

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

Neste trabalho, curvas de intensidade de difração de nêutrons, obtidas pelo método do cristal girante ("rocking curves") com monocristais da fluoroperovskita  $BaLiF_3$  crescidos pelo método Czochralski, foram relacionadas com parâmetros de crescimento envolvidos no método. A utilização de nêutrons permitiu uma observação global e simultânea de toda a massa cristalina. Três aspectos foram considerados no estudo, a saber, uniformidade do cristal, direção de crescimento e velocidade de rotação. Foram medidas diversas amostras, crescidas nas direções  $\langle 100 \rangle$  e  $\langle 111 \rangle$ , com velocidades de rotação 10, 20, 30, 40 e 60 rpm, considerando-se duas regiões de observação: cone inicial e corpo. As curvas obtidas indicaram a  $\langle 100 \rangle$  como sendo a direção de crescimento, que apresenta maior perfeição cristalina, quando o crescimento é realizado a partir de uma interface plana ( $\omega = 30$  rpm). Entretanto, nos cristais obtidos nessas condições, observou-se a formação de trincas durante o processo de resfriamento, ou logo após a sua retirada do forno, além de segregação de impurezas na região central dos mesmos. Já para a direção  $\langle 111 \rangle$ , apesar das curvas de intensidade apresentarem uma largura de mosaico maior, raramente observou-se a formação de trincas. No que se refere ao aspecto velocidade de rotação, verificou-se que as velocidades de 20 e 60 rpm resultam na formação de vários domínios mosaicos, sendo os melhores resultados encontrados para velocidades de 30 e 40 rpm, que correspondem ao crescimento a partir de interfaces planas.

**DOPAGENS EM FIBRAS  
MONOCRISTALINAS ATRAVÉS DA  
TÉCNICA "PAINT-ON"**

ANDREETA, M. R. B.; LIMA, C. J. DE; PEDRO  
ANDREETA, J. P.; HERNANDES, A. C.

*Universidade de São Paulo, Instituto de Física e Química  
de São Carlos-DFCM, Grupo de Crescimento de Cristais.*

Recentemente, fibras monocristalinas estão emergindo como um novo componente com potencialidade para substituição de substratos planares em aplicações em telecomunicações, devido a rapidez dos processos de preparação (aproximadamente 60 vezes mais rápidos que os processos convencionais de preparação de monocristais), o seu baixo peso e custo, a sua forma geométrica (tornando-as flexíveis para pequenos diâmetros) conveniente para a utilização como guias de onda, geração de segundo harmônico, produção de componentes ativos de minilasers de estado sólido, dispositivos eletro e acústico-ópticos, fibras supercondutoras de alta temperatura crítica e em holografia entre outras aplicações. Utilizando a técnica de crescimento de fibras monocristalinas por fusão a laser (LHPG), foram produzidas fibras monocristalinas de  $LiNbO_3$  e  $LiTaO_3$  dopados através da técnica "paint-on". Esta técnica consiste na deposição do dopante sobre o ma-

terial de partida (nutriente) na forma de um filme espesso. Quando associada à técnica LIIPG, a técnica "paint-on" permite o desenvolvimento de materiais dopados com extrema facilidade, quando comparada a técnicas convencionais como por exemplo, Bridgman e Czochralski. Além de não utilizar cadinhos, estudos do efeito de dopantes nas propriedades físicas de monocristais podem ser rapidamente realizados, devido a possibilidade de se preparar dopagens diferentes, em regiões distintas da fibra, em um único processo de crescimento. A fim de demonstrar a versatilidade da técnica, fibras de  $LiNbO_3$  foram preparadas com dopagens alternadas ao longo desta com Ferro, Cromo e Európio, o que seria impossível de se realizar em técnicas convencionais de crescimento de cristais.

**RELAXAÇÃO DIELÉTRICA DE ÍONS  $Cu^{+}$   
EM  $CaF_2$**

OLIVEIRA, L.; LI, M. S.

