



**Anais do XIV EFITA – Encontro
de Física do ITA**

5 a 9 de julho de 2021

São José dos Campos

**Instituto Tecnológico de Aeronáutica –
ITA**

Divisão de Ciências Fundamentais
Departamento de Física

05 de julho de 2021

Programação

1. Apresentação	3
2. Programação	5
3. Palestra de Abertura	15
4. Palestras da PG-FIS	17
5. Palestras Magnas	19
6. Palestras	23
7. Seção de Apresentação Virtual	29
8. Mini cursos	79
9. Índice de Autores	0

Comissão de Organização

Docentes

Marco Antonio Ridenti
(coordenador)

Ivan Guilhon Mitozo Rocha
(vice-coordenador)

André Chaves

André Pereira

César Lenzi

Manuel Máximo Bastos Malheiro de Oliveira

Maurício Pazianotto

Rene Spada

Discentes

Alysson Brhian de Souza Muniz Silva

Abigail Rodrigues Castro

Bárbara Damasceno

Estevão Teixeira

Gusthavo Brizolla

João Pedro Chaves

Apoio



SAVIM
D E S I G N

Apresentação

O Encontro de Física do ITA chega em 2021 à sua XIV edição. Diferentemente dos anos anteriores, essa edição acontecerá 100% em ambiente virtual em razão das novas circunstâncias extraordinárias impostas pela pandemia causada pela COVID-19. Se por um lado esse novo formato impede o contato pessoal e a experiência de conhecer o espaço físico e as instalações do Instituto Tecnológico de Aeronáutica, por outro lado permite ouvir palestrantes que se encontram em outros países e alcançar uma audiência mais abrangente. Seguindo a tradição das edições anteriores, o XIV EFITA terá palestras de divulgação da pesquisa realizada no contexto do programa de pós-graduação em física do ITA (PG-FIS) como também palestras de convidados que desenvolvem pesquisa de destaque em diversas áreas da física dentro e fora do Brasil. Além das palestras, o encontro como de costume possui um caráter formativo, oferecendo também minicursos que abordam ferramentas experimentais e teóricas de física e mesas redondas sobre tópicos relevantes da física contemporânea e sobre a atuação profissional do físico. Nesta edição, o XIV EFITA trará como tema motivador “A Física e seu potencial inovador para a sociedade”. Ao comemorar os 70 anos do ITA em 2020, lembramos que o Marechal-do-Ar Casimiro Montenegro propôs a criação do ITA para formar os engenheiros que desenvolveriam a tecnologia e a indústria aeronáutica no Brasil. A razão pela qual esse projeto foi bem-sucedido se deve em boa medida ao zelo institucional dado à formação científica dos alunos do ITA desde sua fundação. Essa característica do ITA não foi fruto do acaso, mas da visão do Marechal-do-Ar Casimiro Montenegro e seus colaboradores, entre os quais o professor Paulus Aulus Pompéia. Talvez as circunstâncias históricas que motivaram a fundação do ITA tenham mudado, mas temos hoje novos desafios e possibilidades para a indústria ligada ao setor aeronáutico, além de um novo setor de grande interesse civil e militar em que o ITA já está atuando com pioneirismo no Brasil: o setor espacial. Para formar engenheiros capazes de conceber tecnologias inovadoras e dar apoio à indústria de ponta, é crucial, como reconhecia o Marechal-do-Ar Casimiro Montenegro, uma robusta formação científica. A Física é uma das áreas fundamentais para a formação do engenheiro e no ITA ela é desenvolvida tanto na área de ensino quanto na área de pesquisa, na graduação e na pós-graduação, de forma complementar. Para nós da Comissão do EFITA é uma satisfação divulgar as pesquisas básicas e aplicadas em Física desenvolvidas no ITA e ao mesmo tempo possibilitar a troca de experiências com físicos e estudantes de todo o Brasil. Esperamos com isso ajudar a promover uma cultura de valorização da ciência como coluna fundamental do desenvolvimento tecnológico e industrial.

Marco Antonio Ridenti
Coordenador do XIV EFITA

Programação

XIV EFITA – Programação

seg 5 jul 2021

8am – 8:30am Cerimônia de abertura do XIV EFITA

Abertura oficial pelo vice-Reitor, palavras de boas-vindas do pró-Reitor de pós-Graduação, coordenador da pós *Prof. Dr. Manuel Malheiro* e coordenador do EFITA *Prof. Dr. Marco A. Ridenti*.

Chair: *Prof. Dr. Marco Antonio Ridenti*

8:30am – 10am Palestra de Abertura

Prof. Dr. Vanderlei Salvador Bagnato (IFSC - USP)

Título: Dos átomos à vida: A óptica fazendo a diferença

Chair: *Prof. Dr. Manuel Malheiro*

10am – 10:30am Intervalo

10:30am – 12pm Apres. da PG-FIS

Prof. Dr. Manuel Malheiro (ITA)

- *Melhor doutorado - Francis Franco*
- *Melhor mestrado - Fernando Valadares*

12pm – 2pm Pausa para almoço

2pm – 3:30pm Minicurso 1 - Parte 1

Prof. Dr. Douglas Leite e Prof. Dr. André Pereira

Título: Óptica de filmes finos, uma análise prática por elipsometria espectrofotométrica

3:30pm – 4pm Intervalo (sala aberta)

4pm – 6pm Apresentação do IEAv- dosimetria

Prof. Dr. Claudio Antonio Federico

Chair: *Prof. Dr. Maurício Pazianotto*

XIV EFITA – Programação

ter 6 jul 2021

8am – 9am Palestra 2a (Física de Plasma)

Prof. Dr. Rodrigo Pessoa

Título: Aplicações de plasmas frios atmosféricos na nanotecnologia e engenharia biomédica

Chair: *Prof. Dr. André Pereira*

9am – 10am Palestra 2b (Física de Plasma)

Prof. Dr. Gilberto Petraconi

Título: Física de plasmas térmicos – aplicações em processos de materiais e geração de energia

Chair: *Prof. Dr. André Pereira*

10am – 10:30am Intervalo

10:30am – 12pm Palestra Magna 1

Prof. Dr. Vasco Guerra (IST-Portugal)

Título: Reciclar o dióxido de carbono por plasmas

Chair: *Prof. Dr. André Pereira*

12pm – 2pm Pausa para almoço

2pm – 3:30pm Minicurso 1 - Parte 2

Prof. Dr. Douglas Leite e Prof. Dr. André Pereira

Título: Óptica de filmes finos, uma análise prática por elipsometria espectrofotométrica

3:30pm – 4pm Intervalo (sala aberta)

4pm – 6pm Mesa Redonda – Materiais 2D

- *Prof. Dr. João Nuno (UFABC)*
- *Prof. Dr. Andrey Chaves (UFC)*

- *Prof. Dr. Milton Pereira (UFC)*
- *Prof. Dr. Rodrigo Pessoa (ITA)*
- *Prof. Dr. Ivan Guilhon (ITA)*

Chair: *Prof. Dr. André Chaves*

XIV EFITA – Programação

qua 7 jul 2021

8am – 9am Palestra 3a (Física Atômica e Molecular)

Prof. Dr. Marcelo Marques

Título: Estrutura Eletrônica de Perovskitas de Haletos e suas Misturas

Chair: *Prof. Dr. Rene Spada*

9am – 10am Palestra 3b(Física Atômica e Molecular)

Prof. Dr. Luiz Ferrão

Título: Engenharia de Estrutura Eletrônica: Design de Materiais por Abordagens Qualitativas e Quantitativas

Chair: *Prof. Dr. Rene Spada*

10am – 10:30am Intervalo

10:30am – 12pm Palestra Magna 2

Prof. Dr. João Milton (UFC)

Título: Transporte balístico em materiais 2D

Chair: *Prof. Dr. André Chaves*

12pm – 2pm Almoço

2pm – 3:30pm Minicurso 2 - Parte 1

Prof. Dr. Teldo Pereira (UFMT)

Título: Não linearidade óptica em Lasers de Cascata Quântica

3:30pm – 4pm Intervalo (Sala aberta)

4:30pm – 6pm Carreiras da Física

- *Nilva Sales (UFSCAR, ensino)*
- *Felipe Frigeri (Analista Itaú, mercado financeiro)*

- *Pedro Iwai (Física Médica, Hospital do Câncer Uopecan)*
- *Marcos Okamura (Indústria, ITA)*

Chair: *Prof. Dr. Marco Ridenti*

XIV EFITA – Programação

qui 8 jul 2021

8am – 9am Palestra 4a (Física Nuclear)

Prof. Dr. Mauricio Pazianotto

Título: Raios cósmicos: do ambiente aeronáutico ao espaço

Chair: *Prof. Dr. César Lenzi*

9am – 10am Palestra 4b (Física Nuclear)

Prof. Dr. Odilon Lourenço

Título: Modelo de van der Waals dependente da densidade aplicado à matéria nuclear

Chair: *Prof. Dr. César Lenzi*

10am – 10:30am Intervalo

10:30am – 12pm Palestra Magna 3

Prof. Dr. Guilherme Pimentel (University of Amsterdam)

Título: A origem da estrutura no universo

Chair: *Prof. Dr. César Lenzi*

12pm – 2pm pausa para almoço

2pm – 3:30pm Minicurso 2 - Parte 2

Prof. Dr. Teldo Pereira (UFMT)

Título: Não linearidade óptica em Lasers de Cascata Quântica

3:30pm – 4pm Intervalo (sala aberta)

4pm – 6pm Sessão de apresentações

- 10 minutos + 5 minutos para perguntas
- Premiação para as três melhores apresentações em cada área

- Quatro áreas:
 - Física Atômica e Molecular
 - Física de Plasmas e Materiais
 - Física Nuclear e Partículas
 - Sistemas complexos, dinâmica não linear, física geral e educação

XIV EFITA – Programação

sex 9 jul 2021

8am – 9am Palestra 5a (Dinâmica não-Linear e Sistemas Complexos)

Prof. Dr. Erico Rempel

Título: Sistemas dinâmicos na Física Solar: dos expoentes de Lyapunov às Estruturas Coerentes Lagrangianas

Chair: *Prof. Dr. Marco Ridenti*

9am – 10am Palestra 5b (Dinâmica não-Linear e Sistemas Complexos)

Prof^a. Dr^a. Marisa Roberto

Título: Fusão termonuclear controlada: A energia do futuro.

Chair: *Prof. Dr. Marco Ridenti*

10am – 10:30am Intervalo

10am – 12pm Palestra Magna 4

Prof. Dr. Marcus aguiar (UNICAMP)

Título: Simulando a origem das espécies

Chair: *Prof. Dr. Marco Antonio Ridenti*

12pm – 2pm Almoço

2pm – 3:30pm Visita aos laboratórios do ITA (ITA geral, LPP)

3:30pm – 4pm Intervalo (sala aberta)

4pm – 6pm Palestra Humanidades

Prof. Dr. Cassiano Rodrigues

Título: Pragmatismo, investigação e inovação segundo o pensamento

de C. S. Peirce.

Chair: *Prof. Dr. Marco Antonio Ridenti*

6pm Fechamento, estatísticas e premiação

- Estatísticas e premiação: *Marco A. Ridenti e Ivan Guilhon*
- Fechamento: *Manuel Malheiro*

Palestra de Abertura

Dos átomos à vida: A óptica fazendo a diferença

PA1

Vanderlei Bagnato
IFSC - USP

A óptica tem sido um campo dentro da física, que na verdade atinge todas as áreas. Com técnicas ópticas podemos avançar o conhecimento da própria física, mas também da biologia, da medicina, da química, da engenharia ao mesmo tempo que tem sido elemento especial para comunicações, computação dentre outros. Esta vastidão de oportunidades faz da óptica um elemento essencial e cabe à física seu desenvolvimento. Nesta apresentação iremos utilizar a física dos átomos frios como um exemplo de avanço do conhecimento, tendo a óptica como ferramenta principal. Novas possibilidades e estudos em realização com os chamados condensados de Bose-Einstein serão abordados. Em seguida, com o conhecimento básico que a óptica nos trouxe, podemos agir na chamada biofotônica, auxiliando as ciências da vida com controle microbiológico e tratamento de enfermidades tendo a luz como elemento básico.

Palestras da PG-FIS

Transição Para Caos e Turbulência em Magnetoconvecção PG1

Francis Franco

Universidade Federal de Jataí (UFJ)

Campos magnéticos estão presentes por todo o universo, e geralmente são associados com movimentos turbulentos, os quais podem ser conduzidos por movimentos de convecção. O fenômeno de convecção é comumente observado na natureza e trata-se do transporte de massa por meio do movimento do fluido devido a uma diferença de densidade, que por sua vez é causada em virtude de uma diferença de temperatura no meio. A convecção térmica em um fluido magnetizado pode ser observada em planetas e estrelas em diferentes formas. Magnetoconvecção, estudo da interação entre convecção térmica e campos magnéticos, inicialmente teve como motivação a compreensão da dinâmica de campos magnéticos na fotosfera solar (superfície do Sol). A convecção de Rayleigh-Bénard (RBC), uma versão idealizada da convecção térmica, foi estudada para a compreensão de instabilidades modeladoras, caos e turbulência. Para isso, seguindo o cenário RBC, foi considerado um fluido eletricamente condutor contido entre duas placas horizontais separadas por uma dada altura, onde a placa inferior apresenta uma temperatura maior que a temperatura da placa superior, gerando assim um gradiente de temperatura. Foi investigado a influência de um campo magnético imposto na transição para o caos e hipercaos. Estudos indiciais, indicam que o aumento da intensidade do campo magnético de fundo facilita a transição para turbulência.

Engenharia de composição de sistemas de perovskitas para aplicações fotovoltaicas

Fernando Valadares

National University of Singapore (NUS)

Seguindo o crescente interesse econômico e investimento em energia solar, a pesquisa científica tem se voltado a tecnologias alternativas às já estabelecidas células fotovoltaicas de silício. Dentre elas, as células que utilizam perovskitas como meio ativo de absorção mostraram um surpreendente aumento de eficiência no decorrer da última década. A fim de aproveitar suas propriedades eletrônicas vantajosas, ainda resta superar problemas de baixa durabilidade e toxicidade das perovskitas, o que geralmente é feito pela rota da engenharia de composição. Neste trabalho, foram investigadas 48 diferentes composições puras de perovskitas AMX_3 ($A = CH_3NH_3, CH(NH_2)_2, Cs, Rb$; $M = Pb, Sn, Ge, Si$; $X = I, Br, Cl$) na fase cúbica, assim como duas ligas $CsPbSnI_3$ e $CsSnGeI_3$, com a aplicação de métodos ab initio. Usando o método de correção quasipartícula DFT-1/2 desenvolvido pelo grupo, o modelo estatístico GQCA e correções spin-órbita, apresentamos propriedades ópticas diretamente comparáveis com o experimento e discutimos sua relação com parâmetros estruturais e caráter orbital. Com o entendimento detalhado desses materiais, propusemos composições alternativas e mecanismos de otimização de suas propriedades.

Palestras Magnas

Reciclar o dióxido de carbono por plasmas

PM1

Vasco Guerra

Universidade de Lisboa - IST

O rápido crescimento do consumo de combustíveis fósseis, com o aumento das emissões de gases de efeito de estufa como o dióxido de carbono, provocou já um enorme impacto no clima do planeta. Em resposta a esta situação preocupante, a produção de energias renováveis tem aumentado significativamente. Porém, a intermitência dos recursos renováveis causa uma vulnerabilidade indesejável e poucas tecnologias podem competir com a energia específica e densidade de energia dos combustíveis fósseis.

