

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-

rido. 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_{0.88}, 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 Mg₂Ce e Mg₃Ce 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

José Roberto Ribeiro Bortoleto
 Universidade Estadual Paulista (Unesp)
 Campus Experimental de Sorocaba
 Processo 2008/53311-5
 Vigência: 1/9/2008 a 31/8/2012

Este projeto visa à fabricação e à caracterização de nanoestruturas semicondutoras (*nanodots* e/ou nanofios do grupo III-V ou de óxido de zinco), filmes finos e sua integração com substratos poliméricos e de materiais semicondutores. O crescimento dos filmes óxidos e das nanoestruturas semicondutoras de óxido de zinco será feita por meio das técnicas de deposição por vapor químico. As nanoestruturas do grupo III-V serão formadas pela técnica de epitaxia por feixe químico. A modificação da superfície das matrizes poliméricas e seu revestimento com filmes semicondutores serão feitos empregando-se técnicas de deposição a plasma. Em todos os casos será investigado o efeito dos parâmetros de crescimento (temperatura, potência, fluxos, pressão e composição dos precursores) sobre as propriedades estruturais (tamanho, distribuição espacial, composição, orientação cristalina), bem como nas propriedades ópticas e elétricas do material obtido. Além disso, será investigada a integração de filmes de óxidos semicondutores com materiais do grupo III-V e/ou matrizes poliméricas, bem como as propriedades físico-químicas únicas que essas estruturas mistas podem exibir, as quais podem vir a ser aplicadas desde células solares e painéis luminescentes até dispositivos de computação quântica.

342

Aplicações em mecânica quântica relativística e teoria de campos: oscilações quânticas, campos fermiônicos, quiralidade e equação de Dirac; sistemas com violação de Lorentz, energia escura e neutrinos

Alex Eduardo de Bernardini
 Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia
 Universidade Federal de São Carlos (UFSCar)
 Processo 2008/50671-0
 Vigência: 1/10/2008 a 30/9/2011

O projeto de pesquisa contempla diversos temas que vêm sendo analisados e desenvolvidos pelo pesquisador nos últimos anos: 1) estudos envolvendo neutrinos-relíquias com a investigação de uma possível ligação entre neutrinos e energia-escura por meio de interações via tratamento perturbativo com potenciais de quintessência, em que analisaremos as consequências cosmológicas do acoplamento entre neutrinos massivos e energia-escura; 2) estudos sobre sistemas com violação de invariância de Lorentz, com particular ênfase em aspectos de construção teórica envolvendo o formalismo em VSR (o objetivo final é proceder com a análise fenomenológica de processos como o decaimento beta do trítio, oscila-

ções de sabor de neutrinos ou ainda raios cósmicos de altíssimas energias); 3) estudo de mecânica quântica de sistemas abertos, agora segundo uma dinâmica relativística regida pela equação de Dirac (em $n+1$ dimensões) (a ideia fundamental é estender o formalismo de mecânica quântica de sistemas abertos para o estudo de soluções com caráter fermiônico com dinâmica regida pela equação de Dirac); 4) continuar o estudo da descrição da propagação (ultra)relativística de pacotes de ondas com dinâmica descrita para partículas massivas (Dirac e Klein-Gordon) e não massivas (Maxwell), escalares, bosônicas e fermiônicas (eventuais consequências no estudo do efeito de tunelamento e uma possível formulação solitônica para o problema devem ser exploradas). De maneira geral, nossas vertentes de pesquisa se constituirão de aplicações em mecânica quântica relativística e teoria de campos, em que, em particular, com referência aos itens 3 e 4, analisaremos a extensão das soluções obtidas em sistemas fermiônicos tipo grafeno.

343

Estudo de polimorfos de fármacos cristalinos por meio da difração de raios X por policristais e do método de Rietveld

Fábio Furlan Ferreira
 Instituto de Química
 Universidade Estadual Paulista (Unesp)
 Campus de Araraquara
 Processo 2008/10537-3
 Vigência: 1/10/2009 a 30/9/2013

Fármacos podem se cristalizar de diversas formas (polimorfos), as quais podem apresentar diferenças nas propriedades físicas e químicas e na biodisponibilidade. O polimorfismo decorre das condições empregadas na síntese e purificação da substância, dependendo, por exemplo, do tipo de solvente utilizado e da temperatura da reação. A maioria dos fármacos é administrada na forma sólida, podendo sua estrutura ser amorfa ou policristalina. As formas policristalinas são facilmente detectadas por difração de raios X e, conhecendo-se a estrutura cristalina, é possível realizar a quantificação dos polimorfos nos fármacos por meio da aplicação do método de Rietveld. Neste projeto, será estabelecido o procedimento adequado para a obtenção de dados de difração de raios X por policristais que permitam a quantificação inequívoca dos polimorfos presentes em alguns fármacos atualmente usados na indústria farmacêutica brasileira ou em farmácias de manipulação, bem como, quando for o caso, a determinação de sua estrutura cristalina, usando dados de difração por policristais. A importância de tal pesquisa está ligada ao anseio das indústrias farmacêuticas em melhorar cada vez mais a qualidade de seus produtos e da importante ação social resultante da melhor qualidade dos medicamentos.