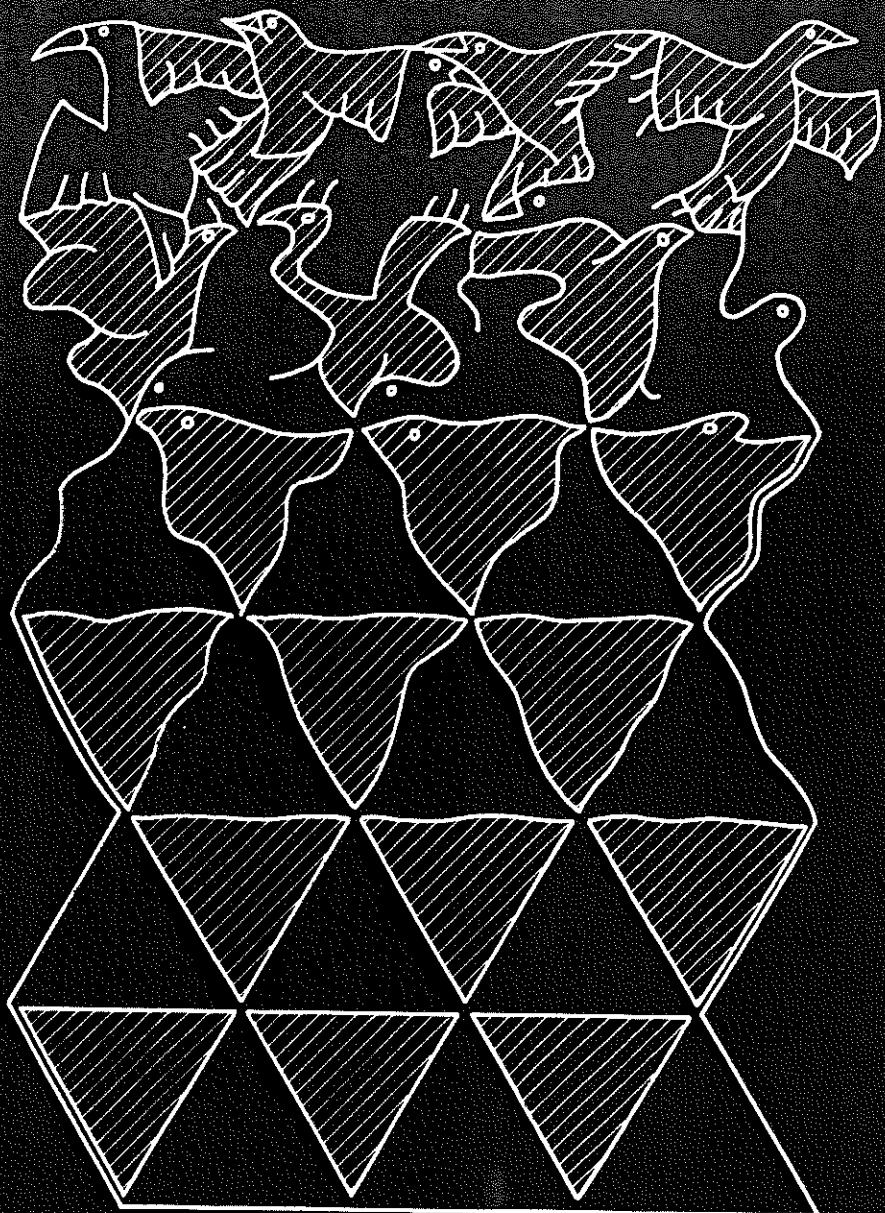


XI ENCONTRO NACIONAL DE FÍSICA  
DA MATÉRIA CONDENSADA



CAXAMBU / MG, 09 A 13 DE MAIO DE 1988

SOCIEDADE BRASILEIRA DE FÍSICA

RES 4/16:30/3af. A COMPENSAÇÃO DE CARGA DO CENTRO  $Tl^{2+}$  NA FAMÍLIA DO KDP. A.J.M. Neves, R.Gazzinelli, G.M. Ribeiro, A.S. Chaves - Departamento de Física, ICEX, Universidade Federal de Minas Gerais.

