

trabalhos de pesquisa. No quartzo sintético crescido hidrotêrmicamente, o fator de atenuação na propagação elástica foi medido ao longo das direções X e Z em função da frequência no intervalo de 10 a 90 MHz, usando onda longitudinal a temperatura ambiente. Estas medidas também foram conduzidas em quartzo natural. No tocante a vidros ternários e quaternários, tais como  $(\text{SiO}_2\text{-B}_2\text{O}_3\text{-PbO})$  e  $(\text{SiO}_2\text{-B}_2\text{O}_3\text{-Na}_2\text{O-ZrO})$ , as suas constantes elásticas foram determinadas a partir das medidas de velocidades de onda longitudinal e transversal. Usando o método de imersão em água, foram detectadas regiões de não-homogeneidade local em um bastão de vidro, através de medidas da atenuação na propagação. O presente estudo revela que a caracterização ultrasônica apresenta um grande potencial em ciência dos materiais e na determinação de propriedades físicas de materiais tanto em pesquisa como em processos industriais. (+ Especialista da Japan International Cooperation Agency, JICA).

**108-D.1.4** ESTUDO NUMÉRICO DA DINÂMICA DO TMMC. Bismarck Vaz da Costa e Antonio Sérgio Teixeira Pires (Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais)

A substância TMMC se comporta como um sistema quasi-unidimensional com interação de exchange ( $J > D$ ), entre vizinhos próximos anti-ferromagnética e uma anisotropia (A). Sob campos magnéticos externos ela pode ser descrita pelo hamiltoniano:

$$H = J \sum_n \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1} + A \sum_n (S_n^z)^2 - B \sum_n S_n^x$$

$$|\vec{S}| = 5/2$$

Nos apresentamos alguns estudos numéricos para as equações de movimento deste sistema no limite contínuo, na região de baixa temperatura, utilizando uma expansão de baixa velocidade.

**109-D.1.4** WIDTH OF TIGHT-BINDING BANDS IN DISORDERED SYSTEMS. M. Fabbri (Instituto de Pesquisas Espaciais, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico)

The usual tight-binding formula for bandwidths, derived for crystals, is sometimes employed as an estimation of the corresponding quantities in disordered systems. Here, a numerical investigation of this procedure is carried out, in an attempt to detect the relevant factors determining the bandwidth in the presence of a spatially disordered distribution of atoms.

**110-D.1.4** FURTHER INVESTIGATIONS OF THE HARTREE-FOCK LCAO SOLUTIONS IN LARGE MOLECULES. M. Fabbri (Instituto de Pesquisas Espaciais, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico)

Some features of the self-consistent calculation based in the Hartree-Fock-Roothan (HF-LCAO) approach are investigated. First, the concept of a restricted or unrestricted spin configuration, linked with an open- or closed-shell, is showed to have no simple consequences as is commonly stated in the literature. Second, it is numerically established that the initial configuration, needed as an input in this type of calculation, can cause large amount of errors in the final state. These two effects are shown to be responsible for the incorrect atomic limit of the commonly employed HF-LCAO schemes, and can be of some importance when these are applied to large molecules or clusters.

**111-D.1.4** QUASI-PARTICLE SPECTRUM OF THE HUBBARD MODEL IN THE WEAK AND STRONG CORRELATION REGIMES. R. Kishore (Instituto de Pesquisas Espaciais, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico)

By using a projection operator formalism we obtain a new exact expression for the many particles Green's function. As a concrete application of this result we consider the Hubbard Hamiltonian and obtain the quasi-particle spectrum in the weak and strong correlation regimes. For the weak correlation, we reproduce the result of Chao et al.<sup>1</sup> In the case of strong correlation, the quasi-particle spectrum consists of two Hubbard bands. For each Hubbard band, quasi-particle energy is obtained exactly up to the first order in the unperturbed band energy.

<sup>1</sup> K.A. Chao, R. Kishore and I.C. da Cunha Lima, J.Phys. C11, L953 (1978).

**112-D.1.4** IMPUREZAS SUBSTITUCIONAIS E INTERSTICIAIS EM SILÍCIO: SÉRIE DE ÁTOMOS 5d. J.L.A. Alves (Departamento de Física, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Minas Gerais) e J.R. Leite (Departamento de Física dos Materiais e Mecânica, Instituto de Física da Universidade de São Paulo).

É feito um estudo sistemático dos elementos Hg, Au, Pt, Ir, Os, Re e W como impurezas substitucionais e intersticiais em silício. O método utilizado é o de espalhamento múltiplo-X $\alpha$  associado ao modelo da esfera de Watson para tratamento dos  $or$