E se pudéssemos usar energia renovável para produzir combustíveis sintéticos? Usando o CO₂ emitido como matéria-prima? Mantendo a infraestrutura existente e integrando as energias renováveis nos sistemas de distribuição de energia? Tudo isto num ciclo de carbono neutro? Então, seria possível uma transição de combustíveis fósseis para combustíveis solares, contribuindo de forma decisiva para um sistema de armazenamento energético global e sustentável!

A aplicação de tecnologias de plasma dá a resposta necessária a esta questão: os electrões livres do plasma têm energias muito mais elevadas do que os restantes constituintes do gás (iões e espécies neutras), característica única que leva a que as reações químicas sejam de uma natureza completamente diferente dos processos que ocorrem sob equilíbrio térmico, tirando partido da energia dos eletrões e da energia armazenada em níveis vibracionais da molécula de CO₂.

Nesta palestra apresentamos algum do trabalho que tem vindo a ser desenvolvido sobre a reciclagem do CO₂ por plasmas, com vista à produção combustíveis solares. Notamos também uma aplicação espacial nascente: a produção de oxigénio e combustíveis em Marte.

PM2

Transporte balístico em materiais 2D

João Milton Pereira

Universidade Federal do Ceará

Materiais bidimensionais tem se mostrado uma área bastante promissora em Física da Matéria Condensada, apresentando diversas propriedades de interesse. Nesta apresentação veremos como analogias com sistemas óticos podem servir como inspiração para o estudo de diversos fenômenos eletrônicos nesses materiais. Isso ocorre devido à grande pureza desses materiais, o que permite a observação de fenômenos ondulatórios em elétrons. Será feita uma descrição de estudos que mostram efeitos de focalização, refração e espalhamento de elétrons em grafeno (uma folha cristalina de carbono com um átomo de espessura) e em fosforeno (análogo ao grafeno, mas para átomos de fósforo). Serão descritos também os diversos métodos que são utilizados para investigar a dinâmica de elétrons nesses materiais.

PM3

A origem da estrutura no universo

Guilherme Pimentel

University of Amsterdam

Vou explicar o que sabemos sobre as condições iniciais do universo, focando nas flutuações primordiais. Essas flutuações são responsáveis pela formação da estrutura no universo, galáxias, estrelas, planetas, etc. Nossa melhor teoria para explicar a origem dessas flutuações, a "inflação cósmica", postula que antes do famoso Big Bang houve um período de expansão acelerada do universo, onde efeitos quânticos são esticados a distâncias astronômicas. Vou explicar a teoria inflacionária e o esforço recente em gerar um "catálogo" de previsões que a inflação pode fazer sobre a origem de estrutura no universo.

Simulando a origem das espécies

PM4

Marcus Aloizio Martinez de Aguiar
UNICAMP

Um dos grandes problemas da biologia evolutiva é compreender como novas espécies podem surgir a partir de uma espécie ancestral. Embora o processo de evolução por seleção natural seja bem estabelecido, os mecanismos que levam uma espécie a se ramificar em dois ou mais grupos reprodutivamente isolados ainda não foram totalmente esclarecidos. Como o processo evolutivo é geralmente lento, na escala de milhões de anos, experimentos são se tornam muito difíceis de realizar e simulações em computadores se tornam ferramentas importantes. Nesse seminário mostrarei um modelo simples que simula a evolução de uma população com reprodução sexuada e que nos permite estudar o papel de parâmetros como taxa de mutações, distribuição geográfica e número de genes no processo de formação de espécies. Veremos que é possível comparar as simulações com dados empíricos e inferir a história evolutiva de algumas espécies vivas.

Palestras

Aplicações de plasmas frios atmosféricos na nanotecnologia e engenharia biomédica

PA1

Rodrigo Sávio Pessoa

Instituto Tecnológico de Aeronáutica

Plasmas oferecem um potencial único para o desenvolvimento de tecnologias inovadoras. Plasmas são indispensáveis na produção de dispositivos microeletrônicos: nenhum computador moderno existiria sem plasma. Outros exemplos são iluminação com eficiência energética, tratamento de resíduos tóxicos, revestimentos de proteção, funcionalização de polímeros, esterilização biológica e muitos outros. Recentemente, a tecnologia de processamento de plasma de alta tecnologia tornou-se indispensável para o desenvolvimento e aplicação de novos nanomateriais e nanodispositivos altamente funcionalizados. Paralelamente, as aplicações médicas e biomédicas de plasmas de baixa temperatura e pressão atmosférica não térmica, em áreas como tratamento de superfície de dispositivos biomédicos, esterilização e técnicas terapêuticas, como esterilização de feridas e tratamento de câncer, têm se destacado nos últimos anos. Neste seminário, será apresentada uma visão geral das recentes tecnologias de plasma frios gerados em pressão atmosférica aplicadas em nanotecnologia e engenharia biomédica.

FÍSICA DE PLASMAS TÉRMICOS - APLICAÇÕES EM PROCESSOS DE MATERIAIS E GERAÇÃO DE ENERGIA

PA2

Gilberto Petraconi Filho
Instituto Tecnológico de Aeronáutica

Em um contexto geral, o desenvolvimento tecnológico envolvendo plasmas tem fundamental importância nas indústrias eletrônica, aeroespacial, metalúrgica, biomédica, saneamento básico e de tratamento de resíduos e detritos. Nesta palestra, serão apresentadas aplicações tecnológicas de física de plasmas térmicos desenvolvidas no Laboratório de Plasmas e Processos (LPP) do ITA, com foco em processos de materiais aplicados a engenharia aeroespacial e de geração de energia por processos de tratamento térmico de resíduos assistidos a plasma térmico.

Estrutura Eletrônica de Perovskitas de Haletos e suas Misturas

PA3

Lara Teles
Instituto Tecnológico de Aeronáutica

A energia fotovoltaica (PV) tem papel de destaque como fonte de energia limpa na matriz energética mundial. Durante a última década, houve um aumento no interesse das perovskitas como um constituinte promissor da camada fotoativa das células solares. As perovskitas constituem uma classe de materiais, os quais são excelentes absorvedores de luz devido às excelentes propriedades optoeletrônicas, incluindo intervalos de gap de energia sintonizáveis, baixa energia de ligação de éxcitons, alta mobilidade de portadores, longo comprimento de difusão etc. A eficiência de conversão de energia das células solares de perovskita aumentou rapidamente de cerca de 9-10% desde 2009 para o 25,2% e 29,1% para células tandem de perovskita e perovskita/Si de junção única, respectivamente. Do ponto de vista teórico, uma previsão confiável de suas propriedades eletrônicas requer a superação de diferentes desafios: a inclusão de efeitos de quasipartículas (QP), inclusão do acoplamento spin-órbita (SOC) e, no caso de misturas, os efeitos de desordem devido a ligas. Nesta palestra, farei uma revisão dos nossos últimos trabalhos sobre este tópico [1-4], nos quais

abordamos o desafio da descrição teórica das propriedades eletrônicas e ópticas de perovskita, utilizando o método DFT-1/2, para inclusão aproximada de efeitos de QP, incluindo SOC, e, no caso das misturas, empregando uma abordagem estatística para tratar os aspectos de desordem. Fornecemos um vasto panorama de propriedades eletrônicas, correlacionadas com sua geometria interna relaxada, para um grupo de 48 perovskitas de haletos, na estrutura cúbica, ABX₃ e três ligas. Nosso modelo resulta em gaps de energia em excelente concordância com os experimentos, com um baixo custo computacional. Além disso, o método permite o cálculo de espectros de absorção dependentes da composição. Também fornecemos uma análise completa relacionando as distorções, o caráter das bandas, a interação spin-órbita e os efeitos de segregação de fase, com as propriedades eletrônicas e com o bowing do gap de energia com a composição no caso de misturas.

- [1] F. Valadares et al. JPCC **124**, 18390 (2020).
- [2] F. Valadares et al. JPCC **124**, 26124 (2020).
- [3] D. Guedes-Sobrinho et al. Sci. Rep. **9**, 1 (2019).
- [4] D. Guedes-Sobrinho et al. JPCL **10**, 4245 (2019).

Engenharia de Estrutura Eletrônica: Design de Materiais por Abordagens Qualitativas e Quantitativas

PA4

Luiz Ferrão

Instituto Tecnológico de Aeronáutica

O desenvolvimento de novos materiais é um dos principais motores para o avanço tecnológico, sendo que o ajuste das suas propriedades eletrônicas permite melhorias na eficiência de processos físicos e/ou químicos ou mesmo a condução processos anteriormente impossíveis de serem realizados. Nessa apresentação discutiremos o estudo de propriedades eletrônicas de sistemas na escala molecular por meio de métodos qualitativos e quantitativos de química quântica, visando aplicações como catálise, materiais energéticos e semicondutores orgânicos.

PA5

Raios cósmicos: do ambiente aeronáutico ao espaço

Maurício Tizziani Pazianotto

Instituto Tecnológico de Aeronáutica

A radiação cósmica (RC) está presente nos mais diversos ambientes, desde a atmosfera terrestre ao meio interestelar, e pode ser uma importante componente no depósito de energia em diferentes tipos de objetos com os quais ela interage. No ambiente aeronáutico, o problema do controle do nível de dose de radiação ionizante recebida pelos pilotos, tripulação e equipamentos eletrônicos das aeronaves, passou a preocupar as organizações de radioproteção e de segurança de voo. No ambiente espacial, a RC pode promover a degradação de sistemas eletrônicos embarcados em satélites, bem como efeitos genotóxicos em astronautas. Neste contexto, serão apresentados trabalhos desenvolvidos por pesquisadores do ITA sobre aplicações da RC cósmica em aeronáutica, espaço e objetos astrofísicos.

PA6

Modelo de van der Waals dependente da densidade aplicado à matéria nuclear

Odilon Lourenço

Instituto Tecnológico de Aeronáutica

Neste seminário será mostrado como o modelo clássico de van der Waals pode ser utilizado na descrição de sistemas nucleares, tais como a matéria nuclear infinita e a matéria estelar (aplicação em estrelas de nêutrons). Basicamente, a implementação dos efeitos quânticos é feita via distribuição estatística de Fermi-Dirac. Ainda assim, verifica-se que não é possível atingir o regime de altas densidades nesta versão do modelo. Uma correção proposta é a modificação da interação atrativa junto com o já utilizado método no qual o volume excludente (interação repulsiva) não é mais mantido fixo. As duas interações são feitas dependentes da densidade nuclear, o que habilita então a descrição da matéria nuclear simétrica e assimétrica em altas densidades.

Sistemas dinâmicos na Física Solar: dos expoentes de Lyapunov às Estruturas Coerentes Lagrangianas

PA7

Erico L. Rempel

Instituto Tecnológico de Aeronáutica

Sistemas dinâmicos e a teoria do caos têm obtido grande sucesso na análise de sistemas descritos por equações diferenciais ordinárias, tais como osciladores não-lineares, reações químicas, dispositivos eletrônicos, dinâmica populacional etc. Geralmente, na abordagem de sistemas dinâmicos procura-se identificar os componentes básicos do objeto de estudo e como esses componentes interagem entre si para produzir a dinâmica observável, além de como eles podem ser manipulados para produzir uma resposta desejada, em casos onde o interesse é o controle do sistema. Exemplos desses componentes básicos são pontos de equilíbrio e soluções periódicas instáveis, conjuntos caóticos não atrativos e suas "variedades", que são superfícies especiais no espaço de fase que basicamente controlam a dinâmica, guiando as soluções em direções preferenciais. Apesar do seu sucesso nessas áreas, muitos ainda pensam que a teoria tem pouco valor quando aplicada à turbulência plenamente desenvolvida, como a observada na convecção solar, devido à dimensão infinita do espaço de fase. Nesta palestra, mostramos que essa dificuldade pode ser superada adotando-se um referencial Lagrangiano, onde o espaço de fase para cada partícula do fluido torna-se tridimensional e os componentes básicos da turbulência podem ser eficientemente extraídos por meio de ferramentas numéricas apropriadas. Vamos revelar como expoentes de Lyapunov de tempo finito, uma medida tradicional de caoticidade, podem ser usados para detectar variedades atratoras e repulsoras dependentes no tempo que dividem o fluido em regiões com comportamentos distintos. Além disso, pontos de estagnação e vórtices detectados como estruturas coerentes Lagrangianas elípticas completam o conjunto de componentes básicos da turbulência solar. Tais estruturas são cruciais para o aprisionamento e transporte de massa e energia no plasma solar.

PA8

FUSÃO TERMONUCLEAR CONTROLADA: A ENERGIA DO FUTURO

Marisa Roberto

Instituto Tecnológico de Aeronáutica

O aumento da contínua industrialização ao redor do planeta, juntamente com um forte aumento da população tem levado a um aumento no consumo mundial de energia. Um dos grandes desafios no fornecimento desta demanda crescente é encontrar novos recursos energéticos seguros, sustentáveis, econômicos e compatíveis com a preservação do meio ambiente. Atualmente, os recursos energéticos disponíveis incluem combustíveis fósseis, energia solar, eólica, hidrelétrica, fissão nuclear, geotérmica, entre outros. Cada opção possui vantagens e desvantagens, a opção pelo uso do carvão, cujas reservas são grandes em muitos países, traz a desvantagem de produzir degradação no meio ambiente devido a emissão maciça de dióxido de carbono para a atmosfera. A fusão nuclear tem grande potencial de fazer parte dos recursos energéticos que estarão disponíveis no futuro, como fonte de energia limpa, duradoura, segura e não agressiva para o meio ambiente.

PA9

Pragmatismo, investigação e inovação segundo o pensamento de C. S. Peirce.

Cassiano Terra Rodrigues

Instituto Tecnológico de Aeronáutica

O que é a investigação científica? Para Peirce (1839-1914), filósofo, lógico e cientista estadunidense, todas as investigações são passagens da dúvida à crença. No entanto, nem todos os métodos procedem da mesma maneira. Peirce distingue quatro: tenacidade, autoridade, a priori e científico. Destes, apenas o último, na sua visão é capaz de fixar as crenças de maneira objetiva. Com efeito, ao longo de sua vida, Peirce trabalhou para definir os diferentes momentos da investigação científica como uma passagem da heurística à testagem empírica, passando pela organização sistemática do conhecimento. Nesta apresentação, buscarei relacionar esses temas de modo introdutório, com uma palavra final sobre criatividade e heurística científica.

Seção de Apresentação Virtual

Tabela 7.1: N: Nuclear, A: Atômica e Molecular, E: Ensino, P: Plasmas, C: Sistemas Complexos

Distribuição dos trabalhos nas salas

S1	S2	S3	S4	S5	S6
N1	A1	A7	A14	E4	P1
N2	A2	A8	A13	E5	P2
N3	A3	A9	A15	E6	C1
N4	A4	A10	A16	E7	C2
N5	A5	A11	A17	E8	C3
E1	A6	A12	A18	E9	C4
E2				E10	

Sala 1 (Link da sala: <https://meet.google.com/ofx-pmyh-jpc>)

Thermal signature of the Unruh effect in the interference pattern

Herus Teixeira Lopes, Helder A. S. Costa, Irismar G. da Paz, Paulo R. S. Carvalho

Universidade Federal do Piauí

We introduce a simple and original method that allows to investigate the effect of acceleration on a typical single particle interferometer. For simplicity, we present our method in the language of quantum gate operation. We show that the interaction between an uniformly accelerated detector and a massless scalar field modify the interference pattern. In this scheme, the visibility of the interference pattern encodes information about the Unruh temperature.

