHM) de 426 nm, à temperatura ambiente (Apoio financeiro: FAPESP e CNPq/RHAE).

Propriedades e Caracterização I (CCP) -
07/06/95

DINÂMICA DE REDE EM CRISTAIS DO TIPO $Li_{(1-x)}H_xIO_3$.

MARCELO A. S. OLIVEIRA, MARCOS A. PIMENTA, PATRICE BOURSON

Departamento de Física - UFMG Caixa Postal 702 - Belo Horizonte

O cristal $LiIO_3$ tem sido intensamente estudado nos últimos anos, devido a propriedades de óptica não linear e efeitos piezelétricos nele existentes. Os processos de síntese bem como estudos feitos com o ob-

jetivo de aumentar a condutividade em cristais de $LiIO_3$ originaram o estudo de cristais mistos do tipo $Li_{(1-x)}H_xIO_3$, que é uma composição de $\alpha-LiIO_3$ e $\alpha-HIO_3$. O cristal misto $Li_{(1-x)}H_xIO_3$, tem um particular interesse, uma vez que o próton é parte da rede, gerando uma alta condutividade iônica, bem como propriedades ferroelétricas e um grande número de transições de fase. O estudo da dinâmica de rede foi realizado à temperatura ambiente. Medidas de espalhamento de luz usando a técnica micro-raman foram obtidas para alguns valores de concentração x . Para valores entre 0.22 e 0.36, os resultados apontam no sentido de uma estrutura desordenada com simetria média hexagonal. Verificamos ainda a diminuição do caráter anisotrópico com o aumento da concentraç ao