

390

Estudo de propriedades estruturais e eletrônicas de sistemas moleculares em fase líquida

Kaline Rabelo Coutinho

Universidade de Mogi das Cruzes (UMC)

Processo 1998/11643-8

Vigência: 1/1/1999 a 30/4/2003

O estudo da estrutura eletrônica de sistemas moleculares nos dá informações sobre inúmeras propriedades como: estabilidade conformacional, reatividade, atividade biológica etc. Nessa área, existem procedimentos bem estabelecidos para estudar sistemas em fase gasosa e sólida (cristalina). No entanto, o estudo na fase líquida ainda é um problema em aberto. Recentemente, desenvolveu-se um procedimento para estudar esta fase, baseado no uso sequencial de simulação computacional com método Monte Carlo e cálculos quânticos, incluindo assim efeitos de solvente e temperatura. Este projeto tem como objetivo central dar continuidade ao desenvolvimento e aprimoramento de métodos e algoritmos que viabilizem o estudo da estrutura eletrônica de sistemas moleculares em fase líquida ou em solução.

391

Transições de fase e criticalidade auto-organizada em modelos de redes neurais

Osame Kinouchi Filho

Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto

Universidade de São Paulo (USP)

Processo 1998/09950-0

Vigência: 1/11/1998 a 30/11/2002

Serão desenvolvidas três linhas de pesquisa na interface física-computação biológica: 1) transições de fase em curvas de aprendizagem em modelos de redes neurais (abordagem de mecânica estatística); 2) estudo de criticalidade auto-organizada, sincronização e outros comportamentos coletivos em redes de osciladores de relaxação; 3) estudo de comportamentos coletivos em redes de mapas acoplados (CMLs) em que cada mapa representa uma célula excitável do tipo FitzHugh-Nagumo. Em uma fase mais avançada, o projeto prevê a aplicação da fenomenologia encontrada nesses modelos no enriquecimento de modelos de epilepsia no hipocampo e outras doenças neurológicas.

392

O potencial íon-íon e a dinâmica das colisões entre íons pesados

Marco Antonio Cândido Ribeiro

Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas de São José do Rio Preto

Universidade Estadual Paulista (Unesp)

Processo 1998/04211-4

Vigência: 1/3/1999 a 28/2/2003

Este projeto de pesquisa tem como objetivo o estudo dos mecanismos envolvidos no processo quase elásticos e fusão nuclear assim como obter um potencial íon-íon de forma mais consistente e fundamental possível, levando-se em conta na construção deste as características básicas do sistema nuclear. Também estão previstas aplicações dos resultados deste trabalho em pesquisas na área da astrofísica nuclear.

393

Estudo numérico de modelos de elétrons fortemente correlacionados em baixa dimensionalidade

André Luiz Malvezzi

Faculdade de Ciências de Bauru

Universidade Estadual Paulista (Unesp)

Processo 1997/13435-0

Vigência: 1/8/1999 a 31/8/2002

As técnicas numéricas de Lanczos e algoritmos de matriz densidade para o grupo de renormalização quântico (DMRG) são aplicados no estudo do diagrama de fase de modelos de elétrons fortemente correlacionados em redes de baixa dimensionalidade. Entre os problemas de interesse imediato está o modelo Kondo ferromagnético aplicado ao estudo dos óxidos de manganês $La_{1-x}Ca_xMnO_3$. Em especial estudar-se-á o efeito da interação com fônons; possível existência de separação de fase no diagrama de fase do modelo Kondo antiferromagnético; caracterização de pontos críticos quânticos no contexto das teorias de líquidos de Luttinger e invariância conforme.

394

Caracterização de regimes complexos em sistemas dissipativos auto-organizados

Reinaldo Roberto Rosa

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (Inpe)

Ministério da Ciência e Tecnologia

Processo 1997/13374-1

Vigência: 1/5/1998 a 30/4/2002

Este projeto propõe a investigação de sistemas dissipativos, que em condições longe do equilíbrio apresentam fenômenos de auto-organização. Serão desenvolvidas e aplicadas técnicas de reconhecimento de padrões complexos para caracterização desses fenômenos em sistemas naturais e simulados. Dentre os sistemas simulados, o estudo tem principal interesse nos sistemas dinâmicos descritos pelas equações de amplitude, cujos resultados e caracterização serão comparados com aplicações fenomenológicas em física do plasma ativo solar, fluidos reativos-difusivos e oscilações assimétricas do fluxo de energia cinética cardíaca.