Jatos de buracos negros na relatividade especial: efeitos físicos e visuais

Marina Chacon Rodrigues, Nadja S. Magalhães
Universidade Federal de São Paulo (UNIFESP)

Existem objetos mais rápidos que a velocidade da luz? Ao se estudar a cinemática de diferentes regiões de jatos relativísticos de objetos compactos, em que um dos seus componentes vetoriais seja relativístico e esteja se propagando em direção à Terra, pode-se obter, através de dados observacionais, que há regiões desses jatos com velocidades superiores à velocidade da luz. Porém, esse fenômeno resulta da relatividade de movimentos, sendo chamado de efeito visual de velocidade superluminal (CALVALCANTI e OSTERMANN, 2007). Se, no universo visível, acontecem esses efeitos visuais, no universo observável esses jatos têm uma velocidade inferior e muito próxima à velocidade da luz. A sua localização real não é aquela que é detectada pelos dados astronômicos, e esse fenômeno será chamado de efeito físico. Desta forma, o presente trabalho realiza um estudo utilizando principalmente o diagrama de Minkowski para estudar as diferenças entre os efeitos físico e visual - à luz da Teoria da Relatividade Especial. Através do diagrama se deduz as fórmulas do efeito visual relativístico de deformação aparente, qual traz o comportamento da deformação espacial e temporal com relação a diferentes velocidades relativas do objeto relativístico estudado. Desses parâmetros pode ser derivada a fórmula da velocidade aparente usada para calcular as velocidades superluminais, usadas nos artigos contemporâneos, como no SNIOS et al. (2019), que calcula que em duas regiões (nós) do jato relativístico na galáxia M87 há aproximadamente velocidades de 6,3 e 2,4 vezes a velocidade da luz. Assim, a importância desse estudo é compreender o que está sendo visualizado no universo, e o que se pode tirar desses dados para um estudo do universo observável, tendo em vista que tal fenômeno visual é percebido na natureza, mesmo que não tenha sido comprovada a existência de objetos movendo-se a velocidades superiores à velocidade da luz. Referências:

[1]CAVALCANTI, C. J. H.; OSTERMANN, F. Deformações geométricas e velocidade superluminal aparentes em objetos em movimento relativístico. Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 29, n. 3, p. 355372, 2007.

[2]SNIOS, B. et al. Detection of Superluminal Motion in the Xray Jet of M87. The Astrophysical Journal, v. 879, n. 1, p. 8, 2019.

Gravitomagnetismo: O desvio do periélio de mercúrio

Matheus Henrique Pavani Pacheco¹, Nadja Magalhães²

¹ Instituto Tecnológico de Aeronáutica,² Univ. Federal de São Paulo

A Teoria da Relatividade de Einstein (GTR) prevê, em um movimento lento (velocidade linear da fonte) e na aproximação de campo fraco, que um corpo com massa e girando lentamente induz uma pequena perturbação no movimento de uma partícula que o orbita. Basicamente, a analogia entre o campo magnético gerado pelo movimento de carga e um assim chamado campo gravitacional do "tipo magnético" gerado por uma massa em movimento foi considerado por muitos autores. O gravitomagnetismo (GM) é um fenômeno que consiste na interação gravitacional causada pelo movimento de rotação da fonte, da mesma forma que os efeitos magnéticos são gerados do movimento de carga elétrica. A equação de GM foi obtida por Joseph Lense e Hans Thirring em 1918 quando estudou soluções de equações de campo de Einstein usando o campo fraco e aproximação em movimentos lentos de sistemas rotativos. Eles notaram que quando um corpo se move em torno de um objeto massivo em rotação, ele percorre uma órbita em movimento análogo a uma partícula carregada, movendo-se próxima de uma carga em rotação. As equações que descrevem a órbita que eles obtiveram foram análogas às equações do eletromagnetismo de Maxwell, agora conhecidas como equações de Maxwell para GM. Neste trabalho será discutido a possibilidade de se explicar o avanço do periélio de mercúrio à luz do gravitomagnetismo

Effects of temperature in very massive white dwarfs and confrontation with observations

Sílvia Pereira Nunes¹, Manuel Malheiro¹, José D. V. Arbañil²

¹ Instituto Tecnológico de Aeronáutica, ² Universidad Privada del Norte

In this work, we investigate the structure of massive white dwarfs with finite temperature and their stability against radial oscillations, pycnonuclear reactions, and the inverse β -decay. Regarding the matter within hot white dwarfs, we consider that it is composed of nucleons and electrons confined in a Wigner-Seitz cell surrounded by free photons. Since photons are considered, to connect smoothly the interior solution with the vacuum solution outside the star, i.e., to obtain a null pressure at the star's surface, a temperature distribution is implemented. The temperature depends on the mass density considering the presence of an isothermal core. For some range of total mass, we find a larger total radius for greater temperatures. We obtain stable equilibrium configuration sequences that are compared with some white dwarfs from Ultraviolet Explorer Survey (EUVE) and Sloan Digital Sky Survey (SDSS). We note that some massive white dwarfs are well described by our curves with higher central temperatures, which motivated us to investigate them. We select a few massive white dwarfs to obtain mass and radius according to their effective temperature and gravity in our model. We found results in a similar range comparing to the ones in the literature, with exception of those that present masses $M \geq M_{\odot}$, which is a range affected by general relativity. For a few central temperatures and surface gravity above $2.5 \times 10^4 g_{\odot}$ considering general relativity, we derive a relation between mass and surface gravity that can be useful to derive white dwarf mass through surface gravity values and effective temperature. We obtain that the maximum mass point and the zero eigenfrequencies of the fundamental mode are determined at the same central energy density; thus indicating that in a sequence of equilibrium configurations, the maximum total mass marks the beginning of radial instability. Furthermore, regarding **low-temperature** stars, we show that pycnonuclear reactions occur in almost similar central energy densities, and the central energy density threshold for inverse β -decay is not modified. For central temperatures, $T_c > 5.0 \times 10^7$ [K], the onset of the radial instability is attained before the pycnonuclear reaction and the inverse β -decay.

The Lee-Wick field interacting with a point-like charge - the unexpected force behavior

Everson Henrique Rodrigues¹, Fabricio Augusto Barone Rangel²

¹ Instituto Tecnológico de Aeronáutica, ² Universidade Federal de Itajubá

Field models with higher order derivatives have been considered in the literature for some time. Having a wide range of applications, from microscopic models in particle physics to applications in cosmology, much attention has been given to vector or scalar formulations of models with higher order derivatives. In this work has been analyzed the scalar and vectorial Lee-Wick field, achieving analytically the propagator and numerically the energy and force. For both cases, it will be demonstrated that interaction force shows a unique and unpublished behavior for finite values of the Lagrangian coupling parameters. The analysis of the extrema cases shows that these parameters generate consistent results previously obtained.

DIFERENTES ESCALAS DE DISTÂNCIA EM ASTRONOMIA E ENSINO DE FÍSICA

Higor Felipe Gonçalves de Arruda¹, Ricardo Roberto Plaza Teixeira²

^{1,2}IFSP - Campus Caraguatatuba

Este trabalho tem como objetivo analisar as diferentes possibilidades de ensinar conceitos importantes de física por meio do estudo de diferentes escalas de distância usadas em astronomia. Deste modo, pretende-se avaliar a potencialidade didática do trabalho com diferentes unidades para mensurar distâncias, como quilômetro, ano-luz, parsec e unidade astronômica (UA). Uma forma para contextualizar estas unidades pode ser realizada explicando, por exemplo, que a ordem de grandeza das distâncias interplanetários dentro do Sistema solar está entre minutos-luz e horas-luz, que a ordem de grandeza entre estrelas dentro da Via Láctea está entre anos-luz e dezenas de milhares de anos-luz e que a ordem de grandeza entre galáxias está entre milhões e bilhões de anos-luz. A aprendizagem acerca das diferentes

distâncias existentes entre objetos astronômicos como planetas, estrelas e galáxias permite que os alunos desenvolvam uma compreensão mais ampla acerca das escalas envolvidas no estudo da astronomia. Trabalhar temas relacionados à astrofísica, cosmologia e astronomia possibilita também que exista maior interesse pelos alunos no que diz respeito às áreas de física e matemática (FRÓES, 2014). O uso de analogias e de comparações pode ser utilizado pela estratégia de propor, por exemplo, que o aluno considere uma escala na qual o planeta Terra tenha um diâmetro de um centímetro (algo da ordem do tamanho de uma bolinha de gude): neste caso é frutífero, em termos didáticos, solicitar para que ele tente estimar a qual distância, nesta escala (AGAN, 2004), estaria situado a Lua ou Marte ou o Sol ou a estrela mais próxima do nosso Sol (a estrela Alfa Centauri, também conhecida como Proxima Centauri) ou, até mesmo, a galáxia mais próxima da nossa galáxia, a Via Láctea (a galáxia de Andrômeda). Assim, o desenvolvimento de noções mais precisas acerca das ordens de grandeza envolvidas nas expressões distâncias interplanetárias, distâncias interestelares e distâncias intergalácticas, permite que os alunos tenham uma compreensão mais adequada das dimensões envolvidas no estudo tanto do cosmos como um todo, quanto dos diferentes corpos que existem no universo. Existe na internet, por exemplo, alguns programas que podem ser utilizados de modo a potencializar a compreensão de alunos acerca das escalas utilizadas no estudo da Astronomia, como é o caso do software de simulação intitulado Acti-onscript 2.0, com o qual é possível realizar um controle mais preciso na construção de escalas, tal como no caso das distâncias entre planetas e estrelas (VECHI et al., 2013). Há também na internet outros recursos e ferramentas que podem colaborar para o ensino de astronomia, como é o caso do canal disponível no Youtube intitulado “Teach Astronomy”, cujo link é [/urlhttps://m.youtube.com/user/astropedia](https://m.youtube.com/user/astropedia). Os vídeos de curta duração deste canal sobre distâncias astronômicas podem colaborar não só com o ensino de física, mas também para com a divulgação científica, pois fornecem um recurso didático modular para qualquer um que tenha acesso a internet (IMPEY et al., 2016). No site de armazenamento de vídeos YouTube há diversos vídeos de curta duração que trabalham de modo visual com as diferentes distâncias e tamanhos existentes no universo. Este é o caso dos

vídeos: "Zoom Cósmico" com 8 minutos e disponível no link https://www.youtube.com/watch?v=_jZa5wWpU5g; "Cosmic Eye" com 3 minutos e disponível no link <https://www.youtube.com/watch?v=8Are9dDbW24>; "A Comparação do Tamanho do Universo" com 7 minutos e disponível no link <https://www.youtube.com/watch?v=BueCYLvTBso>; "UNIVERSO OBSERVÁVEL - Da Terra aos grandes aglomerados de galáxias" com 3 minutos e disponível no link <https://www.youtube.com/watch?v=PAXLO1hIrzQ>; "Uma comparação do tamanho de planetas e estrelas" com 2 minutos e disponível no link <https://www.youtube.com/watch?v=RJouWLn7INM>. Conceitos em áreas da astronomia frequentemente invocam escalas de espaço e tempo que excedem em muito quaisquer escalas percebidas na vida diária. Conseqüentemente, os alunos por vezes desenvolvem intuições inadequadas de escalas que, por sua vez, impedem a compreensão de ideias científicas relacionadas (SCHNEPS et al., 2014). O ensino sobre diferentes escalas de distâncias em astronomia permite debater acerca da chamada "realidade do aluno" para além da experiência cotidiana imediata, possibilita inclusive desmistificar possíveis notícias falsas e apocalípticas, muito disseminadas pelas mídias digitais, com base no conhecimento científico adquirido sobre tópicos de astronomia (PIOVEZAN, 2020). A desconstrução de concepções equivocadas sobre escalas astronômicas contribui deste modo para a estruturação de uma cosmovisão embasada na ciência. Uma simulação interativa que permite ao usuário formar uma noção acerca das escalas de distâncias no âmbito do Sistema Solar pode ser acessada no site "If the Moon were only 1 pixel" ("Se a Lua fosse apenas 1 pixel") disponível no link https://joshworth.com/dev/pixelspace/pixelspace_solarsystem.html. Uma outra simulação de um mapa 3D do universo com as distâncias podendo variar de 2 pc até 50 Mpc é o In-The-Sky disponível em <https://in-the-sky.org/ngc3d.php>. De modo análogo, a simulação "The Scale of the Universe 2", conta com uma barra de rolagem que permite aumentar ou diminuir o zoom em uma variação ("range") de 10-35 m (comprimento de Planck) até 1027m (ordem de grandeza do tamanho do universo visível); ela pode ser acessada no link <https://htwins.net/scale2/>. Referências AGAN, Lori. Stellar Ideas: Exploring Students' Understanding of Stars. *Astronomy Education Review*, v. 3, n. 1, 2004. FRÓES, André Luís Delvas.

Astronomia, astrofísica e cosmologia para o Ensino Médio. Revista Brasileira de Ensino de Física, São Paulo, v. 36, n. 3, p. 3504-1;3504-15, 2014. IMPEY, Chris David. et al. Teach astronomy – A comprehensive online astronomy education and outreach resource. International Journal for Innovation Education and Research, v. 4, n. 10, p. 117-127, 2016. PIOVEZAN, Amanda Cristina Tedesco. Situação desencadeadora de aprendizagem no ensino de Astronomia: uma proposta de ensino de escalas astronômicas explorando notícias científicas. São Paulo: Dissertação de Mestrado (IAG-USP), 2020. SCHNEPS, Matthew H. et al. Conceptualizing astronomical scale: Virtual simulations on handheld tablet computers reverse misconceptions. Computers Education, v. 70, p. 269-280, 2014.

Estudos de Radiação Cósmica de Alta Altitude: Uma Experiência no Ensino Médio Público do Estado de São Paulo

Cesar Hipolito Pinto¹, Veronica Trevizoli²

¹Universidade Federal de São Carlos, ²Escola Estadual Roque Conceição

O trabalho tem por objetivo criar um modelo de dados importantes como radiação, pressão e temperatura para desenvolvimento de estudos de raios cósmicos e seus potenciais efeitos no clima, dispositivos eletrônicos e organismos biológicos, fazendo uso do lançamento de balão de alta altitude com eletrônica de baixo custo, baseado em Arduino e sensores Geiger. Com sucesso do primeiro lançamento e captura de dados, validamos a eficiência da eletrônica sujeita a baixas temperaturas e altas radiações, coletas adicionais com próximos voos permitirá o desenvolvimento de um modelo de dados para estudos de padrão de comportamento ao longo de um período de 5 anos, dessa forma permitindo aos alunos e professores os processos de investigação científica e aprofundamento nas ciências espaciais. / The work aims to create a model of important data such as radiation, pressure, and temperature for the development of cosmic ray studies and their potential effects on climate, electronic devices and biological organisms, making use of high-altitude balloon launch with low-cost electronics, based on Arduino and Geiger sensors. With the successful first launch and data capture, we validate the efficiency of electronics under severe

condition like low temperatures and high radiation, additional collections with upcoming flights will allow the development of a data model for behavior pattern studies over a 5-year period, thus allowing students and teachers the processes of scientific investigation and improve knowledge in space sciences.