*Instituto de Física e Química de São Carlos - USP*

PEDRINI, C.

*Laboratoire de Physico-Chimie des Matériaux*

*Luminescents, Unité de Recherche Associée au CNRS 442,*

*Université Lyon 1 - France*

BILL, H.

*Départament de Chimie Physique, Université de Genève -  
Switzerland*

Trabalhos anteriores [1] mostraram que as impurezas  $Cu^{+}$  em  $CaF_2$  são responsáveis pelas bandas de absorção em 301 e 326 nm e por uma intensa fluorescência em 540 nm, tendo-se concluído que o íon  $Cu^{+}$  fica numa posição substitucional fora de centro. A introdução desta impureza na rede de  $CaF_2$ , sugere a o problema de compensação de cargas, onde os resultados espectroscópicos não mostraram nenhuma evidência em relação a existência de pares de  $Cu^{+}$  e impureza-vacância (i-v). O íon  $Cu^{+}$  em posição fora de centro, pares de  $Cu^{+}$  e i-v formam dipolos elétricos, e neste trabalho, nos propomos a investigar, através da técnica de corrente termicamente estimulada (TSDC), a presença destes defeitos em  $CaF_2$ . Os resultados indicam a presença de três bandas em temperaturas de 52, 144 e 187 K, cujas energias de ativação é de 0.14, 0.42 e 0.63 eV, com intensidade maior da banda em 144 K. Desde que, foram observadas três tipos de relaxação, isto sugere a existência de dipolos elétricos formados não somente por aqueles atribuídos ao efeito fora de centro, mas também a outros defeitos locais, como possivelmente os que são mencionados acima.

**DIFUSIVIDADE TÉRMICA DE CRISTAIS  
 $BaLiF_3$**

DUARTE, M.; VIEIRA, M. M. F.; BALDOCHI, S. L.

*IPEN - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares*

Cristais de  $BaLiF_3$  dopados com íons de terras raras constituem-se num meio laser ativo bastante promissor. O cristal  $BaLiF_3$  é uma perovskita invertida com

estrutura cúbica, onde os íons de  $\text{Li}^+$  e  $\text{Ba}^{++}$  estão em posições trocadas, resultando numa interação de campo cristalino diferente da estrutura perovskita clássica. As transições eletrônicas nesse cristal, quando dopado com íons de metais de transição, apresentam bandas largas, ideais para obtenção de laser sintonizável ou geração de pulsos curtos. A difusividade térmica, parâmetro de grande importância para o crescimento de cristais, engenharia de lasers e espectroscopia fotoacústica, entre outras áreas, foi determinada para um cristal de  $\text{BaLiF}_3$  puro, à temperatura ambiente. Nessa determinação foi utilizado o método fotoacústico da diferença de fase, que consiste em se medir a diferença de fase do sinal fotoacústico quando se ilumina pela frente e por trás da amostra, para uma mesma frequência de modulação (Apoio FAPESP, CNPq/RHAE).

### CARACTERIZAÇÃO DE INCLUSÕES FLUIDAS EM MINERAIS POR ESPECTROSCOPIA MICRO-RAMAN

PIMENTA, M. A.

Departamento de Física - UFMG Caixa Postal 702 - Belo Horizonte

FUZIKAWA, K.

CDTN - Belo Horizonte

A grande vantagem de se estudar inclusões fluidas em minerais por espectroscopia micro-Raman reside no fato desta técnica ser não destrutiva permitindo o estudo dos fluidos e sólidos nas condições de pressão em que se encontram dentro das inclusões. A luz do laser incide na amostra através da objetiva de um microscópio tornando possível a caracterização de inclusões de até  $1 \mu\text{m}^3$ . Uma série de minerais abundantes em inclusões fluidas têm sido estudados, como quartzos, topázios imperiais e esmeraldas. Os compostos encontrados com maior frequência nas inclusões são o  $\text{CO}_2$ ,  $\text{NH}_4$  e  $\text{N}_2$ . Pudemos também detectar a presença de  $\text{H}_2\text{S}$  em minerais encontrados próximos à jazidas auríferas. Algumas fases sólidas puderam ser identificadas através do espectro Raman, como carbonatos de sódio e magnésio em matrizes de quartzo e microcristais de quartzo em esmeraldas.

