



24-26 Novembro 2013
Curitiba/PR

Edição:
Fernanda Brandalise Nunes
Diego Farago Pastega
Eduardo Bonini Guedes
Rodrigo José Ochekoski Mossanek

I Encontro de Físicos do Sul

Alta Reggia Plaza Hotel

Curitiba - 24 a 26 de Novembro de 2013

Livro de Resumos

Editores:

Fernanda Brandalize Nunes

Diego Farago Pastega

Eduardo Bonini Guedes

Rodrigo José Ochekoski Mossanek

APOIO

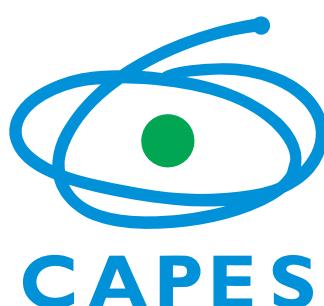


**FUNDAÇÃO
ARAUCÁRIA**

*Apoio ao Desenvolvimento Científico
e Tecnológico do Paraná*



*Conselho Nacional de Desenvolvimento
Científico e Tecnológico*



Prefácio

É com imenso prazer que o comitê organizador local recebe os participantes do I EnFiSul – Encontro de Físicos do Sul. A iniciativa de realizar o encontro de Físicos da região sul do Brasil surgiu durante a reunião dos coordenadores das pós-graduações em Física na sede da CAPES em Brasília em 2012.

Talvez por falta de informação, não é raro encontrar interação entre pesquisadores de estados mais distantes do que entre aqueles da nossa região. Sendo assim, os pesquisadores do sul do país por vezes não se reconhecem como possíveis colaboradores, não discutindo e/ou pesquisando assuntos comuns, ou mesmo de enfoque regional. O presente evento tem por objetivo acabar com esse distanciamento entre físicos da região sul, estreitando relações de pesquisadores e alunos dos três estados. Este evento surge não apenas para divulgar as pesquisas de ponta realizadas pelos diversos grupos, mas também para discutir a ciência de alto nível gerada e criar novas ou fortificar antigas colaborações. Este evento ainda é de grande valia para a criação de redes de trabalhos regionais, e para a discussão de políticas científicas de interesse da comunidade que atua nesta região do país.

Avaliando a participação dos Físicos dos estados do Sul do Brasil em encontros nacionais de grande porte, como o Encontro Nacional de Físicos da Matéria Condensada, pôde-se perceber que o número é muito inferior ao número de inscritos deste nosso Primeiro EnFiSul. Nos ENFMC de 2012 (110 pessoas) e 2013 (107 pessoas), o número de inscritos é menos que 50% dos inscritos neste evento, o que reforça sua importância e necessidade de realização.

Vale ressaltar que, neste processo de organização, alguns colegas me informaram que este não é, de fato, o I Encontro de Físicos do Sul. Mas que já houve outras sete edições anteriores, com um nome diferente – Encontro de Físicos do Sul do Brasil (EFSB), sendo que a última era para ter sido organizada em Curitiba no ano de 1983! Eis que 30 anos depois, por coincidência, este evento volta a ser realizado, e na cidade que deveria ter ocorrido então.

Por fim, esse evento só foi possível de ser realizado em tão pouco tempo devido ao comprometimento do Comitê Local, o trabalho em equipe foi gratificante e edificante. O apoio do Comitê Regional foi essencial, principalmente incentivando e viabilizando a participação de membros de suas unidades.

Mais uma vez, sejam todos bem-vindos e que esta retomada do EnFiSul seja apenas a primeira de uma série ininterrupta. Bom evento a todos!

Prof^a. Dr^a. Lucimara Stoltz Roman
Chairperson I EnFiSul

Coordenação Geral
Lucimara Stolz Roman - UFPR

Comitê Regional
Alexandre Diehl - UFPEL
Sérgio Ribeiro Teixeira - UFRGS
Luis Carlos Malacarne - UEM
Luis Guilherme Carvalho Rego - UFSC
Cláudio Masumi Maekawa - FURG
Avacir Casanova Andrello - UEL
Sergio Leonardo Gómez - UEPG
Lucio Strazzabosco Dorneles - UFSM

Comitê Local
Carlos Eduardo Fiore dos Santos - UFPR
Evaldo Ribeiro - UFPR
Marcio Henrique Franco Bettega - UFPR
Marcos Gomes Eleutério da Luz - UFPR
Rodrigo José Ochekoski Mossanek - UFPR
Sergio d'Almeida Sanchez - UFPR

Secretaria Geral
Leila Regina Navarro de Brito - UFPR

	Domingo	Segunda-feira	Terça-feira
8:00		Plenária 1 - Enrique Zurbano (Un. Chile)	Plenária 2 - Denis Boyer (UNAM)
8:30		Palestra 1 - Raimundo Rocha (UFRJ)	Palestra 6 - Marcia Barbosa (UFRGS)
9:00		Coffee break	Coffee break
9:30		Palestra 2 - Wido Schreiner (UFPR)	Palestra 7 - Eduardo Di Mauro (UEL)
10:00		Palestra 3 - Paulo Piquini (UFSM)	Palestra 8 - Antonio Bento (UEM)
10:30		Seção de Pôster 1	Seção de Pôster 3
11:00			
11:30			
12:00		Almoço	Almoço
12:30			
13:00			
13:30		Palestra 4 - Nilson Garcia (UTFPR)	Palestra 9 - André Pasa (UFSC)
14:00		Palestra 5 - Gilberto Kremer (UFPR)	Palestra 10 - Oscar Nassif (UFMG)
14:30		Comunicações orais 1	Comunicações orais 3
15:00			
15:30		Coffee break	Coffee break
16:00			
16:30		Comunicações orais 2	Comunicações orais 4
17:00		Seção de Pôster 2	Seção de Pôster 4
17:30			
18:00	Abertura	Mesa Redonda	Encerramento
18:30			
19:00	Coquetel		
19:30			
20:00		Jantar	
20:30			