Sala 2 (Link da sala: <https://meet.google.com/kuv-onrg-fcm>)

Heating of biomass in microwave household oven - A numerical study

Angélica Zaneze Fia¹, Jayr de Amorim Filho²

Instituto Tecnológico de Aeronáutica^{1,2}

In the search for greater autonomy and diversification of the energy matrix, biomass, from forest residues, active residues, agricultural activities, seaweed and food, has stood out as one of the most promising renewable sources in reducing dependence on fossil fuels, like oil and natural gas. In this work we present a numerical study of the heat of wood, sugarcane bagasse, orange peel and palm oil in a domestic microwave oven, since the heating by biomass microwaves has been seen as an important tool for the pre-treatment in the conversion of biomass into useful energy products, in addition to presenting considerable advantages over conventional heating. The study focuses on evaluating the energy absorption capacity of biomass in cylindrical and spherical geometries. Maxwell's equations are used to calculate the distribution of the microwave electromagnetic field inside the microwave oven cavity and in the integrated ones, together with a heat equation. Quantitatively, the power absorption capacity and temperature distribution uniformity were, respectively, due to the power absorption efficiency (PAE) ($0.07 < PAE < 0.87$) and the coefficient of variation (COV), ranging between 0.01 and 0.14. Two-dimensional graphs of temperature evolution over time were used to determine as a result of resonant peaks as a function of the peak. The heating efficiency rate was evaluated through the degree of thermal leakage ΔT ($1K < \Delta T < 102K$) and evolution of the average temperature \bar{T} ($298K < \bar{T} < 343K$) and its relation to the energy absorbed by, and COV, respectively. The covered evaluation coefficient (CEC), which classifies the usefulness of a specific sample in the industry, varied between 1 and 14, and was concluded for the biomasses and forms under analysis. The were classified according to the wavelength in each sample and the depth of penetration in different groups.

Branched polymer-based chemical sensors: a theoretical study on the influence of side groups

Bruno Hori Barboza, Gabriel Pires Oliveira, Alex Pifier Coleone,
Augusto Batagin-Neto

UNESP - Universidade Estadual Paulista

Organic polymeric materials are promising materials for chemical sensors applications, mainly due to their low costs, synthesis versatility, light weight, and suitable optoelectronic properties [1]. However, at the same time that it allows the production of varied derivatives, the number of (complex) processes involved in the analyte-polymer interactions hinders the proposition of improved systems. In this report, computational calculations were performed to evaluate the influence of side groups in the local reactivities [2] of Polythiophene (PT), Polyaniline (PANI) and Polypyrrole (PPy) branched derivatives aiming to identify relevant polymer sites for effective interactions with gaseous species and propose promising systems for chemical sensor applications. Electronic structure calculations and molecular dynamics simulations with reactive force fields [3] were conducted to obtain details about the adsorption processes of different gaseous compounds on the surface of the polymer's derivatives [4]. The results point out the relevance of PT-CN, PANI-CN, PANI-NO₂, PPy-CCH and PPy-CN as effective compounds. Our data suggest that the analysis of reactivity indexes and electrostatic potentials allows the identification of interesting polymer/analyte systems for application in chemical sensors, and to define possible degradation routes/processes. Acknowledgements: The authors thank the Brazilian National Council for Scientific and Technological Development (CNPq) for the financial support. References:

- [1] Anantha-Iyengar, G, et al. *Prog. Polym. Sci.* 88: 1–129 (2019)
- [2] Yang, W.; Mortier, W. J. *J. Am. Chem. Soc.* 108, 5708–5711 (1986).
- [3] van Duin, A. C. T., et al. *J. Phys. Chem. A* 105, 9396–9409 (2001).
- [4] L.G. Lascane, et al. *Eur. Polym. J.* 141, 110085 (2020).

Hexapenthalene: Propriedades eletrônicas de um novo alótropo de Carbono.

Caio Vitor Teixeira Costa, Eduardo Costa Girão

Universidade Federal do Piauí

Materiais constituídos a base de carbono, como o grafeno, mostram-se como um dos materiais mais indicados a ocupar o posto hoje pertencente ao Silício, como material mais utilizado na fabricação de dispositivos eletrônicos. Alguns novos alótropos bidimensionais do carbono geralmente possuem uma reorganização de átomos em estruturas não usuais como, por exemplo, a nanoestrutura conhecida como Graphenylene, que possui em sua estrutura uma mistura de anéis hexagonais unidos por pequenos anéis quadrados. Alguns desses materiais tem algumas de suas propriedades intimamente relacionadas às suas estruturas atômicas, logo, para fins de futuras aplicações é fundamental o desenvolvimento de pesquisas que visem estabelecer a relação entre essas propriedades e a formato dessas estruturas. Assim, propomos o estudo de um novo sistema bidimensional, de simetria hexagonal, onde a unidade estrutural é um grupo pentaleno, a que denominamos hexapenthalene. Além disso, realizamos cortes na estrutura hexapenthalene com a intenção de formarmos nanofitas unidimensionais (1D) que possam exibir propriedades eletrônicas distintas. O estudo das estruturas eletrônicas das nanofitas de carbono foi realizado pela Teoria do Funcional da Densidade por meio do pacote computacional SIESTA. Nosso estudo mostra que os sistemas investigados apresentam característica metálicas e sua densidade de estados próximos ao nível de Fermi é distribuída ao longo da estrutura e não nas bordas, como o grafeno.

Photoconductivity Effect in SnTe Quantum Well

Gabriel Ribeiro Ferreira Lopes¹, M.L. Peres^{1,2}, S. de Castro², B. Kawata³, P.H. de O. Rappl³, E. Abramof³

¹Univ. Federal de Itajubá, ²Univ. Estadual de Minas Gerais, ³INPE

This work presents a study regarding the photoconductivity effect observed in p-type SnTe quantum well, grown by molecular beam epitaxy. The sample is composed by a 30 nm SnTe quantum well modulated by $Pb_{0,90}Eu_{0,10}Te$ insulating barriers with dimensions of 1 μm and 300 nm. The photoconductivity is observed, using infrared (IR) and ultraviolet (UV) lights in the temperature range of 1.9 K – 150 K and negative photoconductivity (NPC) occurs for temperatures below 4 K, being highly dependent on the wavelength of the radiation. Magnetoresistance analysis shows that the NPC effect is not due to the topological surface states, but rather from mobility and trapping effects which affects the transport properties. Using a simple electrical transport model, shown below, we were able to explain the transition from positive to negative photoconductivity:

$$\Delta\sigma = q\mu_{dark}\Delta p + (p_{dark} + \Delta p)q\Delta\mu$$

In this model, the variation on mobility and carrier concentration under illumination is determined by $\Delta\mu = \mu_{light} - \mu_{dark}$ and $\Delta p = p_{light} - p_{dark}$, respectively. Comparison to a second analogous system, with slightly higher mobility and considering a wider range of electromagnetic radiation (1.3 eV - 3.4 eV), showed that the negative photoconductivity effect is also present below 4 K with the same dependence on wavelength but with smaller amplitude of photoresponse. From the SnTe band dispersion relation, the NPC effect being a strong function of the wavelength of the radiation may be due to the interaction of high energy photons with the band located above 2 eV and the consequent photoionization of localized states in this region.

Influência da intensidade de irradiação sobre as características elétricas de células solares sensibilizadas por corante

Antonio Augusto Cipriani¹, Diego Alexandre Duarte¹, Thyago Santos Braga^{2,3}

¹Universidade Federal de Santa Catarina, ²Instituto Tecnológico de Aeronáutica, ³EMBRAER

As células solares sensibilizadas por corante são dispositivos fotovoltaicos de terceira geração com visibilidade para desenvolvimento em solo brasileiro devido à disponibilidade de todos os materiais no mercado nacional para sua construção, ao contrário das tradicionais células solares de silício [1]. Dados do Laboratório Nacional de Energias Renováveis dos Estados Unidos [2] mostram que as células solares de terceira geração, apesar de serem novas no mercado mundial, apresentam eficiências de conversão comparáveis com as tradicionais células de silício, indicando sua capacidade para substituí-las em um prazo não muito distante. Entretanto, devido à idade relativamente nova desta classe de dispositivos, muitas propriedades ainda não são plenamente conhecidas e necessitam de mais investigações. É com este objetivo que este trabalho realiza o estudo das propriedades elétricas de células solares sensibilizadas por corante em função da intensidade de radiação utilizada para iluminação do dispositivo. O eletrodo de trabalho da célula foi construído com a deposição de TiO_2 (P25 Evonik) sobre uma lâmina de FTO ($\rho = 7 \Omega/\text{square}$) por meio da técnica Doctor Blade. O corante de rutênio roxo N3 (cis-ditiocianato-N,N-bis(2,2'-bipiridil-4,4'-dicarboxilato)-Ru(II)) foi incorporado por meio da imersão do eletrodo em solução de álcool anidro por 24 horas. O contra eletrodo foi produzido com um substrato de titânio recoberto por uma camada de platina. A selagem foi realizada com um filme termoplástico de $25\mu\text{m}$ de espessura (Meltonix 1170-25) e a célula foi finalizada com a injeção da solução eletrolítica composta por íons de iodo MPN-50 (50 mM de triiodeto (I_3^-) diluído em methoxipropionitrila). A obtenção das curvas de corrente e tensão elétrica foi realizada manualmente com um potenciômetro, amperímetro, voltímetro e uma lâmpada de vapor metálico (HP 400W Philips). As curvas foram medidas com a lâmpada posicionada em diversas distâncias da célula (14, 17, 20, 23 e 26 cm). A densidade de potência da radiação emitida pela

lâmpada (em mW/cm^2) foi medida em cada uma destas distâncias com auxílio de um calorímetro. Os dados mostram que, em distâncias menores, a potência de saída da célula é maior (8,0 mW em 14 cm e 2,0 mW em 26 cm); entretanto, as curvas obtidas se tornam mais lineares, indicando a ineficiência do dispositivo naquele regime de operação. A redução da distância aumenta a produção de fotoelétrons e a corrente de saída; porém, a corrente escura aumenta proporcionalmente, o que explica o comportamento linear da curva. Em distâncias maiores, a curva se aproxima do perfil em L, indicando a redução da corrente escura.

[1] P. S. L. Carvalho, P. P. D. Mesquita, M. A. R. Rocio, A rota metalúrgica de produção de silício grau solar: uma oportunidade para a indústria brasileira? BNDES Setorial (Metalurgia) 40, p. 205-234.

[2] NREL: Best Research-Cell Efficiency Chart, disponível em <https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html>.

Substituent Effects on the Structure and Aromaticity of Benzene Derivatives

Julio Cesar Verli Chagas, Francisco Bolivar Correto Machado

Instituto Tecnológico de Aeronáutica

Over the years, substituent effects have been extensively investigated in various classes of molecules, both experimentally and theoretically. Such studies have, for example, motivated thermodynamic and kinetic stabilization strategies in various materials, since the incorporation of different substituents allows the adjustment of their properties and consequent extension of the range of possible applications. The effect of substitution(s) on the structure and properties of benzene is one of the subjects that especially attracted the attention of researchers. In particular, the relationship between the effect of substituents and the aromaticity of benzene is one of the most prominent subjects. In this study, the influence of groups $C(CN)_2$, CH_2 , and O on π -electron delocalization in the benzene ring have been investigated based on the density functional theory. The changes of π -electron delocalization of the benzene fragment were estimated by use of geometry-based harmonic oscillator model of aromaticity HOMA, vibration-based aromaticity index AI(vib), magnetism-based nucleus independent chemical shift

NICS, and their variants. These analyses reveal that the π -electron destabilization effects for mono and para-disubstituted benzene derivatives are more expressive in systems containing oxygen, while systems containing the cyano group partially retain the aromatic character. The π -electron delocalization of benzene is only slightly affected by replacing one H atom with the substituents; on the other hand, para-disubstituted benzene derivatives have the π -electron delocalization strongly affected due to the appearance of a boldly expressed quinoid structure. (Acknowledgments: FAPESP, CNPq, and CAPES)

Sala 3 (Link da sala: <https://meet.google.com/lookup/fm51frycwh>)

Nanotubos como filtros para glifosato com viés ambiental

Letícia Carolaine Silva Faria, Tales Alexandre Aversi-Ferreira

Universidade Federal de Alfenas

A agricultura tem sido a maior fonte de contaminação ambiental por praguicidas. Alguns praguicidas são encontrados no fundo e superfície de águas, no solo, e na atmosfera sendo os responsáveis pela perda da biodiversidade e a deterioração de habitats naturais. Dentre os praguicidas/pesticidas, o glifosato é considerado um dos menos tóxicos; é um componente ativo de algumas marcas e extensamente utilizado na agricultura, no entanto, a Organização Mundial da Saúde (OMS) rotulou o glifosato como "provavelmente cancerígeno". Apesar de terem sido banidos a mais de 30 anos, praguicidas organoclorados permanecem no ambiente por décadas e podem tornar-se biologicamente concentrados por se entrarem na cadeia alimentar. Dentre os herbicidas, o Roundup, constituído de glifosato (N-fósforo metilglicina) como agente ativo, é o mais comum e cujo grupo funcional é a glicina substituída. O uso desse herbicida na agricultura iniciou-se em 1974 para o controle seletivo de ervas daninhas em lavouras de arroz, milho e soja. O glifosato é vendido em concentração de 48% (m/v) e as doses aplicadas são em torno de 5 L/ha. Atualmente, uma variedade de formulações contendo glifosato são produzidas nos Estados Unidos, Europa, Ásia e América do Sul estas são registradas em mais de 100 países, comercializadas com diferentes nomes. A agência de proteção ambiental norte-americana, que classifica os herbicidas pela sua toxicidade aguda em quatro categorias onde I o mais tóxico e IV o menos tóxico, classifica o glifosato como um herbicida de categoria IV. Um método para detecção e filtragem de substâncias no ambiente, é o uso de nanotubos de carbono como filtros de pesticidas. No caso, estudar a possibilidade de filtrar o pesticida mais usado indicará a maior ou menor eficiência do uso desse material. Nanotubos existem na natureza e podem ser fabricados especificamente para um fim, mas, entre outros, por questões de custos, a modelagem quântica deve ser aplicada primeiramente para se ter uma ideia da viabilidade do uso do material, como nanotubos associados, por exemplo, com ligantes polares no

caso para filtrar o glifosato. Portanto, com o auxílio da computação e mecânica quântica, é possível estudar a utilização de nanotubos de carbono (CNTs) ligados à hidroxila, como filtros para o glifosato. Os CNTs têm papel importante na nanociência devido às suas propriedades físico-químicas determinadas pelo seu tamanho diminuto, mas com grande área superficial e propriedades eletrônicas singulares que dependem de suas características geométricas. Este nanomaterial, descoberto em 1991 por Iijima com auxílio de um microscópio eletrônico de transmissão, como outra forma alotrópica do carbono constituído de cilindros concêntricos (dois ou mais), com espaçamento de 0,34nm, diâmetro externo da ordem de 4 - 30nm, diâmetro do cilindro interno da ordem de 2,2nm e comprimentos de até $1\mu\text{m}$. Por essa razão, estes foram nomeados de nanotubos de carbono de paredes múltiplas (do inglês: "Multi-Wall Carbon Nanotubes- MWCNTs). Mas o interesse por esse novo material cresceu ainda mais quando em 1993, Iijima e Bethune, independentemente, conseguiram sintetizar pela primeira vez o nanotubo de carbono de parede única, o SWCNT (do inglês: "Single-Wall Carbon Nanotube- SWCNT), utilizando para isso catalisadores metálicos. É utilizada para obter informações físicas do nanotubo como filtro, a teoria da densidade funcional (DFT) implementada no código SIESTA e a aproximação da densidade local (LDA) para o potencial de correlação de troca. Ambos Ceperley - Alder (CA). Esquema e parâmetros de Perdew e Zunger (PZ) serão usados. Para evitar o tratamento explícito dos elétrons centrais, os pseudopotenciais de Troullier-Martins conservadores de normas serão usados, com base em trabalhos anteriores. Para os elétrons de valência, usará uma base dupla zeta de valência dividida com funções de polarização (DZP). Para simular nanotubos infinitos unidimensionais, periódicos nas direções laterais (x, y), as regiões de vácuo serão 10×22 . A distribuição de carga atômica pode ser determinada a partir de cálculos do primeiro princípio. Neste trabalho, examinaremos a distribuição da densidade de carga topológica usando a análise de Mulliken implementada no código SIESTA. Para produzir resultados suficientemente precisos, estudos de convergências serão realizados para a energia de corte da grade (malha) e o número de k-pontos. A convergência total de energia para os diferentes sistemas é gerada para um corte de malha a 200 Ry; no entanto, usará 300 Ry para garantir a precisão.