Suporte financeiro : FAPEMIG.

### SOBRE UM NOVO MÉTODO DE MEDIÇÃO DAS PROPRIEDADES ÓPTICAS EM VIDROS - I

REYNOSO, V. C. S.; BARBOSA, L. C.; ROJAS, R.

F.; CESAR, C. L.

UNICAMP/IFGW

ALVES, O. L.

UNICAMP/IQ

Neste Trabalho, explicamos o método de assopramento de vidros óxidos de metais pesados após o processo de fusão dos seus componentes para produzir filmes finos com espessuras menores que  $5 \mu\text{m}$ , necessários para a

obtenção do espectro de transmissão na faixa de 200 - 2500 nm. Com os dados deste espectro fizemos o cálculo da espessura da amostra e dos índices de refração segundo o método desenvolvido por Swanepoel<sup>a</sup>. Ajustamos estes índices de refração na equação de Sellmeier<sup>b</sup> permitindo dessa maneira extrapolar às regiões de forte absorção no ultravioleta às regiões no infravermelho. Com esses valores encontramos o coeficiente de absorção e o gap óptico do vidro. Utilizando o modelo de dispersão dos índices de refração de Wemple<sup>c</sup>, encontramos diversos parâmetros ópticos como a energia média das excitações eletrônicas  $E_s$ , denominada gap de Sellmeier, a energia de dispersão  $E_d$  e a energia de ligação inter-iônica  $E_l$  úteis para os cálculos do índice de refração não linear e a dispersão material  $M(\lambda)$  do vidro. Procuraremos correlacionar algumas destas propriedades ópticas com as propriedades estruturais destes vidros. (TELEBRAS/PDO)

<sup>a</sup>R. Swanepoel, J. Phys. E: Sci. Inst. 16, 609 (1983).

<sup>b</sup>M. Rousseau, J. P. Mathieu, in: "Problems in Optics", 208 (1973).

<sup>c</sup>S. H. Wemple, J. Chem. Phys., 67, 2151-68 (1977).

### Propriedades e Caracterização I (CCP) - 20/05/93

#### ESTUDO TEÓRICO DAS PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DO SÓDIO SÓLIDO

ZUBOV, V. I.

UFG

ORTIZ, J. F. S.; TRETYAKOV, N. P.

Univ. Amizade dos Povos - Moscou - Russia

O método Correlativo Não-Simetrizado do Campo Autoconsistente <sup>a, b</sup> é aplicado ao cálculo das propriedades termodinâmicas do sódio. Os termos anarmônicos principais são incluídos na aproximação zero, e com a teoria de perturbações são calculados os termos de quinta e sexta ordem. Nos cálculos, é utilizado o potencial efetivo inter-iônico de Shiff, que contém oscilações de Friedel. São consideradas as primeiras correções quânticas. A dilatação térmica, os módulos de elasticidade, as capacidades térmicas isocórica e isobárica e o parâmetro e Gruneisen são calculados em função da temperatura e a pressão normal. Os resultados são comparados com dados experimentais, e também com dados de cálculos de outros autores, obtidos na aproximação quasi-harmonica. Discute-se o papel dos termos anarmônicos. A sua inclusão melhora a concordância dos resultados da teoria com os dados experimentais, embora no seu total a anarmonicidade nos metais alcalinos seja um pouco mais fraca do que nos cristais de Van der Waals.

<sup>a</sup>V.I. Zubov, Phys.stat.sol.(b) 87,385,88,43 (1978)

<sup>b</sup>V.I. Zubov, Int. J. Mod. Phys. B6, 367(1992).