DOMINGO 24/11**CHEGADA - 15h****ABERTURA - 18h****COQUETEL - 18h30****SEGUNDA-FEIRA 25/11 - MANHÃ****PLENÁRIA 1 - 8h****Prof. Dr. Enrique Tirapegui Zurbano**

Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas - Universidad de Chile

Universality in Single Neuron Dynamics**PALESTRA 1 - 9h****Prof. Dr. Raimundo R. dos Santos**

Instituto de Física – Universidade Federal do Rio de Janeiro

Mott Regions and Entanglement of Fermionic Atoms on a Two-Dimensional Optical Lattice

In experiments with ultracold atomic gases in optical lattices, the presence of a confining potential (trap) causes the atomic density to vary across the lattice. One important consequence is that different many-body phases can coexist within the trap. In a trapped three-dimensional Fermi gas, for instance, a core with atoms in an insulating Mott state surrounded by a metallic phase has been experimentally observed [1]; this arrangement has led to the proposal of a cooling protocol to observe antiferromagnetism in the Mott core [2]. Here we consider a two-dimensional system of trapped fermionic atoms, represented by the Hubbard model on a square lattice. We use Lanczos diagonalization in the grand-canonical ensemble to extract the ground state properties; in order to eliminate finite-size effects in the small 2D clusters considered (number of sites, $N_s = 8; 10$), signaled by plateaux in the density vs: chemical potential plots [3], we have performed averages over twisted boundary conditions [4] and resorted to a local density approximation (LDA). With this, we have been able to study the evolution of the metallic-Mott coexistence with the trap curvature, as well as with the strength of the on-site repulsion. We have established that Mott cores evolve to Mott rings as the trap curvature increases, and we also show that the area of these regions can be cast in the form of a universal function, once the area and the trap curvature are properly scaled. We also discuss the onset of antiferromagnetic correlations and the entanglement properties; the relation between the von Neumann entropy and charge fluctuations is also established.

[1] U. Schneider et al., Science 322, 1520 (2008).

[2] T. Paiva et al., Phys. Rev. Lett. 107, 086401 (2011).

[3] R. Mondaini, K. Bouadim, T.Paiva, and R. R. dos Santos, Phys. Rev.B 85, 125127 (2012).

[4] C. Lin, F. H. Zong and D. M. Ceperley, Phys. Rev. E 64, 016702 (2001).

PALESTRA 2 - 10h

Prof. Dr. Wido Herwig Schreiner

Departamento de Física – Universidade Federal do Paraná

Avanços na Produção de Nanopartículas pela Síntese LASiS

Será descrita a técnica LASiS de produção de nanopartículas com ênfase nas suas vantagens inerentes. Descreveremos alguns exemplos de aplicações práticas de nanopartículas geradas com esta técnica. Alguns desenvolvimentos atuais interessantes e promissores serão apresentados e discutidos.

PALESTRA 3 - 10h30

Prof. Dr. Paulo Cesar Piquini

Departamento de Física - Universidade Federal de Santa Maria

Nanofios de InAs e InP: Propriedades Eletrônicas, Mecânicas, Óticas e Oxidação

A busca pela integração e miniaturização crescente de dispositivos mecanooptoeletrônicos empregados nos mais diversos instrumentos alcançou um outro patamar quando as técnicas experimentais de síntese e manipulação evoluíram ao ponto de ter-se domínio sobre a formação e constituição de materiais em nível nanométrico. Além do avanço experimental, algoritmos computacionais modernos, teorias fisicoquímicas avançadas e computadores de alto desempenho permitem que se explore as propriedades e características de materiais, do ponto de vista teórico, com alto grau de precisão. Nanofios, devido à sua geometria particular, constituem-se, naturalmente, em potenciais candidatos a conectores entre elementos ativos de circuitos eletrônicos ou, de maneira mais interessante, como estes próprios elementos ativos. Nanofios têm suas propriedades alteradas em relação à fase cristalina macroscópica devido a feitos de superfície e confinamento quântico. Entretanto, ao buscar-se nanofios para aplicações específicas, em geral toma-se como guia as propriedades exibidas por suas fases cristalinas macroscópicas. Particularmente, o arseneto de índio (InAs) é um material semicondutor com uma massa efetiva bastante baixa, enquanto o fosfeto de índio (InP) é amplamente empregado como dispositivo ótico. Desse modo, é bastante atraente a utilização de nanofios baseados em In, As e P para aplicações em ópticoeletrônica. Nesta apresentação apresentamos resultados de investigações via simulação computacional de primeiros princípios, através da teoria do funcional da densidade, das propriedades eletrônicas, mecânicas, óticas e de oxidação de nanofios puros de InAs e InP, assim como de heteroestruturas InAs/InP e ligas $\text{InAs}_{1-x}\text{P}_x$. Nossos resultados abordam a variação do gap de nanofios puros com o diâmetro destes, a variação das propriedades eletrônicas destes nanofios puros sob tensão externa, o comportamento das propriedades mecânicas destes nanofios, a dependência das propriedades óticas de ligas $\text{InAs}_{1-x}\text{P}_x$ com sua composição e o estudo dinâmico do processo de oxidação de nanofios de InP.

