344 Raios cósmicos de altas energias

Luiz Vitor de Souza Filho
Instituto de Física de São Carlos
Universidade de São Paulo (USP)
Processo 2008/04259-0
Vigência: 1/11/2008 a 31/10/2012

O presente plano de trabalho propõe a elaboração de uma central de análise em astrofísica de partículas dedicada ao Observatório Pierre Auger. O intuito deste projeto é oferecer a colaboração brasileira nesse experimento, a melhoria das capacidades computacionais e proporcionar as condições necessárias para a criação de um grupo de pesquisa em raios cósmicos no Instituto de Física da USP em São Carlos (IFSC-USP). A determinação da composição das partículas é um problema central para a interpretação de qualquer resultado de astrofísica de partículas, no entanto as técnicas de identificação da partícula primária do chuveiro atmosférico extenso são ainda incipientes. Por isso, o foco do trabalho em São Carlos será neste tema, ao qual contribuiremos na elaboração de métodos de reconstrução da identidade da partícula primária dos eventos medidos pelo Observatório Auger, na interpretação fenomenológica desses resultados e no estudo da potencialidade de experimentos futuros. A condição fundamental para a realização deste projeto é a aquisição de um conjunto de computadores e os benefícios decorrentes dele incluem a expansão de uma área de pesquisa a um centro emergente em astrofísica de partícula no estado de São Paulo, bem como a consolidação de um projeto que tem contado com grande apoio da FAPESP.

345 Instrumentação de um laboratório de altas energias e análise de dados do Observatório Pierre Auger

Marcelo Augusto Leigui de Oliveira
Centro de Ciências Naturais e Humanas
Universidade Federal do ABC (UFABC)
Processo 2008/00879-4
Vigência: 1/9/2009 a 31/8/2013

O estudo dos raios cósmicos de ultra-alta energia (RCUAEs) é um ramo de pesquisa que se situa entre a física de partículas elementares e a astrofísica. Essa área teve uma enorme revitalização nas últimas décadas, parcialmente devido aos avanços nas técnicas experimentais que levam à solução de importantes problemas da física de raios cósmicos e parcialmente devido às descobertas de novas estruturas no espectro de raios cósmicos e de novas fontes astrofísicas de partículas e de raios gama de ultra-alta energia. Este projeto de pesquisa apresenta um plano de atividades a serem realizadas junto ao Centro

de Ciências Naturais e Humanas (CCNH) da Universidade Federal do ABC (UFABC), em trabalhos relacionados aos RCUAEs, incluindo o projeto de um laboratório para instrumentação de detectores de radiações de altas energias, atividades a serem realizadas junto ao Observatório Pierre Auger – compreendendo análises de dados e participações em turnos de aquisição – e orientações de estudantes em nível de pós-graduação e de iniciação científica.

346 Catálise computacional: produção de hidrogênio usando etanol

Juarez Lopes Ferreira da Silva
Instituto de Física de São Carlos
Universidade de São Paulo (USP)
Processo 2008/00782-0
Vigência: 1/8/2009 a 31/7/2013

O desenvolvimento de catalisadores com baixo custo e com grande estabilidade para a produção de hidrogênio utilizando etanol é um dos principais problemas a serem solucionados para o uso direto de etanol em *fuel cells*. Portanto, existe um grande interesse no estudo das propriedades físicas e químicas que determinem o sucesso de um catalisador para uma reação em particular. Neste projeto, propõe-se utilizar cálculos de primeiros princípios no estudo de catalisadores para a produção de hidrogênio usando uma mistura de etanol e água. Portanto, este projeto pode contribuir de forma significativa para o domínio das tecnologias envolvendo etanol e energias renováveis.

347 Dinâmica de colisões de elétrons com biomoléculas

Romarly Fernandes da Costa
Centro de Ciências Naturais e Humanas
Universidade Federal do ABC (UFABC)
Processo 2008/00659-4
Vigência: 1/11/2008 a 31/10/2010

O projeto apresentado fundamenta o pedido de uma bolsa-auxílio no âmbito do Programa de Apoio a Jovens Pesquisadores em Centros Emergentes da FAPESP. A proposta de trabalho visa ao estabelecimento de uma linha de pesquisa na área de física atômica e molecular na Universidade Federal do ABC. Mais especificamente, o presente projeto tem como meta principal o estudo da dinâmica em processos de espalhamento de biomoléculas iniciados por impacto de elétrons de baixa energia. Para tanto, utilizará os códigos computacionais do método multicanal de Schwinger recentemente otimizados no que diz respeito à descrição dos estados eletrônicos do alvo molecular de