Visto que o trabalho se encontra em estado inicial, teorias da mecânica quântica com auxílio do código SIESTA serão utilizadas para entender o comportamento do nanotubo como filtros para glifosato.

Stability and Aromaticity in (m,n) Periacenes and BN-Periacenes (m=3, n=2-7)

Luan Gabriel Fonseca dos Santos¹, Bruno Dória Milanez¹, Francisco B. C. Machado²

¹ Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro,^{1,2} Instituto Tecnológico de Aeronáutica

Carbon-based nanomaterials comprise a fascinating new area with many practical applications, combining Materials Science, Chemistry, Physics and Biological Sciences. In particular, polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs), conjugated aromatic molecules composed of fused benzene rings, have aroused wide scientific interest due to their important role in the aforementioned fields, ranging, for example, from Chemistry, Materials Science to Astrochemistry. In particular, PAHs are also considered graphene clipping models, especially in the case of larger PAHs, termed as nanographenes, graphene quantum dots (GQDs) and carbon nanodots. A possible alternative to study in detail the electronic properties of PAH molecules is the simplification of the problem utilizing surrogates, which still preserve the basic electronic characteristics of extended systems. However, extended systems, such as oligoacenes with more than five linear benzene rings, are characterized by having an electronic configuration of the singlet type with an open shell in the ground state or even presenting, in their ground state, a spin triplet configuration, giving these systems an elevated radical nature. Searching for alternative compounds in which the problems associated with high reactivity are reduced, the study was carried out in modified PAHs via the replacement of carbon atoms by Boron and Nitrogen atoms, forming the binary hexagonal compound known as Boron Nitride (h-BN), of which Borazine (six-membered BN ring similar to benzene) is the smallest molecular unit, and has been receiving several studies for having excellent physical and chemical properties and, above all, for the great commercial potential that can be explored. One of the main highlights is that this material (2D) has an almost ideal electrical insulation capacity,

as opposed to graphene, which is an excellent conductor. This property guarantees the applicability in electronic devices, being used, for example, as transparent membranes, in the encapsulation of materials and as dielectric substrate. Other properties that stand out are the high thermal conductivity, low dielectric constant, good lubricating properties, high thermal stability, high resistance to corrosion and oxidation, non-toxicity and high resistance to chemical attack. These characteristics allow this material to be used as a coating in the aeronautical, aerospace, chemical, among others technological fields. Due to the similarities in structure and characteristics with graphene, this compound is also known as “White Graphene”, being this compound formed by atoms of nitrogen and boron bonded alternately. In this study, the stability and aromaticity of systems constituting (m,n) rings were analyzed, where $m = 3$ armchair rings and $n = 2 - 7$ zigzag rings, both for compounds consisting only of carbon atoms (Periacenes) and by compounds where the carbon atoms have been replaced by BN pairs (BN-Periacenes). For this purpose, the B3LYP method was used, which is based on the density functional theory, with the set of base functions 6-31G(d). The results were analyzed operating with some stability and aromaticity descriptors, such as the HOMA index (Harmonic Oscillator Model of Aromaticity), which is based on the molecular geometry, the singlet-triplet (ST) energy gap, and the FOD occupancy number (Fractional Occupation Number Weighted Density) - NFOD. These descriptors indicate the aromatic character of the system, its energetic stability and the occupation of the orbitals, indicating the open shell character or the stability of the triplet state of the system, that is, they describe the radical nature. As the system grows, in the case of Periacenes, the values of the HOMA indices show that the aromaticity tends to decrease. The analysis of the results confirms that the radical character tends to increase, that is, there is a decrease in the triplet single-gap, an increase in the number of unpaired electrons and, therefore, the expansion of the chain causes an increase in instability. However, for the BN-Periacenes, it is verified that both the HOMA indices and the number of occupations of the structures tend to remain constant, thus, the system demonstrates a laconic stability variation in face of the enlargement of the structure. These observations are in agreement with literature results for simi-

lar systems and with experimental evidence for graphene and h-BN. In the case of Periacenes, calculations using methods with multireference wave functions (MR-AQCC) for these same systems [1] lead to the same conclusions as the results obtained in this study using the method B3LYP. Also, as is well known, graphene must have a zero gap and our results for the S-T gap change from 1.9 eV for the smallest system ($m=3$, $n=2$) to -0.2 eV (greater stability of the triplet) in our largest system ($m=3$, $n=7$). The NFOD ranges from 0.7 to 4.1, showing the elevated radical character. For BN-Periacenes, the S-T gap remains almost constant, ranging from 5.4 to 5.1 eV, with NFOD ranging from 0.2 to 0.5, indicating high stability and a closed shell character. Note that the value of the S-T gap is in agreement with the experimental and calculated results of the 2D h-BN system, which range from 4.9 to 7.0 eV [2,3]. Regarding aromaticity, the inquiry of the HOMA indices for the Periacenes shows great variation when compared to the corresponding BN-Periacenes. For the system ($m=3$, $n=7$) the highest and lowest values for the Periacene are 0.75 and 0.29, while for the BN-Periacenes they are 0.89 and 0.80, respectively. HOMA values close to 1.0 indicate aromatic systems. (Acknowledge to FAPESP and CNPq).

[1] Plasser, F.; Pašalic, H.; Gerzabek, M. H.; Libisch, F.; Reiter, R.; Burgdörfer, J.; Müller, T.; Shepard, R.; Lischka, H. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2013, 52, 2581-2584

[2] Nagashima, A.; Tejima, N.; Gamou, Y.; Kawai, T.; Oshima, C. *Phys. Rev. B.* 1995, 51, 4606-4613.

[3] Li, L. H.; Chen, Y. *Adv. Funct. Mater.* 2016, 26, 2594-2608.

Study of quantum-chemical descriptors and VCD spectrum of (R,S)-Ketamine enantiomers

Micael Davi Lima de Oliveira, Kelson M. T. Oliveira

Universidade Federal do Amazonas

Posttraumatic stress disorder (PTSD) is a psychiatric disease that affects people exposed to traumatic events such as wars, natural disasters and cases of violence. Among the most promising drugs is ketamine initially administered only as an anesthetic since 1970. However, it is an ambivalent molecule because although it has significant potential in the treatment of PTSD and depression, it is only safe when administered by physicians. In addition, one of its isomers, (S)-Ketamine can lead to psychotomimetic effects (hallucinations) and the risk of chemical dependency. Meanwhile, (R)-Ketamine has been shown to be a much more effective and safer antidepressant than (S)-Ketamine. Furthermore, the racemic mixture also poses risks to the patient. However, the exact molecular mechanisms of the Ketamine enantiomers and their diverse effects still remain unknown. Therefore, undoubtedly, chirality is a fundamental characteristic of nature and of great importance in the discovery of new drugs. First, we obtained the chemical structure of the (R) and (S)-Ketamine isomers on the PubChem platform. Afterwards, we performed the structural optimization at the level of DFT theory with exchange-correlation functional B3LYP together with 6-311G (2d, 2p) basis. Throughout all optimizations, the electronic state was considered as singlet, where all electrons were paired in their ground state. Throughout all the calculations we used the Gaussian09W software and GaussView 6 to generate the input files and visualize the results obtained. In this way, we were able to estimate several quantum-chemical descriptors, such as reactivity, electronegativity and dipole moment. In addition, we also estimate the vibrational circular dichroism (VCD) spectrum by calculating the vibrational frequencies. We chose to perform comparisons by the VCD spectrum, as the differences between the isomers were more notable compared to the IR spectrum. When comparing the dipole moments, we noticed a change in the stereochemistry of the dative covalent bond to the front of the plane in (R)-Ketamine, which may have resulted in an increase in the magnitude of the dipole moment. It was noted that in the drug (R)-Ketamine, the orientation of the dipole moment

was in alignment with the benzene ring, while (S)-Ketamine had its orientation modified almost opposite to its isomer. It was found that the (R)-Ketamine isomer had an electronic energy of - 1095.397480 Ha and 3.653615 D momentum while the S-Ketamine had -1095.402012 Ha and dipole momentum 3.136449 D. It is important to note that differences depending on software or computational architecture are usually in the third or fourth digit after the decimal point and therefore are just numerical fluctuations. However, we see that when comparing the ketamine enantiomers, the difference already appears in the first 1 digit after the decimal point, indicating changes of nuclear and electronic nature. Among the results for the electronic descriptors, the isomer (R)-Ketamine presented a chemical reactivity of $\Delta E \approx 4.9786eV$, while (S)-Ketamine had a value of $\Delta E \approx 5.4134eV$. Perhaps the lower reactivity of the (R) isomer prevents it from releasing more dopamine which can make it safer compared to the (S) isomer. Furthermore, the (R) enantiomer was less electronegative, as $\chi \approx 3.5269eV$ compared to the (S) enantiomer with $\chi \approx 3.5465eV$. As for the ionization potential, that is, the tendency to lose electrons, the (R) isomer was shown to have $I \approx 6.0162eV$ which is lower than the (S) isomer with $I \approx 6.2532eV$. As for the electrostatic potential, we noticed that the carbonyl group (C=O) presented a more negative character, and therefore a higher electrophilic attack potential in the (R) isomer compared to the (S) isomer. By means of the VCD spectrum, it was noticed that in the region of $300cm^{-1}$ the isomers generated opposite effects among themselves regarding the value of $\Delta\epsilon$ (variation of absorbance). Therefore, they presented a behavior practically symmetric to each other, evidencing the existence of a single chiral center. Another notable observation was the appearance of an unexpected negative peak near the $1750cm^{-1}$ region in the (R)-Ketamine isomer, something that did not occur in the (S) isomer. Therefore, we believe that the main differences that make (R)-Ketamine safer and more effective compared to (S)-Ketamine are: Lower chemical reactivity (ΔE), lower electronegativity (χ), lower ionization potential (I), more negative charge distribution around the carboxyl group, and higher electric dipole moment. Finally, we hope that these quantum chemistry results will help in the theoretical understanding of these enantiomers, whose mechanisms are still very unknown to science.

Elastic positron collisions with 1,1-difluoroethylene

Rafael de Oliveira Lima, Giseli Moreira, Alessandra Barbosa, Márcio Bettega, Sérgio Sanchez
Universidade Federal do Paraná

Seeking to reduce global warming emissions, the 1,1-difluoroethylene ($C_2H_2F_2$) molecule has been proposed as a safer candidate to replace perfluorocarbons in industrial applications. For this purpose it is important to obtain data about the electronic structure and cross sections of this system. Thus, it is necessary a reliable data base that can be used to model interactions and applications of this molecule. Experimental data for positron collision with 1,1-difluoroethylene was reported by Makochekanwa et al. [J. Phys. Chem. Ref. Data 46, 023102 (2017)]. Since there are no calculations available in the literature, we report a theoretical investigation on the elastic-positron-collision with the 1,1-difluoroethylene molecule for energies up to 10 eV. We compare our theoretical results to experimental results available in the literature. To compute the integral and differential cross sections, we employed the Schwinger multichannel method (SMC), with TZV++(2d,1p) basis set, in the static plus polarization approximation (SP), which take into account the distortion of the electronic cloud due to the incoming positron. In order to improve the description of the polarization effects, we have added two additional s - (exponents 0.04 and 0.01) and p -type (exponents 0.08 and 0.02) functions at the center of mass of the molecule. Due to the polar nature of the molecule, the Born-closure procedure has been employed to take into account the long-range interactions.

Aplicação do algoritmo VQE para computadores quânticos na análise de sólidos periódicos

Raphael César de Souza Pimenta, Anibal Thiago Bezerra
Universidade Federal de Alfenas

A resolução de equações variacionais foi uma evolução primordial para o estudo dos mais diversos problemas matemáticos e até mesmo filosóficos. Anos após os trabalhos de Bernoulli e Euler, o método variacional foi aplicado na mecânica quântica para encontrar aproximações do ground state de átomos e por consequência alguns de seus estados excitados e, por fim, os orbitais de diferentes moléculas. Ainda que trabalhando com aproximações para esses átomos e moléculas, as leis da mecânica quântica nos levam a problemas complexos demais até mesmo para os mais poderosos computadores clássicos resolverem. Uma alternativa para esse entreposto é trabalhar esses problemas em um computador quântico. Por mais que há algumas décadas esta solução fosse apenas uma ideia, hoje podemos aplicá-la em máquinas quânticas reais, conhecidas como NISQ (Noisy intermediate-scale quantum). Nesse sentido, para estudar Hamiltonianos de sistemas quânticos e aproximarmos o ground state e outros estados excitados de um sistema físico podemos utilizar um algoritmo híbrido chamado VQE (Variational Quantum Eigensolver). O VQE se tornou um grande aliado para o estudo de primeiros princípios em materiais que, por ser um problema de muitos corpos, se torna complexo de resolver. Atualmente este problema é resolvido utilizando computação clássica, com muitas aproximações como quando calculado o funcional para a densidade eletrônica. Com a computação quântica, no entanto, é esperado resolver problemas como o de primeiros princípios com uma maior eficiência do que com o método utilizado na computação clássica. Com o VQE temos o melhor dos dois mundos, utilizando a computação quântica para determinar o valor esperado do Hamiltoniano de uma dada configuração e com a clássica procuramos em qual configuração do Hamiltoniano ele se torna mínimo. Fazendo um levantamento bibliográfico percebe-se que há muitos trabalhos sendo feitos para sistemas moleculares, mas quando se trata de sólidos periódicos a literatura é escassa. Um modelo simples que pode ser utilizado para entender as formas com as quais o computador quântico pode ajudar no problema dos sólidos, é o modelo Tight Binding. Este modelo aplicado em sistemas

não interagentes pode ser usado para descrever sólidos periódicos e que resulta em um circuito de baixo custo computacional (o que é um requerimento dos processadores NISQ). Desse modo, aplicamos o modelo Tight Binding com o método VQE usando modelos bastante importantes, como o modelo SSH e o de Haldane, onde foi possível obter a estrutura eletrônica para sistemas periódicos com relativa precisão e baixo custo computacional. Este estudo ainda se encontra nos estágios iniciais e precisa de diversos aperfeiçoamentos, porém mesmo no estado atual demonstra grande potencial e com espaço para bastante desenvolvimento.