SESSÃO DE PÔSTERES 1 - 11h

Física Geral

1. Effects Of Quantum Deformation On The Spin-1/2 Aharonov-Bohm Problem

F. M. Andrade¹, E. O. Silva²

¹UEPG, Ponta Grossa, Brazil

²UFMA, São Luis, Brazil

2. Diffusion In Heterogeneous System Separate By A Semipermeable Membrane

M. A. F. Dos Santos¹, F. S. Michels¹, R. S. Zola², L. R. Evangelista¹, E. K. Lenzi¹

¹Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, Maringá - PR, Brazil

²Universidade Tecnológica Federal do Paraná - Câmpus Apucarana - Apucarana - PR, Brazil

3. The N-Site Approximation Scheme For The K Multiplet-Creation Model With Absorbing Phase Transitions

A.A. Ferreira

UFPEL

4. Robustness Of First-Order Phase Transitions Into Absorbing States

C. E. Fiore

UFPR, Curitiba, Brazil

5. **Estudo Das Oscilações Amortecidas Através Da Análise Do Pêndulo Magnético**
V. G. Garcia, A. G. Bezerra Jr, J. A. Lenz
UTFPR, Curitiba, Brazil
6. **Formulação Lagrangiana Para Sistemas Dissipativos**
C. E. Krumreich, M. J. Lazo
FURG, Rio Grande do Sul, Brazil
7. **Nitretação Iônica De Aço Inoxidável Martensítico AISI 420 Por Descarga Luminosa (Plasma DC)**
B. C. E. S. Kurelo¹, S. L. R. Da Silva¹, G. B. De Souza¹, C. E. Foerster¹ E C. Alves Jr²
¹UEPG, Ponta Grossa, Brazil
²UFRN, Natal, Brazil
8. **Refinamento Pelo Método De Rietveld De Fases Minerais De Um Latossolo Vermelho Distrófico**
W. Leite, S. C. Saab, A. M. Brinatti
UEPG, Ponta Grossa, Brazil
9. **Qualidade Do Refinamento Pelo Método De Rietveld Em Amostras De Solo**
W. Leite, S. C. Saab, A. M. Brinatti
UEPG, Brazil
10. **Diffusion Equations And Spatial Fractional Derivatives**
A. F. B. Duarte, J. M. G. Pereira, E. K. Lenzi
UEM, Maringá, Brazil
11. **Nascimento Da Dinâmica Caótica E Mudanças De Estabilidade Em Sistemas Conservativos**
C. Manchein¹, M.W. Beims²
¹UDESC, Joinville, Brazil
²UFPR, Curitiba, Brazil
12. **Nonmarkovian Reaction Diffusion Process On A Substrate In A Semi-Infinite Medium**
F. S. Michels¹, M. A. F. Dos Santos¹, M. K. Lenzi², G. GonCALVES³, E. K. Lenzi¹
¹Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá - Maringá - PR, Brazil
²Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Paraná - Curitiba - PR, Brazil
³Departamento de Engenharia Química, Universidade Estadual de Maringá - Maringá - Paraná, Brazil.
13. **Oral Tolerance Under The Perspective Of Complex Systems**
P. J. Miranda¹, M. Delgobo¹, S. E. S. Pinto^{1,2}, G. M. Favero¹
¹UEPG, Ponta Grossa, Brazil
²University of Aberdeen, Aberdeen, United Kingdom
14. **Comparison Between Some Bipartite Entanglement Measures And A Geometrical Approach**
D. F. Orsimi, M. G. E. Da Luz
UFPR, Curitiba, Brazil
15. **Phase Diagrams For Contact Processes In Distinct Sublattices**
Carlos E. Fiore¹, Salete Pianegonda^{1,2}
¹Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, Brazil
²Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brazil
16. **Diagrama De Fases De Materiais Magnetocalóricos**
J. C. Rosa, B. H. Bernhard
UDESC, Joinville, Brasil
17. **Influence Of An Extra-Dimension On The Dynamics Of The Standard Map**
R.M. Da Silva, C. Manchein
UDESC, Joinville, Brazil
18. **Quimera Em Mapas Acoplados**
Moises Souza Santos¹, Jose Danilo Szezech Junior²
¹Programa de Pos Graduação em Ciências, UEPG, Ponta Grossa, Brasil
²UEPG, Ponta Grossa, Brasil
19. **Correlações Quânticas Em Sistemas De Dois Qbits: Dinâmica Sob Acoplamento Com Banho Térmico**
A. C. S. Costa, R. M. Ângelo, M. W. Beims
UFPR

Física da Matéria Condensada

20. Spectroscopic Properties Of Pr³⁺ Doped And Pr³⁺/Yb³⁺ Codoped Tellurite-Tungstate Glasses

M. P. Belançon^{1,2}, J. D. Marconi^{2,3}, L. C. Barbosa²

¹UTFPR, Pato Branco, Brazil

²UNICAMP, Campinas, Brazil

³UFABC, Santo André, Brazil

21. Colloidal Nanoparticle Green Synthesis Via Laser Ablation

A. G. Bezerra Jr.¹, F. R Henrique², V. S. Oliveira², N. Mattoso², I. L. Graff², W. H. Schreiner²

¹UTFPR, Curitiba, Brazil

²UFPR, Curitiba, Brazil

22. Preparation Of Polymeric Nanostructures In Porous Anodic Alumina Template

F. N. Cidade¹, L. S. Roman², A. G. Macedo¹

¹Departamento de Física, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Curitiba, Paraná, Brasil

²Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, Paraná, Brasil

23. van Hemmen Model Study With Cluster

D. S. Dalcol, C. F. Silva, F. M. Zimmer

UFSM, Santa Maria, Brazil

24. Identificação De Íons Mangânes Em Vidros Aluminosilicato De Cálcio Dopados Com MnO₂

A. Gonçalves¹, A. Novatski¹, A. Somer¹, R. L. S. Piazzetta¹, J. L. Gomes Jr.¹, G. K. Cruz¹, F. Astrath², F. Sato², A. M. Neto², M. L. Baesso²

¹UEPG, Ponta Grossa, Brazil

²UEM, Maringá, Brazil

25. Modification Of PEDOT:PSS Anode Buffer Layer With HFA For Flexible Polymer Solar Cells

L. F. Lima¹, N. A. D. Yamamoto¹, R. E. Perdomo², V. L. Calil^{3,4}, R. Valaski³, A. G. Macedo^{1,5}, M. Cremona^{3,4}, Lucimara S. Roman¹

¹Laboratory of NanoStructured Devices (DiNE), Department of Physics, Federal University of Parana, Curitiba, Parana, Brazil

²Engineering and Materials Science (PIPE), University Federal of Parana, Curitiba, Brazil

³Instituto Nacional de Metrologia, Qualidade Industrial e Tecnologia INMETRO, Duque de Caxias, Rio de Janeiro, Brazil

⁴Departament of Physics, Pontifical Catholic University of Rio de Janeiro, PUC-Rio, Rio de Janeiro, RJ, Brazil

⁵Department of Physics, Technological Federal University of Parana, Curitiba, Parana, Brazil

26. The Correlation Between Magnetic Irreversibility And Zero Resistance Temperatures Of Y_{1-X}Ca_XBa₂Cu₃O_{7-δ} (X = 0.01 And 0.1) Single Crystals

D.G.Macedo¹, V.N.Vieira¹, F.T.Dias¹, D.L. Da Silva¹, P.Pureur², J.Shaf²

¹Instituto de Física e Matemática, UFPEL, Pelotas, Brazil

²Instituto de Física, UFRGS, Porto Alegre, Brazil

27. Study Of Polyaniline/Carbon Nanotubes Composite, Electrical Properties And Application In Field Effect Transistors

L. C. Mariano¹, R. V. Salvatierra², A. J. G. Zarbin², L. S. Roman^{1,3}

¹Programa de Pós Graduação em Engenharia e Ciência dos Materiais (PIPE), UFPR, Curitiba-PR

²Departamento de Química, UFPR, Curitiba-PR

³Departamento de Física, UFPR, Curitiba-PR

28. Simulation Of Electronic Structures Of Transition Metal Oxides

H. P. Martins, E. B. Guedes, R. J. O. Mossanek, M. Abbate
UFPR, Curitiba, Brazil

29. **The Role Of The Chemical Disorder On The Condensation Kinetic Energy Density Of The $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ Single Crystal**
 A. P. A. Mendonça^{1,2}, V. N. Vieira², R. F. Lopes^{2,3}, F. T. Dias², P. Pureur³
¹UFPR, Curitiba, Brazil
²UFPel, Pelotas, Brazil
³UFRGS, Porto Alegre, Brazil
30. **Síntese E Estudo Das Propriedades Ferróicas Do Sistema $(\text{Bi}_{1-x}\text{Nd}_x)(\text{Fe}_{1-y}\text{Co}_y)\text{O}_3$**
 A. J. Mincache, D. Montanher, I. A. Santos, L. F. Cótica
 UEM, MARINGÁ, BRAZIL
31. **Propriedades Termodinâmicas De Um Modelo Falicov-Kimball**
 G. Peruzzo, A. C. Lausmann, E. J. Calegari
 UFSM, Santa Maria, Brasil
32. **Hydrostatic Pressure Sensors Based On Carbon Spheres Dispersed Using Hexadecyltrimethylammonium Bromide In A Poly(Vinyl)Alcohol Matrix**
 R. Rodrigues, I. A. Hummelgen
 UFPR, Curitiba, Brazil
33. **Propriedades Dielétricas E Magnéticas Da Cerâmica AlFeO_3 Sintetizada Via Moagem De Altas Energias**
 G. M. Santos, G. S. Dias, D. M. Silva, I. A. Santos, L. F. Cótica
 UEM, Maringá, Brasil
34. **Dependência Da Carga Ôhmica No Efeito Magnetoelétrico Extrínseco Em Cerâmicas Ferromagnéticas**
 D. M. Silva, D. Z. Montanher, I. A. Santos, L. F. Cótica, J. R. D. Pereira
 UEM, Maringá, Brasil
35. **Método De Auto-Verificação Do Valor Do Parâmetro Difusividade Térmica Medido Pela Técnica OPC**
 A. Somer, A. Gonçalves, A. Novatski, F. Camilotti, G. F. Costa, J. L. Gomes Jr., R. L. S.Piazzetta, C. Bonardi, G. K. Cruz
 UEPG, Ponta Grossa, Brasil
36. **Efeitos Do Crescimento De Óxido De Titânio Por Tratamento De Oxidação Térmico Sobre A Difusividade Térmica Em Amostras De Ti, TiG2 E TiG5**
 A. Somer, A. Novatski, A. Gonçalves, F. Camilotti, G. F. Costa, A. Assman, J. L. Gomes Jr., R. L. Piazzetta, G. B. Souza, O. M. Cintho, C. Bonardi, G. K. Cruz
 UEPG, Ponta Grossa, Brasil
37. **Flexible Photovoltaic Devices Based On Printed Polymer Nanoparticles Dispersed On Aqueous Media**
 Natasha A. D. Yamamoto^{1,2}, Lucimara S. Roman¹, Ana C. Arias²
¹Physics Department, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, Brazil
²Electrical Engineering and Computer Sciences, University of California Berkeley, Berkeley, United States of America
- Outras Áreas**
38. **Estudo Da Faixa Dinâmica Em Redes Neuronais Excitáveis**
 F. S. Borges, E. L. Lameu, A. M. Batista
 UEPG, Ponta Grossa, Brasil
39. **Representative Elementary Volume (REV) For Soil Porosity Measurements Through X-Ray Computed Tomography**
 J. A. R. Borges¹, L. F. Pires¹, S. Passoni¹, F. A. M. Cassaro¹, R. J. Heck²
¹UEPG, Ponta Grossa, Brazil
²University of Guelph, Guelph, Canada