Recentemente, dados de experimentos de ressonância paramagnética eletrônica (EPR) levaram a elaboração de um novo modelo para a compensação de carga de centros  $Tl^{2+}$ , situado no sitio  $K^+$  de compostos da família do  $KH_2PO_4$  (KDP) [1].

Com o intuito de comprovar este novo modelo estudamos por EPR o ion  $Tl^{2+}$  em  $RbH_2AsO_4$  e  $CsH_2AsO_4$ . Foram determinados os parâmetros do Hamiltoniano de spin nas fases ferroelétrica e paraelétrica e estudada a variação dos espectros com a temperatura. Os ajustes de espetros são feitos por computação e os resultados são usados na verificação do modelo proposto.

#### Referências:

- [1] E.S. Alves, J.F. Sampaio, R. Gazzinelli, A.S. Chaves and G.M. Ribeiro: J. Phys. Soc. Jpn. 56 (1987).

RES 5/16:30/3af. ESPECTROSCOPIA DE ALTA RESOLUÇÃO EM SÓLIDOS POR R.M.N. Bonagamba, T.J., Moretto, G., Colnago\*, L.A., Panepucci, H. (Instituto de Física e Química de São Carlos, Universidade de São Paulo (\*EMBRAPA)).

Quando nos propomos a trabalhar em Espectroscopia de Alta Resolução em Sólidos, nos deparamos com três limitações, para a observação de espetros. A primeira é que as linhas de ressonância são alargadas por interações dipolares (homo e heteronucleares) e quadrupolares anisotrópicas. A segunda é o fenômeno de deslocamento químico anisotrópico que nos levam a complicadas formas de linhas. Em líquidos essas interações estão, em princípio, também presentes porém, são promediatas a zero pelo intenso movimento molecular. Finalmente, a terceira alude aos núcleos com baixo momento magnético e baixa abundância, por exemplo,  $^{31}P$ ,  $^{13}C$ , resultando em baixa sensibilidade e longo tempo de relaxação spin-rede. Algumas das técnicas experimentais utilizadas para superar tais problemas são: desacoplamento ("high power decoupling" - HPD), rotação em ângulo mágico ("magical angle spinning", MAS) polarização cruzada ("cross-polarization", CP) e múltiplos pulsos ("multiple pulse line-narrowing", MP). Para isso estamos construindo cabegões de RMN de dupla ressonância que permitem a rotação da amostra em torno de um ângulo qualquer. Discutiremos as técnicas e os resultados preliminares obtidos com elas. (CNPq, FINEP).

RES 6/16:30/3af. ESTUDO DE TRANSIÇÃO DE FASE DE COMPOSTOS DA FAMÍLIA DA LANGBEINITA, POR RPE. C.J. Franco, R. Gazzinelli, A.S. Chaves e G.M. Ribeiro Departamento de Física, ICEX, Universidade Federal de Minas Gerais.

Os compostos  $(NH_4)_2Cd_2(SO_4)_3$  - ACS e  $Rb_2Cd_2(SO_4)_3$  - RCS, pertencem à família da langbeinita,  $K_2Mg_2(SO_4)_3$ .

ACS apresenta transição de fase em 91K(1) e RCS em 128, 103 e 68K(2). Cristais de ACS e RCS, dopados com tálio, foram crescidos por solução aquosa à temperatura de 365K e irradiados com raio X a 77K, para converter o ion  $Tl^+$  em  $Tl^{2+}$ .

Em ACS, foi feita uma variação angular do espetro de RPE do centro  $Tl^{2+}$  em 68K e um estudo da mudança do espetro entre 20 e 100K. Em RCS, foram feitas variações angulares em cada uma das fases e um estudo da mudança do espetro entre 30 e 143K.

Os parâmetros do hamiltoniano de spin do centro  $Tl^{2+}$  em ACS e RCS, em cada fase, foram determinados por métodos computacionais. A simetria do espetro sugere que o ion  $Tl^{2+}$  entre na rede cristalina no lugar do ion  $NH_4^+$  em ACS e  $Rb^+$  em RCS.

#### Referências:

- 1) C.J. Franco, A.S. Chaves, R. Gazzinelli e G.M. Ribeiro, Rev. Bras. Fis., 16,(1986)306.  
2) M. Maeda, J. Phys. Soc. Jpn., 49, (1980)1090.