Aplicação de Métodos Tight-Binding na Investigação de Bicamadas Rotacionadas de Grafeno

Victor Gabriel Morele Duarte, André Chaves, Ivan Guilhon, Marcelo Marques, Lara Teles

Instituto Tecnológico de Aeronáutica

A descoberta do grafeno, uma folha de grafite com 1 átomo de espessura, originou um novo campo de pesquisa dedicado ao estudo de materiais bidimensionais, ou simplesmente materiais 2D. Em comparação com suas contrapartidas tridimensionais, os materiais 2D são muito mais susceptíveis ao meio externo, razão pela qual é possível combinar e ajustar as propriedades desses materiais com uma quantidade elevada de graus de liberdade. O interesse, em particular, por bicamadas de materiais 2D rotacionadas aumentou significativamente com a descoberta da supercondutividade no grafeno bicamada com rotação de aproximadamente 1.1° , que ficou conhecido como ângulo mágico. Este trabalho apresenta os resultados de simulações computacionais de um sistema formado por duas camadas infinitas de grafeno com rotações de diferentes ângulos, utilizando um modelo efetivo fundamentado por técnicas de Tight-Binding e Segunda Quantização. Será feita uma breve revisão da literatura relacionada, e em seguida serão discutidos resultados acerca da modelagem, das propriedades físicas e de como se pretende estender essa estratégia para materiais 2D mais sofisticados.

Sala 4 (Link da sala: <https://meet.google.com/bvy-jnrr-pgn>)

Excitonic Effects on Two-Dimensional Transition-Metal Dichalcogenide Monolayers: Impact on Solar Cell Efficiency

Alexandre Cavalheiro Dias¹, Helena Bragança², João Paulo A. de Mendonça¹, Juarez L. F. Da Silva¹

¹São Carlos Institute of Chemistry, University of São Paulo, SP, Brazil; ² Physics Institute, University of Brasília, DF, Brazil

The search for 2D systems for applications in solar cells has continuously challenged our community. In this work we performed a screening of 2D monolayers composed by transition metals from group IV-XI and the chalcogenides S, Se and Te. We combine DFT, MLWF-TB and BSE formalism to investigate the electronic, optical and excitonic properties of these systems, using a machine learning correlation analysis of the generated data to identify non-trivial correlations between optical and excitonic properties. From the 72 2H-TMD monolayers, phonon calculations show 22 stable systems, which 14 are semiconductors. Our results shows that the presence of excitons affects band alignment and PCE. We find high-efficiency vdW heterostructures of solar cells and observe a strong linear correlation between exciton energy and electronic band gap for the stable semiconductors.

Aproximação de quase-partícula para determinação de propriedades eletrônicas dos óxidos de gálio (Ga₂O₃) e índio (In₂O₃)

Vinicius Roberto Gomes Queiroz¹, Marcelo Marques¹, Lara Teles¹, Ivan Guilhon¹, J. Furthmuller², F. Bechstedt²

¹ Instituto Tecnológico de Aeronáutica, ²University of Jena

Gallium oxide Ga_2O_3 and Indium oxide In_2O_3 are metal oxides in group 13 of the periodic table and are gaining more and more importance in the scientific world today. Their importance is justified because these semiconductor oxides are transparent to ultraviolet radiation and have high conductivity, being characterized as TCO (Transparent Conducting Oxides, in English). Due to their properties, these compounds are widely used in the manufacture of optoelectronic devices, such as thin-film transistors, flat-screen displays and solar cells,

being promising materials in the area of optoelectronics and transparent electronics. However, despite its high applicability, its fundamental properties are still not well understood, both from an experimental and theoretical point of view. The determination of the gap is particularly complex, since the calculations involving DFT lead to a large deviation from the experimental value, caused by the underestimation inherent in DFT, which is strong in these oxides. The state-of-the-art GW leads to results close to the experimental ones, however, it requires a high computational cost and, therefore, it cannot be used for the largest polymorphs of these oxides, such σ -Ga₂O₃, ϵ -Ga₂O₃ and bcc-In₂O₃. Based on this panorama, there is a need for new methodologies to theoretically analyze the structure of these complex structures, which are so important for the development of new electronic devices. In this work, we present the application of the DFT + A-1/2 method, which has already demonstrated functionality for several oxides[1], for the determination of the most relevant electronic structures of gallium oxide (Ga₂O₃) and Indium oxide (In₂O₃), using based on the functional AM-05, which demonstrated great precision for oxides with a high gap value, as in the case in question. Structural analysis of the polymorphs was also carried out, using pure DFT, which was compared to the existing computational methods and experimental results. The gap problem was attacked, and, using AM-05 + A-1/2, we were able to obtain gap values comparable to the experimental ones, with a reduced computational cost compared to conventional methods, such as GW. Additionally, we were able to predict, in a satisfactory way, the electronic structure of polymorphs that did not have precise experimental or theoretical results in the scientific literature.

Estrutura Eletrônica de Nanofitas de Grafeno Empilhadas Contendo Dopagens Substitucionais.

Luís Eduardo Leite Macêdo

Universidade Federal do Piauí

Neste trabalho foram feitas simulações computacionais para determinar as propriedades eletrônicas de algumas nanofitas de grafeno usando o método DFT (Teoria do Funcional da Densidade). A princípio, utilizou-se como base uma fita aGNR de tamanho 12 para estudar suas propriedades eletrônicas, e em seguida, foram feitas algumas alterações no modelo inicial com dopagens substitucionais (substituindo carbono por átomos de nitrogênio) e também empilhando as fitas. Tendo os dados em mãos (gráfico de bandas e LDOS), é possível fazer uma comparação entre todas as configurações e verificar as alterações que ocorrem nas propriedades da fita ao dopar e/ou empilhar.

Spin-orbit coupling effects over thermoelectric transport properties in quantum dots

M. A. Manya¹, G. B. Martins², and M. S. Figueira¹

¹Univ. Federal Fluminense; ²Univ. Federal Uberlândia

We study the effects caused by Rashba and Dresselhaus spin-orbit coupling over the thermoelectric transport properties of a single-electron transistor, viz., a quantum dot connected to one-dimensional leads. Using linear response theory and employing the numerical renormalization group method, we calculate the thermopower, electrical and thermal conductances, dimensionless thermoelectric figure of merit, and study the Wiedemann-Franz law, showing their temperature maps. Our results for all those properties indicate that spin-orbit coupling drives the system into the Kondo regime. We show that the thermoelectric transport properties, in the presence of spin-orbit coupling, obey the expected universality of the Kondo strong coupling fixed point. In addition, our results show a notable increase in the thermoelectric figure of merit, caused by the spin-orbit coupling in the one-dimensional quantum dot leads.

Excitons de interface em semicondutores bidimensionais

Igor Leite Correia Lima, Andrey Chaves

Universidade Federal do Ceará

Éxcitons são quasi-partículas formadas por um estado ligado de um par elétron-buraco. Quando esse par de partículas se localiza na interface entre dois materiais, o chamamos de exciton de interface. Conhecer as propriedades físicas de éxcitons de interface em materiais semicondutores bidimensionais, como, por exemplo, em dicalcogenetos de metais de transição, (TMD's) é de grande importância para o desenvolvimento de novas tecnologias, dado o potencial inovador existente em transporte eletrônico em interfaces semicondutoras . Surpreendentemente, esses excitons são raramente observados em experimentos . Entender porque isso acontece é essencial para controlar a dinâmica dessas quasi-partículas e eventualmente desenvolver aplicações tecnológicas. Neste trabalho, investigamos o comportamento de excitons em interfaces entre monocamadas de WS_2 e MoS_2 , com ênfase na energia de ligação e no tamanho efetivo do éxciton. Para descrever a interação entre elétron e buraco no sistema, utilizamos o potencial de Rytova-Keldysh. Estimamos as funções de onda e energias de ligação resolvendo numericamente a equação de Schrodinger, na aproximação de massa efetiva, através do método variacional. Nossos resultados mostram que, quanto maior for a região da interface, na qual há uma liga semicondutora, menor será a energia de ligação e, conseqüentemente, a probabilidade de formação de excitons a partir de absorção da luz. Esta dependência da energia de ligação do exciton sobre o tamanho da interface, porém, nos permite alcançar tempos de vida mais longos para o exciton em interfaces maiores, o que pode ser de interesse para aplicações que envolvem, por exemplo, fotodeteção.

Estabilidade e Aromaticidade do Benzeno e Naftaleno Após Inserção de Átomos de Oxigênio

Fabiana Fernandes dos Santos¹, Julio C. V. Chagas², Francisco B. C. Machado²

¹Universidade do Vale do Paraíba, ²Instituto Tecnológico de Aeronáutica

Os poliacenos ou os n-acenos são moléculas aromáticas constituídas por uma série de anéis de benzeno fundidos em uma disposição linear. Eles foram identificados como semicondutores orgânicos, servindo como material funcional para a nova geração de dispositivos fotovoltaicos e transistores de efeito de campo. A potencialidade prática dos poliacenos se deve principalmente aos valores excepcionalmente baixos do gap de energia HOMO-LUMO, que resulta em uma mobilidade de carga bastante superior ao de outros compostos orgânicos. Além disso, como consequência dos efeitos de confinamento quântico, as propriedades eletrônicas dos acenos tais como gap óptico, potencial de ionização, gap singleto-triplete ou ainda as energias de ligação do elétron podem, em princípio, ser moduladas com o aumento do número de anéis de benzeno fundidos. Esse estudo constitui em investigar a aromaticidade e a estabilidade das moléculas de benzeno (C₆H₆) e naftaleno (C₁₀H₈) quando da substituição de 2 átomos de hidrogênio por 2 átomos de oxigênio que é um acceptor de elétrons. As substituições foram feitas em várias posições das moléculas. Buscou-se assim, determinar a relação da posição da substituição com a aromaticidade e a estabilidade dos sistemas moleculares. Todas as análises foram realizadas utilizando cálculos de estrutura eletrônica por métodos da química computacional, em particular, pelo método da teoria do funcional da densidade B3LYP com o conjunto base def2-TZVP. A aromaticidade foi caracterizada usando o descritor geométrico HOMA (Harmonic Oscillator Model of Aromaticity) através das geometrias otimizadas pela metodologia B3LYP/def2-TZVP. A estabilidade foi analisada pelas energias totais e pelos gaps de energia HOMO-LUMO e singleto-triplete. Os principais resultados mostram que no caso do benzeno substituído a maior aromaticidade e estabilidade ocorre quando da substituição na posição para do anel. No caso do naftaleno, a maior estabilidade é verificada quando das substituições dos dois átomos oxigênios pelos dois de hidrogênio no mesmo anel. (Agradecimentos: FAPESP, CNPq e CAPES)

Sala 5 (Link da sala: <https://meet.google.com/ido-nwke-esy>)

Desenvolvimento de protocolo de análise dos efeitos vibracionais sobre o vetor gravitacional resultante em equipamentos para estudo de microgravidade

Edval Rodrigues de Viveiros¹, Emanuel Soares da Silva¹, Letícia Rayssa Baraúna da Silva², Crisman Penalva Santos³, Eliane Patrícia Cervelatii⁴

Centro Universitário Católico Salesiano Auxilium Unisalesiano Araçatuba

Studies on biological effects in low gravity environments, or microgravity, are relatively known and well researched, mainly motivated by NASA investigations related to the effects of decreasing the action of the gravitational field in human body. Based on initial experiments with plants, the effects of microgravity on microorganisms, pharmacological compounds and even on medicines are currently being researched. Equipment for study in artificial microgravity environments, from 'clinostat', 'random positioning machine' and 'rotating-wall vessel', can use different experimental methodologies where mechatronic control systems are designed to operate at low rotations (from 1 -20 RPM). In this sense, the effect of the various modes of vibrational interference caused by the various mechanical parts of the equipment, such as motors, track roller, bearings, engine main bearing, etc. can induce considerable alteration and distortion in the vector resulting from the gravitational field induced by the equipment, causing it, as a consequence, to induce effects with consequences in the samples treated by the experiment. Therefore, the objective of this paper is to outline an analysis protocol for conducting experiments in vibration analysis, using the Fourier Transform analysis, in the time and frequency domain, as a physical-mathematical foundation, in order to evaluate the different spectra that can be obtained. For this, sensors and SDAV software for simulation (from Teknikao company) will be used, evaluating the spectrum curves for "Velocity", "Vibration signal demodulation - folder" and "Acceleration" of the following mechanical elements : bearings, balls, motor shafts and transmission system. For bearings, BPFI, BPFO, BSF and FFT defects will be evaluated. For bearings, the failure in the rolling element is evaluated; cage failure; external lane failure; internal track failure; unbalance; misalignment;

shaft warping. The organization of data in the form of a protocol will be carried out through the preparation of an analytical spreadsheet of the FMEA type - Failure Mode and Effect Analysis, thus obtaining the respective technical standardizations for the adjustments and experimental and testing procedures with the objective of minimizing vibrational effects, within each of the developed spectra. This research will use three prototypes, one two-dimensional "Clinostat" and two "Rotating-wall vessel" or "Random Positioning Machine" (three-dimensional), developed by academics of Computer Engineering and Mechanical Engineering from the Catholic University Center Salesiano Auxilium - Unisalesiano Araçatuba, through "Scientific Initiation PIBIC", "Undergraduate Thesis" and also in the "Special Research Project" modality. An academic from the Pharmacy Course at the same institution also participates.