40. Representative Length Intervals Of Samples To Measure The Soil Mass Attenuation Coefficient
J.A.R. Borges, L.F. Pires, J.C. Costa
UEPG, Ponta Grossa, Brazil
41. Statistical Analysis Applied To GVHD: Pathways And Genes Expression
F R Brondani¹, E M Simão^{1,2}, E G Góes¹
¹Instituto de Matemática, Estatística e Física, Universidade Federal do Rio Grande, Rio Grande, RS, Brasil
²Programa de Pós Graduação em Nanociências - Centro Universitário Franciscano (UNIFRA), Santa Maria, RS, Brasil
42. Analysis Of The Effectiveness Of Control Schemes In Neuronal Bursting Synchronization
F.F.Carvalho, R.L.Viana, C.A.S.Batista
UFPR, Curitiba, Brazil
43. Uma Proposta Didática Sobre A Experiencia De Millikan
O. Cossi Jr, A. C. Mello, Y. Takahashi, Sam Adam, J. A. Lenz, A. G. Bezerra-Jr
UTFPR, Curitiba, Brazil
44. Is The Nocturnal Atmospheric Boundary Layer Chaotic?
F. D. Costa¹, A. C. Acevedo²
¹UNIPAMPA - Campus Alegrete, Alegrete, Brazil
²UFSM, Santa Maria, Brazil
45. Equivalência Dinâmica Entre Modelos Neurais Em Neurociência
Fabiano A. S. Ferrari, Ricardo L. Viana
UFPR, Curitiba, Brazil
46. Definition Of Representative Areas For Measurement Of Soil Bulk Density Of Samples Collected In Volumetric Rings By Using 2d Tomographic Images
T. R. Ferreira, L. F. Pires
UEPG, Ponta Grossa, Brazil
47. Sincronização Em Redes Neurais Com Acoplamentos Elétricos E Químicos
E. L. Lameu¹, F. S. Borges¹, A. M. Batista¹, J. D. Szezech Jr.¹, R. L. Viana²
¹UEPG, Ponta Grossa, Brasil
²UFPR, Curitiba, Brasil
48. Radiation Dose From Breast Imaging Studies: Determination Of The Absorbed Dose By Thyroid By Using Monte Carlo-Penelope
M. Leidens¹, P. Nicolluci², E. G. Goes¹
¹Instituto de Matematica, Estatistica e Fisica, Universidade Federal do Rio Grande, Rio Grande, RS, Brazil
²Departamento de Fisica, Universidade de Sao Paulo, Ribeirao Preto, SP, Brazil
49. One-Dimensional Chemical Coupling For Rulkov Neurons
R. L. Viana, I. T. Martynetz
UFPR, Curitiba, Brazil
50. Study Of Structural Changes In Paracoccidioides Brasiliensis Infected Lung Tissue By FTIR Photoacoustic Spectroscopy
G.R. Morais,F. Sato, M.L. Baesso, A. N. Medina, E. M. Morato, L. Hernandes, T. I. E. Svidzinski
UEM,Maringá, Brazil
51. X-Ray Microtomography As A Tool To Characterize The Soil Macropore Distribution
S.Passoni, L.F. Pires, J.A.R. Borges, R.J. Heck
UEPG, Ponta Grossa, Brasil

52. **Network Of Networks With Modified Hodgkin-Huxley Equations**
T. L. Prado, S. R. Lopes
UFPR, Curitiba, Brazil.
53. **Análises Mineralógicas E Elementar Das Frações Granulométricas De Horizontes De Solos Coesos Por Técnicas Espectroscópicas, Difração De Raios X E Método De Rietveld**
L.V. Pradel, S.C. Saab, A.M. Brinatti, N.F.B. Giarola
UEPG, Ponta Grossa, Brasil.
54. **A Análise De Redes Sociais Na Literatura**
M.A.Ribeiro¹, S.E.S.Pinto^{1,2}
¹UEPG, Ponta Grossa, Brasil
²ICSMB, Aberdeen, Scotland
55. **Sobre O Complexo E A Incomplexidade Da Cama Limite Noturna**
Santos, D. O.
IFAM, Manaus, Brasil.
56. **Aplicação Da Espectroscopia De Lente Térmica Para A Avaliação Da Fotoestabilidade De Óleos Vegetais**
E. L. Savi¹, N.G.C. Astrath¹, M. L. Baesso¹, L. C. Malacarne¹, P. T. Matumoto-Pintro¹, C. P. Croge²
¹UEM, Maringá, Brazil
²UFPR, Curitiba, Brazil

