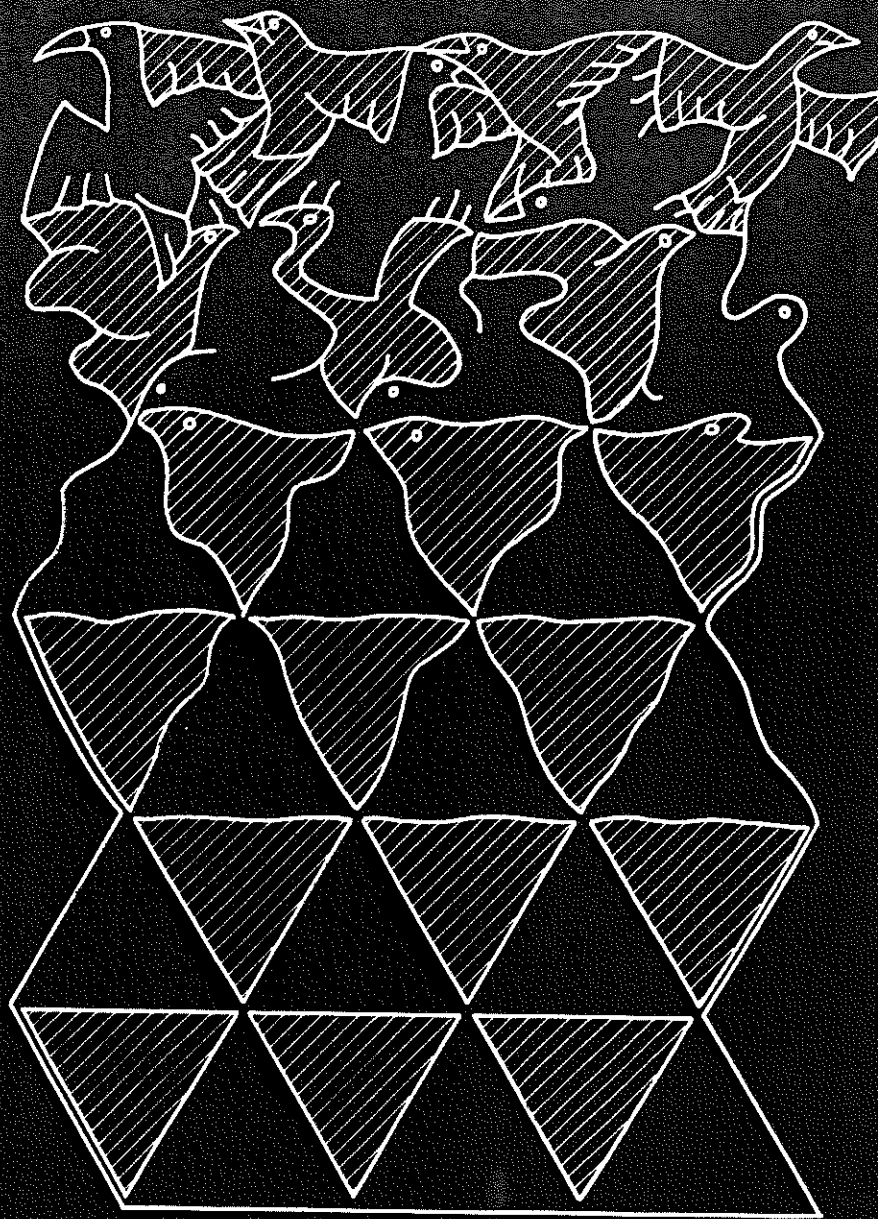


XI ENCONTRO NACIONAL DE FÍSICA
DA MATÉRIA CONDENSADA



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 sítio K^+ de compostos da família do KH_2PO_4 (KDP) [1]. Com o intuito de comprovar este novo modelo estudamos por EPR o íon 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 espectros 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 espectros. 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 promediadas 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 cabeçotes 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 eles. (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 $(NH_4)_2 Cd_2 (SO_4)_3$ - ACS e $Rb_2 Cd_2 (SO_4)_3$ - 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 tâlio, foram crescidos por solução aquosa à temperatura de 365K e irradiados com raio X a 77K, para converter o íon Tl^+ em Tl^{2+} .

Em ACS, foi feita uma variação angular do espectro de RPE do centro Tl^{2+} em 68K e um estudo da mudança do espectro entre 20 e 100K. Em RCS, foram feitas variações angulares em cada uma das fases e um estudo da mudança do espectro 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 espectro sugere que o íon Tl^{2+} entre na rede cristalina no lugar do íon 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.