

338

### Estudo do crescimento, cristalização e estrutura da superfície em filmes finos, multicamadas e nanoestruturas formadas pelo método de deposição de monocamadas atômicas

Ângelo Malachias de Souza

Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS)

Associação Brasileira de Tecnologia de Luz Síncrotron (ABTLuS)

Ministério da Ciência e Tecnologia

Processo 2009/09027-3

Vigência: 1/12/2009 a 30/11/2012

Este projeto pretende estabelecer uma nova linha de pesquisa na formação e estudos estruturais de filmes finos e nanopartículas crescidas pelo método de *atomic layer deposition* (ALD). Pretendemos nuclear um novo grupo de pesquisa em síntese de materiais que potencialmente se tornará referência nacional no uso desta técnica, ainda pouco explorada no Estado de São Paulo e no Brasil. Em particular, estamos interessados na síntese de duas classes de materiais: i) óxidos de alta constante dielétrica e óxidos magnéticos e; ii) nitretos semicondutores. A busca por novos resultados em ciência básica e aplicada utilizando a técnica de ALD envolverá a construção de uma câmara para crescimento *in-situ* nas linhas de difração e absorção de raios X, possibilitando o entendimento quantitativo das etapas de crescimento e cristalização de filmes finos e nanopartículas produzidas por este método. A possibilidade de crescer materiais por uma nova rota de síntese, a facilidade de operação, ausência de contaminação da câmara e o baixo custo de manutenção do reator de ALD serão cruciais para fomentar de maneira ampla a pesquisa interna em ciência dos materiais no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron.

339

### Estudos computacionais de propriedades moleculares em solução

Thaciana Valentina Malaspina Fileti

Centro de Ciências Naturais e Humanas

Universidade Federal do ABC (UFABC)

Processo 2009/07532-2

Vigência: 1/9/2009 a 31/8/2011

Este projeto de pesquisa propõe o estudo computacional de propriedades moleculares em meio condensado. Tópicos atuais em físico-química da matéria condensada serão investigados mediante metodologias que permitam a descrição rigorosa dos efeitos do meio sobre as propriedades de interesse. Propriedades quânticas e termodinâmicas normalmente requerem tratamentos computacionais distintos e as técnicas para sua obtenção já são bem estabelecidas. Contudo, quando o foco principal é o estudo simultâneo dos dois tipos de propriedade, um tratamento computacional mais elaborado é requere-

do. Este projeto pretende desenvolver e/ou aplicar estratégias computacionais visando ao estudo de diferentes sistemas moleculares em solução, que é uma situação onde o interesse está justamente na superposição entre dos dois regimes, quântico e termodinâmico. Propõe-se três tópicos distintos a serem tratados durante os 24 meses de duração do projeto. O primeiro deles é o estudo do efeito solvente nas ligações de halogênio, o segundo tópico visa investigar os efeitos da relaxação estrutural sobre o espectro eletrônico e solvatocromismo de merocianinas e, por fim, proponho o estudo das propriedades energéticas e estruturais de diamantoides e diamantoides funcionalizados. Sistemas como diamantoides ou aqueles interagindo por ligações de halogênio são exemplos para os quais uma abordagem teórica rigorosa se faz necessária. Em todos os casos propostos o processo de solvatação e os efeitos do solvente sobre a propriedade de interesse serão investigados.

340

### Investigação da coexistência de magnetismos e supercondutividade em novas ligas dos sistemas intersticiais Fe-Se-X e Mg-Ce-X

Ausdinir Danilo Bortolozzo

Escola de Engenharia de Lorena

Universidade de São Paulo (USP)

Processo 2009/00610-8

Vigência: 1/6/2009 a 31/5/2011

Este plano de trabalho refere-se a um projeto de Jovem Pesquisador a ser realizado na Escola de Engenharia de Lorena (EEL-USP). É discutido o desenvolvimento de novas ligas com propriedades magnéticas e supercondutoras em compostos dos sistemas Fe-Se-X e Ce-Mg-X (X = B, C ou N). Resultados preliminares mostram que o boro pode estabilizar a fase supercondutora FeSe<sub>0.88</sub>, bem como induzir supercondutividade em outras fases do sistema Fe-Se. Para o sistema Ce-Mg, quase nada tem sido reportado até o momento sobre as propriedades elétricas e magnéticas das fases pertencentes ao sistema Mg-Ce. Por outro lado, resultados de cálculos de estrutura de banda mostram que essa fase MgCe possui um pico na densidade de estado no nível de Fermi para a banda 4f. Tal fato sugere que esse material deva ter uma alta constante de Sommerfeld. Resultados preliminares mostram que os compostos Mg<sub>2</sub>Ce e Mg<sub>3</sub>Ce exibem uma queda abrupta na resistividade elétrica, que pode estar associada a uma provável transição magnética, a qual pode ser considerada um possível novo *heavy fermion*.

341

### Síntese e integração de nanoestruturas, filmes finos e superfícies modificadas