SEGUNDA-FEIRA 25/10 - TARDE

PALESTRA 4 - 13h30

Prof. Dr. Nilson Marcos Dias Garcia

Departamento Acadêmico de Física – Universidade Tecnológica Federal do Paraná

Os Livros Didáticos e a Formação de Professores de Física

Tem como objetivo analisar a presença de temas relativos à escolha e uso de livros didáticos nos cursos de formação de professores de Física. Apoiando-se em aspectos históricos, inicialmente será feita uma análise da influência exercida pelos manuais franceses e americanos, assim como pelo vestibular, sobre os diversos projetos e livros nacionais produzidos na segunda metade do século XX. Será também analisado como, com a LDB 9394/96 e os PCN, a produção, escolha e uso dos livros têm sido estruturados pelo PNLD (Programa Nacional do Livro Didático). Finalizando, serão abordados alguns aspectos do PNLD 2009, 2012 e 2015, buscando estabelecer relações entre os livros didáticos, as pesquisas em ensino de Física e a formação de professores.

PALESTRA 5 - 14h

Prof. Dr. Gilberto Medeiros Kremer

Departamento de Física – Universidade Federal do Paraná

Aspectos Históricos da Teoria Cinética dos Gases: do Atomismo à Equação de Boltzmann

Neste colóquio é apresentada a evolução das idéias relativas à teoria cinética dos gases. Parte-se do conceito de átomo dos filósofos gregos e discute-se a evolução da teoria cinética desde os seus primórdios como uma teoria elementar fundamentada no conceito de livre caminho médio, até a sua forma rigorosa e que se baseia na equação integro-diferencial de Boltzmann. Discutem-se também os paradoxos da reversibilidade de Loschmidt e da recorrência de Poincaré-Zermelo.

COMUNICAÇÕES ORAIS 1 - 14h30

14h30 - Marcos Cardoso Rodriguez - Universidade Federal do Rio Grande

Produção de Quarks Exóticos em Alguns Modelos Supersimétricos

M. C. Rodriguez

FURG, Rio Grande, Brasil

14h45 – Mário Luiz Lopes Silva – Universidade Federal de Pelotas

Probing the Color Glass Condensate at Forward Rapidities and Very Low Transverse Momenta in pp Collisions

M. L. L. Da Silva, V. P. Gonçalves

UFPel, Pelotas, Brazil

15h00 - Renato Moreira Angelo - Universidade Federal do Paraná

Wave-particle Duality: an Informational View

R. M. Angelo, A. D. Ribeiro

UFPR, Curitiba, Brazil

15h15 - Romeu Miqueias Szmoski - Universidade Tecnológica Federal do Paraná

Análise da Estabilidade de uma Rede de Energia Regida pelo Modelo de Kuramoto

L. V. G. Fachini, R. M. Szmoski

UTFPR, Ponta Grossa, Brasil

COMUNICAÇÕES ORAIS 2 - 16h

16h00 – Aluizio Torres da Silva - UNIPAR

Solutions for a Fractional Fokker-Planck Equation

A. T. Silva¹, E. K. Lenzi², L. R. Evangelista²

¹UNIPAR, Umuarama, Brasil

²UEM, Maringá, Brasil

16h15 – Arlan Ferreira - Universidade Federal de Pelotas

Diffusion of Ionic Particles in a Matrix of Disordered Obstacles

Arlan S.F., Alexandre Diehl

Instituto de Física e Matemática (IFM), UFPel, Pelotas, Brasil

16h30 - Ben Hur Bernhard - Universidade do Estado de Santa Catarina

Descrição Microscópica de Materiais Magnéticos

B. H. Bernhard

UDESC, Joinville, Brasil

16h45 - Rafael Bordin - Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Physical Approach for Vascular Endothelial Growth Modeling

M. Soares¹, A. Diehl¹, R. Travasso²

¹UFPel, Pelotas, Brazil

²Universidade de Coimbra, Coimbra, Portugal

SESSÃO DE PÔSTERES 2 - 17h

Astronomia/Cosmologia

1. A Correlação Entre Dispersões De Velocidades Do [Fe II] Usando Espectroscopia De Campo Integral
Marina Bianchin, Rogemar André Riffel
UFSM, Santa Maria, Brasil
2. Symmetry Energy And The Strangeness Content Of A Neutron Star
R. Cavagnoli¹, C. Providência², D. P. Menezes³
¹UFPEL, Pelotas, Brasil
²Universidade de Coimbra, Coimbra, Portugal
³UFSC, Florianópolis, Brasil
3. Gás De Chaplygin Obtido Espontaneamente De Ação Generalizada Através Da Simetria De Noether.
L. G. Collodel, G. M. Kremer
UFPR, Curitiba, Brazil
4. Evolução Morfológica De Galáxias
Couro, J.P, Ferrri, F
FURG, Rio Grande, RS

Física das Partículas Elementares e Campos

5. Probing The Color Glass Condensate At Forward Rapidities And Very Low Transverse Momenta In pp Collisions
M. L. L. Da Silva, V. P. Gonçalves
UFPel, Pelotas, Brazil