Clinostat, Random Positioning Machine, Rotating-wall Vessel: projeto de protótipos para estudo em microgravidade

Edval Rodrigues de Viveiros¹, Kphefciana G.Rossi¹, Mariana de Oliveira², Ricardo A. M. da Costa³, Dyogo H. da Silva⁴, S. Emanuel Silva⁵, Crisman P. Santos⁶

Centro Universitário Católico Salesiano Auxilium Unisalesiano Araçatuba

In this paper, we present the final result in the development of equipment for research in microgravity environments, respectively called "Clinostat", "Random Positioning Machine" and "Rotating-wall vessel". Through "Synetic" and "Morphological Matrix" analysis, the various engineering techniques used for the elaboration of the three prototypes are analyzed, including: a) Experimental objectives with the respective prototype; b) Prototyping techniques used; c) Mechatronic systems developed for equipment control and automation (types of meshes, actuators and sensors); d) Block Diagram, Transfer Functions and Laplace Transforms for each developed solution. As an example of the Automation and Control of the equipment, three electronic control units were developed, one to drive alternating current motors, with contactors and relays, another unit with a Programmable Logic Controller - PLC - WEG model Clic02, and another control module

consisting of an authorial didactic PLC (with 8 individual relays), with an Arduino microcontroller. As sensor elements, we mention: flame sensor, accelerometer with gyroscope, infrared sensor, ultraviolet sensor, piezoelectric sensor, temperature sensor, humidity sensor. As for the actuators, the options used included: alternating current motor, direct current motor for low speed, stepper motor with control drive, low torque. For one of the prototypes (of the "Rotating-wall vessel" type) a software was also developed that, in addition to simulating the effects of the gravitational field vector on the studied sample, also allows to analyze several possible physical parameters to be part of a given experimental arrangement, such as: temperature, humidity, presence of gases, light incidence in various bands of the visible light spectrum. The software also features several configuration windows for sample boundary conditions, such as volume, mass. It is possible to design different containers for storing the samples. The geometric configuration of these devices can vary for each type of equipment, and may start from different parameters such as specific mass of the sample, sample volume, and consequent distinct results for centripetal force, centrifugal acceleration, and also on parameters such as angular velocity and rotations per minute. References for the design of these equipments were based on works such as by Alves (2013), entitled "Development of a three-dimensional clinostat with three rotation axes that allows the exchange of sample holders". Currently (June 2021), one of the prototypes (Rotating-wall vessel) is being prepared so that validation tests of the equipment can be started. For this, one of the research references are the works and prototypes developed by the "Micro G – Center for research in microgravity", of the Pontifical Catholic University of Rio Grande do Sul. "Development and Validation of a 3D Clinostat for the Study of Cells during Microgravity Simulation" (Russomano et al., 2005, published in the "Proceedings of the 2005 IEEE Engineering in Medicine and Biology 27th Annual Conference Shanghai, China, September 1-4, 2005). It is worth mentioning that a methodology (protocol) will also be used in this prototype to minimize the vibratory effects caused by the mechanical system of the equipment. For this, we have a partnership with the brazilian company "Teknikao", which will help us in the theoretical and experimental elaboration of this monitoring, using sensors in

the equipment, coupled with specific vibration analysis software. As a theoretical framework for these experimental procedures related to the physical effects of vibration, we cite the work of Van Loon et al. (2008), referenced below. ALVES, Karina de Oliveira. Desenvolvimento de um clinostato tridimensional com três eixos de rotação que permite a troca de suportes de amostras. Dissertação de Mestrado. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica da Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul. Porto Alegre: 2013. VAN LOON, J.J.W.A.; VAN LAAR, M.C.; KORTERIK, J.P.; SEGERINK R.B.; WUBBELS, R.J.; DE JONG, H.A.A.; VAN HULST, N.F. An atomic force microscope operating at hypergravity for in situ measurement of cellular mechano-response. *Journal of Microscopy*, Vol. 233, Pt 2 2009, pp. 234–243. Received 12 February 2008; accepted 12 August 2008. Thanks for technical support: 1) Mrs. Luciano Ponci - Teknikao Indústria e Comércio Ltda. Brasil. 2) Profa. Dra. Eliane Patrícia Cervelatti.

Development and construction of a didactic module of electrical circuits for remote experimentation in physics teaching

Lucas de Oliveira Estevam¹, Mateus Henrique Ribeiro¹, Lucio Rogério Júnior², Guilherme Henrique Alves³, Welington Mrad Joaquim⁴, Jonas Fábio Barbosa⁵

^{1,4,5}Universidade de Uberaba, UNIUBE; ^{2,3}Universidade Federal de Uberlândia, UFU

This article presents the development, construction and application of a didactic kit for practical experiments on electrical circuits, remotely controllable through the internet. The equipment was designed with low-cost hardware and software resources, easy commercial access and using current devices that are easy to implement. Developed with open source technologies, the practices module was built from a Raspberry Pi microcomputer, and subdivided into four parts: a web application developed in HTML, CSS, Javascript, PHP and MySQL and a local application coded in Python language, running on Raspberry; two electronic boards, one as an interface for controlling the resistors of the main electrical circuit of the module, and the other as a linear-type DC source for powering the circuit; a cabinet designed

and manufactured in MDF to accommodate all physical components of the equipment; and a mixed electrical circuit for experiments, composed of 9 power resistors, 10 voltmeters and 3 ammeters. To access remotely, a Login system was built, generating greater security and an interface of buttons that, when activated, make requests to a server, recording the status of the activated button in an SQL Database (Structured Query Language) . Tests were carried out to verify the integrity of the hardware and software devices of the didactic kit, considering that they did not present failures, allowing the equipment to be installed in a physics laboratory. The module was connected to the internet and made available intermittently for use by high school physics students. Through the execution of practice scripts, created specifically for the didactic module, students were able to verify in practice Kirchhoff's laws of voltages and currents, and also Ohm's law, through a real, interactive and totally remote experiment. Making the module available to schools with little or no physical science laboratory facilities could be a way to increase accessibility and reduce financial and structural barriers to promoting education.

**Interferômetro de Michelson-Morley de baixo custo
confeccionado em acrílico na CNC Laser para aplicação no
sistema público de ensino**

Mariana Hilgert, José Adriano de Araujo, Leandro da Silva
Herculano, Fabrício Tronco Dalmolin
UTFPR

The main goal of this work is making a low cost Michelson-Morley interferometer through simple techniques for its construction, becoming the experiment accessible to teachers of public school. This experiment proposes the use of the equipment for high school and undergraduate classrooms, in order to allow the teaching of contents such as Einstein's Theory of Relativity, including the physical principles of interferometric gravitational wave detectors, and the wave nature of light. This work brings up the problems that led to the construction of the first experiment of its kind, carried out by Michelson and Morley in 1881, the approach to light as a wave in high school and early undergraduate periods, as well as the methods and materials used to

build the experiment. KEY-WORDS: Michelson-Morley Interferometer, physics teaching, gravitational waves, wave nature of light.

ENFATIZANDO AS INTERRELAÇÕES ENTRE ASTROFÍSICA E COMPUTAÇÃO EM ATIVIDADES DE EDUCAÇÃO CIENTÍFICA

Vinicius Carvalho Rosa¹, Ricardo Roberto Plaza Teixeira²

^{1,2}IFSP - Câmpus Caraguatatuba

O presente trabalho avalia a potencialidade da utilização de conhecimentos de astrofísica e computação de forma articulada em atividades educacionais de divulgação da ciência, envolvendo, por exemplo, conceitos sobre buracos negros e inteligência artificial. A divulgação científica é um ramo que está crescendo significativamente ao longo dos últimos dez anos (SILVEIRA; SANDRINI, 2021) e temas como estes costumam apresentar um grande potencial de uso. Na atualidade a divulgação científica adquiriu uma importância ainda maior, devido ao crescimento do negacionismo da ciência, como o terraplanismo e o movimento antivacina, que encontraram "brechas", sobretudo nas mídias digitais e redes sociais, para poder divulgar e vender as suas crenças: cientistas, divulgadores da ciência e educadores têm que levar esta realidade em consideração e perceber a importância de trabalhar com os métodos da ciência junto ao público leigo em geral. Logo, se tornou fundamental a intermediação ou transposição didática dos conhecimentos acadêmicos até a sociedade, para combater a disseminação das pseudociências e anticiências. A observação do céu noturno, em particular, encanta os seres humanos desde pelo menos a antiguidade com a consequente estruturação de narrativas mitológicas e religiosas envolvendo os primeiros conhecimentos de astronomia. A astrofísica a partir do século XX permite de modo análogo a construção de narrativas científicas úteis para a área da educação. Alunos da educação básica se sentem bastante atraídos pelo estudo dos astros e de temas de astronomia, astrofísica e cosmologia, como, por exemplo, buracos negros, exoplanetas, astrobiologia, características dos planetas do sistema solar e de seus satélites, ondas gravitacionais e a teoria do Big Bang, dentre outros (LAVONEN et al., 2005; SCHREINER, 2006; FROES, 2014). A partir do crescimento exponencial tecnológico

e científico ocorrido no final do século XX, especificamente, os estudos acerca do tema de buracos negros, tem-se destacado (ALMEIDA, Carla Rodrigues, 2021). Cientistas como Stephen Hawking, Roger Penrose, Andrea Ghez, Reinhard Genzel e Katherine Bouman, realizaram contribuições consideráveis para o desenvolvimento de pesquisas na área da astrofísica que se dedica ao estudo dos Buracos Negros. Mesmo pesquisadores como Lia Medeiros e Thaisa Storchi Bergmann têm realizado trabalhos de destaque sobre buracos negros. Um passo relevante a este respeito foi, em 2019, o registro da primeira imagem de um buraco negro supermassivo, localizado no centro da galáxia Messier 87 (M87*). Em 24 de março em 2021, por sua vez, foi divulgado a primeira imagem do campo magnético do buraco negro supermassivo M87*. Um fato que evidenciou a importância que esta área adquiriu foi a premiação, no ano de 2020, com o Nobel de Física para 3 cientistas (Roger Penrose, Reinhard Genzel e Andrea Ghez), pelos seus estudos sobre buracos negros em geral. No caso de Roger Penrose, suas pesquisas sobre o tema se iniciaram em 1965 quando ele escreveu um artigo seminal a respeito deste tipo de singularidade que recentemente foi traduzido para o português (SOUZA, 2021). Já Reinhard Genzel e Andrea Ghez desenvolveram pesquisas de destaque sobre o buraco negro supermassivo situado no centro da Via Láctea, nomeado de Sargittarius A*. Buracos negros são objetos extremamente densos que distorcem drasticamente o espaço-tempo ao seu redor, criando um campo gravitacional tão forte que aprisiona tudo que está em seu interior, inclusive a luz: é neste sentido que se diz que a velocidade de escape de um buraco negro é maior que a velocidade da luz (ALMEIDA, Carla Rodrigues, 2021). Apesar de já serem previstos mesmo no âmbito da mecânica clássica, foi durante o século XX, com a Teoria da Relatividade Geral que os estudos e as pesquisas acerca de buracos negros se desenvolveram. O aprendizado de máquina, por sua vez, foi uma ferramenta fundamental para a produção da imagem do buraco negro supermassivo situado no centro da galáxia Messier 87, uma galáxia elíptica localizada a cerca de 53 milhões de anos-luz da Terra, na constelação de Virgem (GERALDO, 2019). Esta imagem mostrou, a correção da Teoria da Relatividade Geral na forma como ela prevê um buraco negro (SIEGEL, 2019). Para chegar a este registro, Katie Bouman, a cientista que liderou a equipe responsável por esta pes-

quisa, desenvolveu um algoritmo que permitiu reproduzir a imagem do Buraco Negro, utilizando técnicas de machine learning para resolver problemas associados a interferências de ruídos e identificações de padrões visuais, com o intuito de refinar a reconstrução da imagem (HARDESTY, 2016). O aprendizado de máquina é um subcampo da área de estudo da Inteligência Artificial que tem como objetivo resolver problemas complexos que, muitas vezes, os seres humanos não são capazes de resolver em um tempo razoável: o imageamento de buracos negros é uma possível área de aplicação do aprendizado de máquinas. A convergência cada vez maior que ocorre em trabalhos de pesquisa de fronteira da ciência inter-relacionando astrofísica e computação, cria possibilidades para que estas duas áreas sejam utilizadas de modo articulado como fontes de conteúdos para a realização de atividades de popularização da ciência que podem ser úteis também para o propósito da alfabetização científica. Neste sentido, o tema do imageamento de buracos negros pode permitir uma frutífera transposição didática de conhecimentos científicos de astrofísica e computação para fins de divulgação científica. Referências: ALMEIDA, Carla Rodrigues. Buracos negros: mais de 100 anos de história. *Cadernos de Astronomia*, v. 2, n. 1, p. 93-93, 2021. GERALDO, Nathália. Quem é a mulher responsável pela primeira fotografia de um buraco negro da história? *Vix*, 10/04/2019. HARDESTY, Larry. A method to image Black Holes. *MIT News*, 2016. LAVONEN, Jari et al. Pupil Interest in Physics: A Survey in Finland. *Nordic Studies in Science Education*, v. 2, n. 1, p. 75-82, 2005. SIEGEL, Ethan. 10 lições que a primeira imagem do horizonte de eventos de um buraco negro nos ensina. *Sprace*, 2019. SILVEIRA, Mauro César; SANDRINI, Rafaela. Divulgação científica por meio de blogs: desafios e possibilidades para jornalistas e cientistas. *Intexto*, n. 31, p. 112-127, 2014. SOUZA, Julio Cesar Chirichella Felicioni de. Singularidade: O artigo seminal sobre buracos negros. *Cadernos de Astronomia*, v. 2, n. 1, p. 93-93, 2021.

O ENSINO DE FISICA NO COTIDIANO: UMA POSSIBILIDADE PARA ALUNOS DA INDÚSTRIA

Eloisio Marques de Moraes

UCAM – UNIVERSIDADE CÂNDIDO MENDES E SESI

A Ciência é um modo de pensar e para muitos é uma questão de sobrevivência, mas ao lado dela está a Tecnologia e boa parte de todo conforto existente no mundo é graças a essas duas. Ficamos maravilhados ao ver toda gama de mecanismos que nos rodeiam e isto é muito bom, contudo isto tem um preço e não é muito barato não. Alguns homens lhes dedicam toda uma vida e alguns deles a consideram como se fosse uma deusa, um deles que me vem à memória agora se chama Carl Sagan, porém ele foi mais que um cientista, foi na verdade um verdadeiro divulgador da Ciência, e em muitos de seus livros como, por exemplo: Romance da Ciência, O Mundo Assombrado pelos Demônios fazemos uma viagem que jamais podemos esquecer. Existem outros Michael Faraday, Isaac Newton, Galileu Galilei e tantos outros que não caberia agora citar. Um deles principalmente Michael Faraday gostava muito de experimentos estava uma vez construindo um mecanismo e foi visitado pela rainha da Inglaterra e a mesma perguntou-lhe para que aquilo servia e então ele disse: “Majestade para que serve um bebê”, mal ela sabia que a partir dali nasceria o motor elétrico. Galileu Galilei também gostava de experiências, tanto que foi através dele que nasceu a Ciência Experimental e nem precisamos falar em Newton com suas experiências com ótica.

Método de imãs imagem aplicado à frenagem magnética de um disco metálico

Vinicius de Alcantara Névoa

California Institute of Technology

The method of images is of renowned importance in classical electromagnetism, especially in physical systems that involve an electrostatic distribution of charges in space. A relatively unknown version of this technique can be applied to thin conductor surfaces in the presence of time-dependent magnetic fields, and therefore constitutes a powerful analytic tool to deal with the difficult subject of eddy currents, that

appears so often in science and engineering. The idea is that whenever the external magnetic field changes, the eddy current-induced field accompanies this change so that Maxwell equations are instantaneously satisfied, and then these newly formed eddy currents die out as others replace it (if the external field continues to vary). The purpose of this article is to expose this method and exemplify its application to the magnetic breaking of a thin rotating metal disc. An important characteristic of this method is that appropriate magnetic images can be tailored to render the current streamfunction zero in a given contour (up to some usually negligible error in the eddy current distribution), thus reproducing the physical boundary condition that represents finite surfaces. This article is strongly inspired by a problem the author solved for the IYPT (International Young Physicists Tournament) in 2019.