modo a possibilitar a utilização de estratégias mais elaboradas para a inclusão dos efeitos de acoplamento multicanal. A pesquisadora pretende aplicar os procedimentos desenvolvidos durante seu doutoramento (Processo FAPESP 99/00264-9) e seu pós-doutoramento (Processo FAPESP 04/06997-8) – dentre eles, a estratégia MOB-SCI – na obtenção de seções de choque para os processos de espalhamento elástico e de excitação eletrônica, de forma a estabelecer um conjunto de dados confiáveis para uma série de sistemas de importância biológica, tecnológica e ambiental. O sucesso obtido nos primeiros estudos para moléculas diatômicas – H_2 , N_2 e CO – e pequenas moléculas poliatômicas – C_2H_4 , CH_3OH , C_2H_5OH e C_4H_4O – apontam claramente para a transferibilidade desses procedimentos no estudo de colisões entre elétrons e moléculas de geometria arbitrária compostas por átomos pesados. Em especial, ressalta o particular interesse na realização de investigações envolvendo as bases nitrogenadas do DNA e do RNA, assim como outros sistemas que apresentam similaridades com algum dos seus componentes, dada a relevância dos processos induzidos por elétrons secundários na análise dos danos (ruptura mutagênica da fita de DNA) causados a esses materiais em processos de interação com a radiação ionizante.

348

Extensões do modelo-padrão das partículas elementares e nova física na escala dos TeV

Alex Gomes Dias

Universidade Federal do ABC (UFABC)

Processo 2007/04825-3

Vigência: 1/10/2007 a 30/9/2011

Este projeto propõe-se a investigar, teoricamente, extensões do modelo-padrão que podem descrever uma física nova na escala de energia dos TeV. A razão principal que leva a um interesse imediato nessas escalas de energia é que elas começam a ser testadas experimentalmente a partir de agora com a nova geração de experimentos. É, portanto, um tema central em física de partículas elementares a investigação de teorias candidatas ao posto do novo modelo-padrão e que possam ser confrontadas com os fatos experimentais. Atualmente, as extensões propostas para o modelo-padrão são motivadas pelos novos resultados experimentais, não só no campo das partículas elementares, mas também na cosmologia e astrofísica. A pequena massa dos neutrinos, a surpreendente estabilidade da matéria (de acordo com a não observação da desintegração do próton), a incorporação da matéria-escura e a estabilidade da escala eletrofraca, conhecida como o problema da hierarquia, são alguns dos mais fascinantes problemas na área das partículas elementares. O problema da hierarquia, no entanto, é uma indicação teórica importante, sugerindo que deve haver uma

estrutura nova, que estabilize a escala eletrofraca, na escala de energia dos TeV. Pretende-se tratar, neste projeto, de extensões do modelo-padrão que envolvem as recentes ideias sobre dimensões extras, Little Higgs, Twin Higgs e outras teorias efetivas que dispõem de mecanismos que poderiam solucionar o problema da estabilização da escala eletrofraca. Estudaremos, em particular, os modelos tipo Little Higgs e Twin Higgs por terem uma simetria global que pode proteger a massa do bóson de Higgs contra as divergências quadráticas até a aproximação simples de 1 *loop*, com o intuito de incluir as correções advindas da soma dos logaritmos líderes. Para isso, será utilizado o grupo de renormalização, o que permite ter uma resposta mais precisa sobre as propostas de soluções baseadas nesses modelos para o problema da hierarquia. Além da construção e análise de tais teorias efetivas, o presente projeto tem também entre seus objetivos a investigação sobre as questões da geração de massa e mistura dos neutrinos e o problema da incorporação de campos que poderiam descrever partículas candidatas à matéria-escura. Neste último tema, procurará tratar de modelos que possam ter, no seu conteúdo de matéria, partículas pseudoescalares leves tipo áxion, cujo interesse se justifica por uma série de experimentos, em atividade atualmente, voltados para a detecção de tais partículas.

349

Investigação de redes de nanotubos de carbono por simulação computacional

Vitor Rafael Coluci

Centro Superior de Educação Tecnológica

Universidade Estadual de Campinas (Unicamp)

Processo 2007/03923-1

Vigência: 1/5/2008 a 30/4/2010

Este projeto visa investigar redes de nanotubos de carbono por simulação computacional, utilizando a técnica de dinâmica molecular. Essas redes são arranjos de nanotubos de carbono que podem estar fraca ou fortemente conectados nos locais onde um ou mais nanotubos se cruzam. Recentemente, essas redes foram utilizadas no desenvolvimento de dispositivos eletrônicos e sensores químicos. Geralmente, as técnicas de fabricação dessas redes produzem arranjos randômicos. No entanto, sob certas condições, redes ordenadas podem ser formadas, como no caso de redes produzidas sobre superfícies de cristais, como, por exemplo, o carbeto de silício (SiC). O presente estudo será voltado mais especificamente às propriedades mecânicas de redes randômicas de nanotubos fracamente conectados e ao processo de formação e posterior ordenamento de redes formadas em superfícies de SiC. Para isso, será utilizada dinâmica molecular com potenciais semiempíricos baseados na aproximação *tight-binding* e empíricos reativos. Essas simulações serão realizadas num *cluster* de computadores que será solicitado neste projeto visando à utilização de códigos seriais e paralelos.