Física dos Fluidos, Plasmas e Descargas Elétricas

6. Propriedades Anômalas Em Um Modelo Puramente Repulsivo
A. A. Bertolazzo, M. C. Barbosa
UFRGS, Porto Alegre, Brazil
7. Efeitos Transversais Não Paraxiais Na Propagação De Pulses Eletromagnéticos Não Lineares Em Plasmas
Alexandre Bonatto^{1,2}, Roger Pizzato Nunes², Cristian Bonatto³, Renato Pakter², Sergio Roberto Lopes¹, Felipe Barbedo Rizzato²
¹UFPR, Curitiba, Brasil
²UFRGS, Porto Alegre, Brasil
³UFPel, Pelotas, Brasil
8. Sincronização Caótica No Oscilador Colpitts
R. C. Bonetti¹, A. M. Batista²
¹Pós-Graduação em Ciências, UEPG, Ponta Grossa, Brazil
²UEPG, Ponta Grossa, Brazil
9. Movimento De Deriva No Plasma De Fusão
R.S. Oyarzabal, J.D. Szezech Jr, A.M.Batista
UEPG, Ponta Grossa, Brazil

10. **Teoria De Turbulência Fraca Para Feixes De Alta Intensidade**
 K. Pascoal¹, J. Pavan¹, R. Gaelzer²
¹UFPel, Pelotas, Brazil
²UFRGS, Porto Alegre, Brazil
11. **Pseudo-Molecular Approach For The Elastic Constants Of Nematic Liquid Crystals Interacting Via Anisotropic Dispersion Forces**
 P. S. Simonario¹, F. C. M. Freire¹, L. R. Evangelista¹, R. Teixeira De Souza²
¹UEM, Maringá-PR, Brazil
²UTFPR, Apucarana-PR, Brazil
12. **Numerical Simulation Of Rarefied Gas Flow Through A Thin Orifice Based On The *Ab Initio* Potential**
 J.L.Strapasson, F.Sharipov
 UFPR, Curitiba, Brazil
13. **Aerotermodinâmica De Veículos Espaciais Na Reentrada Atmosférica**
 J.L.Strapasson, F.Sharipov
 UFPR, Curitiba, Brazil

Física da Matéria Condensada

14. **Soil Clay Fraction Analyzed By Atomic Force Microscopy**
 N.M.P. Dias, S.C. Saab, A.M. Brinatti, L.F. Pires
¹UEPG, Ponta Grossa, Brazil
15. **Production Of Ultra-Small Si-Based Nanoparticles By Pulsed Laser Ablation In Acetone**
 G. L. Plautz¹, V. Silva De Oliveira², W. H. Schreiner¹, A. G. Bezerra Jr.³, I. L. Graff¹
¹Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, Brazil
²Programa de Pos-Graduação em Engenharia e Ciência dos Materiais (PIPE), Universidade Federal do Paraná, Curitiba, Brazil
³Departamento Acadêmico de Física, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Curitiba, Brazil
16. **Síntese E Caracterização De Soluções Sólidas De BiFeO₃-PbTiO₃ Via Moagem Em Altas Energias E Micro-Moagem**
 O. A. Protzek, V. F. Feitas, D. Z Montanher, I. A. Santos
 Universidade Estadual de Maringá
17. **Estudo De Propriedades Estruturais, Energéticas E Eletrônicas De Nanotubos BC₈N**
 E. Ribas¹, M. Machado¹, S. Azevedo²
¹UFPel, Pelotas, Brazil
²UFPB, Paraíba, Brazil
18. **Estudo Das Propriedades Estruturais, Energéticas E Eletrônicas De Nanotubos BC₆N**
 R. C. Rodrigues, M. Machado
 UFPEL, Pelotas, Brazil
19. **Anomalous Diffusion And Electrical Response Of Ionic Solutions**
 E. K. Lenzi, P. R. G. Fernandes, T. Petrucci, H. Mukai, H. V. Ribeiro, M. K. Lenzi, G. Gonçalves
 UEM, Maringá, Brazil
20. **Production Of Bismuth Nanoparticles With Laser Ablation**
 R. G. T. Rosa¹, C. A. Duarte¹, W. H. Schreiner¹, A. G. Bezerra Jr.²
¹UFPR, Curitiba, Brazil
²UTFPR, Curitiba, Brazil

