

350

Investigação das propriedades dielétricas lineares e não lineares em materiais ferroelétricos (cerâmicos e filmes finos)

José de los Santos Guerra

Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira

Universidade Estadual Paulista (Unesp)

Processo 2006/60013-5

Vigência: 1/6/2007 a 30/9/2008

Este projeto apresenta uma proposta de pesquisa na área de materiais ferroelétricos baseada na dispersão dielétrica com frequência, na faixa de 100Hz-2GHz, para baixos e altos campos de medida, e apoiada na caracterização de propriedades dielétricas não lineares de ferroelétricos relaxores cerâmicos e filmes finos. O grande interesse deve-se às potencialidades desses materiais para serem usados em aplicações práticas. Dentre as aplicações mais relevantes, destacam-se, por exemplo, seu uso em capacitores, sensores e memórias para dispositivos eletroeletrônicos. Investigações mais recentes têm despertado grande motivação no estudo da região de altas frequências pelo crescente interesse no uso desses materiais em sistemas de comunicação em micro-ondas. Para tanto, propõe-se implementar a técnica de medidas dielétricas em micro-ondas para a caracterização de cerâmicas ferroelétricas, bem como estender a utilização da mesma em filmes finos ferroelétricos. Por outro lado, propõe-se a implementação das técnicas para estudar os fenômenos físicos responsáveis pela resposta dielétrica por meio da determinação do primeiro e terceiro harmônicos da polarização, assim como a caracterização dielétrica em função da intensidade de campo elétrico AC de amplitude variável e um campo DC sobreposto ao campo elétrico de AC de baixa intensidade. O uso concomitante dessas técnicas nos permite distinguir, dentre os diversos modelos teóricos ou fenomenológicos usualmente utilizados para a explicação de fenômenos observados nesses materiais e que ainda permanecem em discussão, qual é o mais correto para uma descrição coerente de suas propriedades físicas. Destaca-se, sem dúvida, por um lado, a anomalia dielétrica de altas frequências (denominada por muitos autores como fenômeno de dispersão dielétrica), assim como o efeito relaxor e de transição de fase difusa observada para baixas frequências. A síntese e a preparação dos materiais utilizados para a caracterização (cerâmicas ferroelétricas e filmes finos com estrutura perovskita ou tungstênio-bronze) serão realizadas no próprio grupo de ferroelétricos do Departamento de Física e Química da Unesp – *Campus* de Ilha Solteira, onde será desenvolvido o projeto.

351

Estudo teórico de ligas semicondutoras com aplicações em spintrônica e optoeletrônica

Lara Kuhl Teles

Instituto Tecnológico de Aeronáutica (ITA)

Ministério da Defesa. Comando-Geral de Tecnologia

Aeroespacial (CTA)

Processo 2006/05858-0

Vigência: 1/3/2007 a 28/2/2011

Nos últimos anos, o campo da spintrônica surgiu como uma nova fronteira na física de dispositivos para a tecnologia de circuitos integrados. As ligas semicondutoras magnéticas derivadas dos compostos III-V têm atraído enorme interesse devido à sua potencial aplicabilidade em dispositivos nessa área. Paralelamente ao estudo de novas tecnologias, como a spintrônica, tem-se realizado um estudo permanente para a melhoria da tecnologia atual. Ligas ternárias e quaternárias têm sido amplamente utilizadas, pois permitem variar o valor do *gap* de energia por uma vasta região do espectro, e são empregadas na fabricação de dispositivos semicondutores, tais como lasers, LEDs etc. Neste projeto, os professores Lara K. Teles e Marcelo Marques propõem o estudo teórico das propriedades estruturais, eletrônicas e termodinâmicas de ligas semicondutoras e ligas semicondutoras magnéticas que possuem principalmente aplicações em optoeletrônica e spintrônica. Para tal, serão realizados cálculos de estrutura eletrônica autoconsistentes, com base no formalismo da densidade local, combinado com métodos de expansão em *clusters*, em conjunto com simulações Monte Carlo, para a descrição estatística. Além dos objetivos específicos do projeto, temos um propósito mais geral de nuclear uma nova linha de pesquisa no Instituto Tecnológico de Aeronáutica (ITA), visto que o ITA não possui nenhum grupo de pesquisa em física de materiais semicondutores.

352

Propriedades moleculares e reações químicas: estudos via química computacional em fase gasosa e em meio solvente

Eudes Eterno Fileti

Universidade Federal do ABC (UFABC)

Processo 2006/04449-9

Vigência: 1/3/2007 a 28/2/2009

Este projeto propõe o estudo de propriedades moleculares e mecanismos de reações químicas em fase gasosa em meio solvente por meio de métodos de química computacional. Os estudos dos efeitos de solvente terão ênfase especial aqui. Tais efeitos são de fundamental importância no estudo de diversos fenômenos em física, química e bioquímica e atualmente consistem em um dos mais ativos ramos de pesquisa em físico-química. Processos para os quais efeitos de solvente desempenham papel crucial são numerosos, de forma que os problemas propostos para estudo neste projeto são apenas alguns exemplos em que