Sala 6(Link da sala: <https://meet.google.com/mng-idhj-ppe>)

Aplicação de Microjato de Plasma na Modificação Superficial do PEAD

Eduardo Cezar Barbosa de Barros Aragao¹, Bogos Nubar Gomes Sismanoglu¹, Marcelo Pêgo²

¹ITA,²ESALQ

O presente trabalho consiste na confecção, caracterização e aplicação de microjatos de plasma operando em pressão atmosférica. Confeccionou-se um microjato em geometria coaxial, utilizando para isso folhas de cobre, tubos de aço cirúrgico, bem como tubos de alumina com alto grau de pureza e terminais elétricos. A espectroscopia óptica foi usada para caracterizar a temperaturas rotacionais vibracionais e de excitação dos microjatos, onde conseguimos observar uma temperatura que variou de 320 a 430K, com o hélio como gás de trabalho. Após essa caracterização o microjato de plasma foi aplicado na modificação superficial do Polietileno de Alta Densidade (PEAD), para tal foram usados três pontos diferentes do jato obtido com vazão de 3slm, na metade do comprimento do jto, em 75% de su comprimento e ao fim do jato observou-se modificações tanto químicas quantos físicas já nos primeiros 5 segundos de tratamento além de uma evolução dos grupos funcionais C=O,C-O e COOH à medida que o tempo de tratamento

avança, foi possível observar também que o ponto de tratamento situado em 75% do comprimento do jato, apresentou uma significativa diferença tanto na molhabilidade quanto na incorporação de grupos funcionais em sua superfície, evidenciando que há regiões onde o tratamento exercido pela pluma de plasma apresenta uma eficiência maior que outras

EVAPORATION OF ALUMINA PARTICLES USING THERMAL PLASMA

Franciele Dias de Castro
UFPEL

Thermal plasma is widely used industrially, whether in the deposition of coatings or in the production of nano particles. In deposition processes involving thermal plasma, the powder that enters the torch is carried along by the working gas, heated and melted. To carry out the deposition of coatings from this powder, as droplets formed by the molten material come into contact with a substrate and are cooled. In the case of the production of nano particles, the application of thermal plasma consists of evaporation the powder inserted into the plasma. In this process, the dust is totally evaporated, the dust particles undergo rapid cooling and are collected. The equipment used will be a plasma torch built in the Surface Engineering Laboratory at Furg. The plasma torch is consists of an anode and a cathode, gas and dust inlet, cooling water inlet and outlet. Between the anode and the cathode an electric arc is generated. When interacting with the electric arc, the gas is heated and ionized inside the torch, generating plasma. Specifically, the objectives of the research are to identify the parameters that influence the evaporation of alumina (Al_2O_3), develop analytical formulations that calculate the residence time of the particle in the plasma to quantify the material evaporation as a function of this time and the velocity of the particles and the gas flow. To this end, an experimental methodology is being developed that allows measuring the speed of particles and the amount of evaporated mass, in order to validate the evaporation model. It is expected to obtain the parameters and an equation of evaporation. A model will be determined that can be used for other materials, besides alumina,

in the prediction of material evaporated as a function of the operational conditions of the thermal plasma system. These research results on Al₂O₃, vaporization can serve as a subsidy both as a first step in the development of the process for the production of alumina nano particles by thermal plasma and in the optimization of the deposition of alumina coatings by plasma spray.

Reconhecimento de perfis de sentimentos de multidões humanas

Celso Rene dos santos, Vânia Gomes

IFSP Caraguatatuba SP

Esse trabalho tem como finalidade, comprovar como a ciência da computação pode inferir as emoções a partir de expressões da face humana. Nosso principal caminho é o reconhecimento facial, que já foram exaustivamente utilizados pela ciência da biometria, unindo a mesma o reconhecimento das emoções extraídas das expressões faciais, ainda não muito utilizada pela ciência da psicologia. Pesquisas sobre o reconhecimento facial são aplicadas desde o âmbito mais interno da Psicologia Moderna para a uma série de avaliações, monitoramento, processos, mas o ramo que mais se utiliza destas opções está localizado no mundo dos negócios, publicidade e marketing, treinamento de agentes de segurança, localização na web de terroristas, mas infelizmente o uso destes recursos estão mais presentes em países desenvolvidos. Reconhecer emoções pelas expressões faciais é considerado uma das formas mais primitivas utilizadas pelo homem, PAUL EKMAN, John Wiley & Sons, no entanto, esse é um desafio muito complexo para a criação de aplicativos computacionais, devido à necessidade de combinação de diferentes técnicas para essa classificação.

Estatística de sistemas Pseudo-hermitianos no ensemble Beta-Laguerre

CLEVERSON ANDRADE GOULART

Universidade de São Paulo

Eugene Wigner, na década de 50, introduziu as matrizes aleatórias em física estudando o espaçamento dos níveis de energia de núcleos atômicos pesados. Desde então, o número de aplicações de matrizes aleatórias em física se estendeu para as mais diversas áreas, além de física atômica. Bender e colaboradores, no início dos anos 2000, estudavam hamiltonianas complexas, não hermitianas, que possuíam espectro real. Operadores como essas hamiltonianas ficaram conhecidos em literatura como operadores pseudo-hermitianos. A propriedade central apresentada por essa classe de operadores é que eles estão ligados ao seus adjuntos por uma transformação de similaridade. Buscamos, nesse contexto, estudar as propriedades estatísticas de operadores pseudo-hermitianos através de matrizes aleatórias no ensemble Beta-Laguerre, ou ensemble de Wishart. Observamos que apesar da distribuição de autovalores coincidir nos casos hermitianos e pseudo-hermitianos, o espaçamento dos autovalores difere.

Uma solução exata para o pêndulo simples por meio das funções elípticas de Jacobi

Gabriel Fernandez Ferrari Melo, Giovana Alves

Universidade Estadual da Região Tocantina do Maranhão

Nesse trabalho discutiremos a solução da equação do pêndulo simples:

$$\phi'' + \omega_0 \sin(\phi) = 0$$

$$\phi(0) = 0, \phi'(0) = \phi'_0$$

em que ϕ pode ou não ser um ângulo pequeno. Apresentaremos a solução clássica para a aproximação de pequenas oscilações $\phi \approx 0$ e a solução exata da EDO não linear a qual é determinada por meio da quadratura obtida pela conservação da energia:

$$\frac{ml^2}{2}\phi'^2 + mgl(1 - \cos(\phi)) = E$$

e dada em termos da função elíptica de Jacobi: $sn(u)$. Não obstante determinamos os aspectos físicos de interesse relacionados ao modelo e comparamos com os resultados obtidos para o caso das pequenas oscilações.

Transientes caóticos e histerese em um modelo de dínamo α^2

Dalton Nunes¹, Erico L. Rempel¹, Roman Chertovskih², Bidya B Karak³

Instituto Tecnológico de Aeronáutica¹, Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto², Department of Physics, Indian Institute of Technology (Banaras Hindu University)³

A dinâmica do campo magnético solar pode ser estudada por meio da teoria do dínamo de campo médio, que se baseia na aproximação de duas escalas, o que sugere que o campo magnético consiste em um campo de grande escala com flutuações de pequena escala. O campo em grande escala pode ser gerado pelo efeito α^2 , relacionado à helicidade cinética do fluido. No modelo de dínamo, o efeito α^2 , é responsável pela regeneração dos componentes poloidal e toroidal do campo. A presença de transientes caóticos em um dínamo α^2 não linear é investigada por meio de simulações numéricas diretas das equações magneto-hidrodinâmicas 3D. Ao variar o parâmetro que controla a injeção de helicidade cinética no domínio, uma bifurcação de explosão histerética é conjecturada como sendo responsável pela transição para o dínamo, levando a um aumento repentino na energia magnética do atrator.

Mini cursos

Minicurso 1

Óptica de filmes finos, uma análise prática por elipsometria espectrofotométrica

Douglas Leite, André Pereira

Instituto Tecnológico de Aeronáutica

Neste minicurso serão apresentados os conceitos físicos e os modelos matemáticos que descrevem o comportamento óptico de filmes finos transparentes e semitransparentes. Estes conceitos e modelos, em conjunto com as propriedades de polarização da luz, fundamentam a aplicação da técnica de elipsometria espectrofotométrica como poderosa ferramenta para caracterização de filmes finos. Através desta técnica não destrutiva é possível determinar com grande precisão as funções dielétricas do material e, por conseguinte, os observáveis ópticos como índice de refração e coeficiente de extinção/absorção, ao mesmo tempo em que se determina com grande acuidade a espessura das camadas que podem variar de poucos nanômetros até dezenas de micrômetros.

Neste contexto, os aspectos práticos da configuração do equipamento, da realização das medidas, e da análise de resultados também compõem parte importante do minicurso. Também serão apresentados exemplos práticos de resultados obtidos no elipsômetro HORIBA UVISEL 2, de última geração, instalado nas dependências do Laboratório de Plasmas e Processos do ITA.

Minicurso 2

Não Linearidade Óptica em Lasers de Cascata Quântica

Teldo Pereira

UFMT

Lasers de Cascatas Quânticas (QCL) empregam transições quânticas entre estados eletrônicos de energia localizados em hetero-estruturas contendo múltiplos poços quânticos. Como as energias das transições podem ser controladas através da largura dos poços, os QCL podem cobrir emissões de energia variando do infravermelho médio (NIR) ($3\mu\text{m} \leq \lambda \leq 24\mu\text{m}$) até o início da região terahertz (THz) ($70\mu\text{m} \leq \lambda \leq 200\mu\text{m}$). A radiação THz é vagamente definida como a região do espectro eletromagnético entre 0.1 THz e 10 THz, e possui enorme potencial tecnológico de aplicação em diversas áreas das ciências básicas e aplicadas, como astronomia [1], química [2], bio-segurança [3] e telecomunicações [4]. A radiação THz ocupa uma região peculiar do espectro eletromagnético estando no meio do caminho entre a região óptica (altas energias) e as microondas (baixas energias). Isto traz uma série de características específicas tanto na pesquisa fundamental quanto na aplicada. No que se refere às novas tecnologias da comunicação, as mudanças no comprimento de onda óptico para um espectro de banda terahertz (THz) tem se mostrado favorável para a vinculação da comunicação em banda larga. Para além da comunicação, o uso do espectro de banda THz apresenta uma grande variedade de aplicações promissoras, tais como em espectroscopia de impressão digital, monitoramento de ambientes, imagens médicas, entre outras. Neste minicurso, irei apresentar uma abordagem perturbativa [5] para descrever os processos de conversão não-lineares em estruturas QCL sob excitação NIR. Essa abordagem teórica será aplicada para demonstrar que a susceptibilidade não linear de segunda ordem pode variar em ordens de magnitude como resultado de gigantes destrutivos, bem como construtivos, efeitos de interferência em sistemas complexos.

[1] A. Maestrini A. Int.Symp. on Space THz Technology; Pasadena; USA; (2007).

[2] D. Mittleman, Sensing with Terahertz radiation, Springer Books (2004).

[3] B. Ferguson and X-C. Zhang, Materials for terahertz science and technology, Nature Materials 1, 26 (2002).

[4] M. Koch, Terahertz Communications: A 2020 vision, Springer Netherlands (2007).

[5] R. W. Boyd, Nonlinear Optics, Third edition, Academic Press (2008); P. W. Milonni, J. H. Eberly, Laser Physics, John Wiley & Sons (2010).

Índice de Autores

- Abramof
E., 41
- Aguiar
Marcus, 21
- Alves
Giovana, 73
Guilherme Henrique, 64
- Arbañil
José, 32
- ARRUDA
Higor Felipe Gonçalves de,
33
- Aversi-Ferreira
Tales, 45
- Bagnato
Vanderlei, 15
- Balster
George, 57
- Barbosa
Alessandra, 52
Jonas Fábio, 64
- Barboza
Bruno Hori, 39
- Batagin-Neto
Augusto, 39
- Bechstedt
F. , 55
- Bettega
Márcio, 52
- Bezerra
Anibal, 53
- Braga
Thyago, 42
- Bragança
Helena, 55
- Carvalho
Paulo R. S., 29
- Castro
Franciele, 71
- Cervelatii
Eliane Patríci, 61
- Chacon-Rodrigues
Marina, 30
- Chagas
Julio, 43, 59
- Chaves
Andrey, 58
André, 54
- Chertovskih
Roman, 74
- Cipriani
Antonio, 42
- Coleone
Alex Pifier, 39
- Costa
Caio, 40
Helder A. S., 29
Ricardo A. M. da, 62

da Paz
 Irismar G., 29
 Dalmolin
 Fabrício Tronco, 65
 de Castro
 S., 41
 Dias
 Alexandre, 55
 Duarte
 Diego, 42
 Victor, 54
 Estevam
 Lucas, 64
 Faria
 Letícia, 45
 Ferrão
 Luiz, 25
 Fia
 Angélica, 38
 Figueira
 Marcos S., 57
 Filho
 Gilberto, 24
 Franco
 Francis, 17
 Furthmuller
 J., 55
 Girão
 Eduardo, 40
 Gomes
 Vânia, 72
 Goulart
 Cleverson, 73
 Guerra
 Vasco, 19
 Guilhon
 Ivan, 54, 55
 Herculano
 Leandro da Silva, 65
 Hilgert
 Mariana, 65
 Joaquim
 Wellington Mrad, 64
 Kawata
 B.; Rappl
 P. H. de O., 41
 Lima
 Igor, 58
 Rafael, 52
 Lopes
 Herus, 29
 Lourenço
 Odilon, 26
 Machado
 Francisco, 43, 59
 Macêdo
 Luís, 57
 Magalhães
 Nadja S., 30
 Nadja, 31
 Malheiro
 Manuel, 32
 Manya
 Marco A., 57
 Marques
 Marcelo, 54, 55
 Melo
 Gabriel, 73
 Mendonça
 João, 55
 Milton

João, 20
 Moraes
 Eloisio, 69
 Moreira
 Giseli, 52

 Nunes
 Dalton, 74
 Sílvia, 32
 Névoa
 Vinicius, 69

 Oliveira
 Gabriel Pires, 39
 Kelson, 50
 Mariana de, 62
 Micael, 50

 Pacheco
 Matheus, 31
 Pazianotto
 Maurício, 26
 Peres
 M. L., 41
 Pessoa
 Sávio, 23
 Pimenta
 Raphael, 53
 Pimentel
 Guilherme, 20
 Pinto
 Cesar, 36
 Pêgo
 Marcelo, 70

 Queiroz
 Vinicius, 55

 Rangel
 Fabricio, 33, 47

 Rempel
 Erico, 74
 Remple
 Erico, 27
 Ribeiro
 José Adriano de Araujo, 65
 Mateus Henrique, 64
 Roberto
 Marisa, 28
 Rodrigues
 Cassiano, 28
 Everson, 33, 47
 Rogério Júnior
 Lucio, 64
 Roman
 Bidya, 74
 ROSA
 Vinícius Carvalho, 66
 Rossi
 Kphefciana G., 62

 Sanchez
 Sérvio, 52
 Santos
 Celso, 72
 Crisman P., 62
 Crisman Penalva, 61
 Fabiana, 59
 Silva
 Dyogo H. da, 62
 Emanuel Soares da, 61
 Juarez, 55
 Letícia Rayssa Baraúna da,
 61
 S. Emanuel, 62
 Sismanoglu
 Bogos Nubar Gomes, 70

 TEIXEIRA

Ricardo Roberto Plaza, 33, 66	Veronica, 36
Teles	Valadares
Lara, 24, 54, 55	Fernando, 18
Trevizoli	Viveiros
	Edval, 61, 62