

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

a investigação teórica pode contribuir de forma significativa para o desenvolvimento desse ramo. Propriedades moleculares e suas modificações devido ao efeito de solvente serão estudadas tanto em fase gasosa como em solução. Por outro lado, a caracterização de mecanismos de reações químicas, particularmente em fase condensada, também será abordada. Simulações atomísticas de C60 em vários solventes orgânicos também serão realizadas. Para cada tópico, objetivos específicos são propostos.

353

### Microscopia ótica de vesículas lipídicas gigantes: olhando a membrana biológica

Karin do Amaral Riske

Instituto de Física

Universidade de São Paulo (USP)

Processo 2005/54891-7

Vigência: 1/12/2005 a 30/11/2009

Bicamadas lipídicas formando vesículas são o modelo mais simples da membrana biológica. Por esse motivo, suas propriedades físicas e sua interação com biomoléculas têm sido extensamente estudadas. Na última década, vesículas unilamelares gigantes (GUVs;  $\sim 10 \mu\text{m}$ ) ganharam destaque pelo fato de terem o mesmo tamanho de células biológicas e poderem ser visualizadas por microscopia ótica. Essa visualização permitiu que a dinâmica das vesículas pudesse ser acompanhada, o que foi crucial para o avanço do estudo de deformações elásticas de membranas. Outras áreas de estudo beneficiadas foram: formação de domínios em misturas lipídicas, interação membrana/biomoléculas e abertura de poros através da bicamada. Com o projeto, pretende-se abrir uma linha de pesquisa em microscopia ótica de GUVs no departamento de Física Aplicada da IFUSP. Os tópicos de pesquisa abordados neste plano têm interesse biológico específico: 1) formação de poros por ação de peptídeos antimicrobianos; 2) influência de proteínas de membrana nas propriedades físicas de GUVs; e 3) interação de membranas com moléculas fotoativas. Em todos esses tópicos, parâmetros elásticos das membranas serão estimados sempre que possível.

354

### GRPA relativística para ressonâncias gigantes com troca de carga e decaimento beta

Cláudio de Conti

Universidade Estadual Paulista (Unesp)

Campus Experimental de Itapeva

Processo 2005/52679-0

Vigência: 1/9/2005 a 31/12/2008

As ressonâncias gigantes com troca de carga são excitações coletivas do núcleo atômico com diversas mul-

tipolaridades. Os estados excitados nucleares também produzem reações tais como o decaimento beta. O decaimento beta é um processo que ocorre quando um núcleo pai com  $(N, Z)$  sofre uma transição para um núcleo filho com  $(N-1, Z+1)$  ou  $(N+1, Z-1)$ . A RPA é o modelo mais simples utilizado para descrever os estados excitados de um núcleo atômico que admite que o estado fundamental nuclear não tem apenas um caráter de partículas independentes, mas contém correlações. Quando a RPA é derivada com base na aproximação de Dirac-Hatree-Fock-Bogoliubov, ela é chamada de RPA de quase partícula relativística (RQRPA). Neste projeto, será usado o formalismo da RQRPA para descrever os estados excitados coletivos com troca de carga, tais como o estado isobárico análogo e a ressonância de Gamow-Teller, para núcleos-avos com camadas abertas. Além disso, será aplicado esse modelo no cálculo do decaimento beta de núcleos exóticos.

355

### Correlações de poucos corpos em física nuclear e técnicas nucleares aplicadas à engenharia industrial madeireira

Marcelo Takeshi Yamashita

Universidade Estadual Paulista (Unesp)

Campus Experimental de Itapeva

Processo 2005/52647-1

Vigência: 1/11/2005 a 31/10/2009

Este projeto está dividido em duas partes. Na primeira, estudará a dinâmica dos sistemas de três e quatro corpos, utilizando interações tipo Dirac juntamente com a formulação das equações subtraídas de Faddeev invariantes sob transformações do grupo de renormalização. Um estudo da trajetória dos estados Efimov será feita no contexto de sistemas de três corpos do tipo AAB. Serão feitos cálculos das energias de ligação de estados excitados, raios quadráticos médios e funções de correlação de dois corpos em função das escalas físicas de dois e três corpos no contexto de hipernúcleos do tipo A-hipernúcleo. Será investigada a necessidade da introdução de uma nova escala para o sistema de quatro bósons, independentemente das escalas de dois e três corpos, na regularização das equações de Faddeev-Yakubovsky em três dimensões. Na segunda parte, estudará a composição química de árvores e solos, utilizando o ciclotron e o reator do Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (Ipen), bem como a infraestrutura do Laboratório do Acelerador Linear e do Laboratório de Análise de Materiais por Feixes Iônicos, ambos da Universidade de São Paulo. A primeira parte consiste em um estudo teórico. A segunda parte é um estudo experimental relacionado diretamente com os pesquisadores da Unidade Diferenciada de Itapeva, envolvendo, assim, colaborações interdisciplinares e interinstitucionais.