21. **Thermal-Optical Characterization Of DLC Films And Connection With Their Possible Application**
D. T. Dias¹, A. Ferreira Da Silva², V. J. Trava-Airol³
¹UTFPR, Ponta Grossa, Brazil
²UFBA, Salvador, Brazil
³INPE, São José dos Campos, Brazil
22. **Investigações Dielétricas No Compósito PVDF/Ba_{0,3}Na_{0,7}Ti_{0,3}Nb_{0,7}O₃**
J.M.Rosso, V.F.Freitas, T.G.Bonadio, I.A.Santos
UEM, Maringá, Brazil
23. **Método Alternativo Para Preparação De Vidros Aluminosilicato De Cálcio Com Concentração De Sílica Entre 7 E 30% Preparados Em Vácuo**
M. Sandrini, J. R. M. Viana, R. F. Muniz, J. H. Rohling, A. C. Bento, M. L. Baesso, A. N. Medina
UEM, Maringá, Brazil
24. **Distribution Of Conjugated Segments For A Polymer Melt In A Cubic Lattice Model**
J. A. Santos, J. A. Freire
UFPR, Curitiba, Brazil
25. **Uso De Camada De Estanho Como Uma Grade No Eletrodo Intermediário Em Transistor Orgânico De Efeito De Campo Em Arquitetura Vertical**
K. F. Seidel¹, L. Rossi² E I. A. Hümmelgen³
¹UTFPR, Ponta Grossa, Brasil
²UTFPR, Curitiba, Brasil
³UFPR, Curitiba, Brasil
26. **Antiferromagnetismo Através Do Método De Monte Carlo Aplicado Ao Modelo De Ising**
Diego Luan Ferreira Da Silva, Mateus Schmidt, Fábio Mallmann Zimmer
UFSM, Santa Maria, Brazil
27. **Structural And Optical Properties Of Cerium Oxide (CeO₂) Thin Films Produced By Spray And Drop Casting Techniques**
T. G. Silva, C. C. Baganha, E. Ribeiro, K. D. Machado, N. Mattoso, E. Silveira
UFPR, Curitiba, Brazil
28. **Propriedades Dieléctricas De Cerâmicas Multiferróicas De TbMnO₃**
L. G. D. Silveira¹, G. S. Dias¹, L. F. Cótica¹, J. A. Eiras², D. Garcia², J. A. Sampaio³, F. Yokaichiya⁴, I. A. Santos¹
¹UEM, Maringá, Brasil
²UFSCAR, São Carlos, Brasil
³UENF, Campos dos Goytacazes, Brasil
⁴IPEN, São Paulo, Brasil
29. **Optoelectronic And Electrical Properties Of GaSe₉ Thin Films**
M. C. Siqueira¹, J. P. M. Serbena¹, K. D. Machado¹, G. B. De Souza², C. G. G. De Azevedo³, J. H. D. Da Silva³
¹Universidade Federal do Paraná, Curitiba, PR, Brazil
²Universidade Estadual de Ponta Grossa, Ponta Grossa, PR, Brazil
³Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, Bauru, SP, Brazil
30. **Preparação E Caracterização Estrutural De Nanopartículas De Prata Em Um Vidro Sódio-Borato**
M. F. De Souza, G. Kellermann
Departamento de Física, UFPR, Curitiba, Brazil
31. **Análise Teórico Da Adsorção De Moléculas Sobre Nanofitas De Carbono**
C. Souza, M. Koehler
UFPR, Curitiba, Brasil

32. Improvement In The Performance Of Organic Field Effect Transistor By Using A Poly(3,4-Ethylenedioxythiophene):Poly(Styrenesulfonate) Layer
A. C. B. Tavares, Isidro Cruz-Cruz, I. A. Hümmelegen
UFPR, Curitiba, Brazil
33. Polarization Energy Of A Benzene Dimer
R. Tromer, J. Freire
UFPR, Curitiba, Brazil
34. Influência Da Composição No Estado De Valência Dos Íons Eu Incorporado Ao Vidro Aluminosilicato De Cálcio
J. R. M. Viana, A. M. Farias, M. Sandrinis, J. H. Rohlings, A. C. Bentos, M. L. Baessos, A. N. Medinas
UEM, Maringá, Brazil
35. Estudo Teórico De Impureza Substitucional De Eu Em Bulk De PbSe E PbTe
Sandro Silva Da Cunha, Rogério Baierle
UFSM, Santa Maria, Brasil
36. Oxidação De Nanofios De InP: Um Estudo De Primeiros Princípios
Me. Mailung Berwanger¹, Dr. Paulo Cesar Piquini¹, Dra. Cláudia Lange Dos Santos²
¹UFSM, Santa Maria, Brasil
²UNIFRA, Santa Maria, Brasil
37. Kinetic Energy Density Induced By High Magnetic Fields In Bi-2212 Single-Crystal
Moises Leonardi De Almeida¹, Paulo Pureur¹, Fabio Teixeira Dias², Valdemar Das Neves Vieira²
¹UFRGS, Porto Alegre, Brazil
²UFPel, Pelotas, Brazil

Ensino de Física

38. O Uso Da História em Quadrinhos como Fator de Motivação, Participação e Contextualização em Aulas de Física Para o Ensino Médio
C. Aguiar, E. Suckow, P. Oliveira
UTFPR, Curitiba, Brazil
39. O Pêndulo Simples Como Agente Integrador Utilizando A História Da Ciência
D. De A. F. Kugler, G. M. Campanini, A. L. De Lara
UTFPR, Curitiba, Brasil
40. A Utilização de Super-Heróis como Recurso Pedagógico no Ensino de Física.
F. A. Fernandes¹, S. B. Soltau²
¹Colégio CRA, Alfenas, Brazil
²UNIFAL-MG, Alfenas, Brazil
41. Física: Da Universidade à Comunidade
L. A. B. Bernardes, A. J. Camargo, S. L. R. Da Silva, L. A. Pereira, P. C. Facin
UEPG, Ponta Grossa, Brasil
42. Educação em Física e Educação Para o Trânsito: Uma Redação Possível na Busca da Formação Para a Cidadania
H. Battazza, L. Londero
UNIFAL, Alfenas, Brazil
43. Novas Linguagens na Prática Pedagógica do Ensino da Física Escolar: Nos Paradidáticos
T. Rodrigues
PUCPR, Curitiba, Brazil

44. **Espaços Não Formais: Oficina de Astronomia para Alunos Superdotados**
A. Honorato, M. W. Da Silva, R. F. Santos, A. E. De A. Pinto, M. A. Florczak
UTFPR, Curitiba, Brasil
45. **Ensino De Física, Desenvolvimento Tecnológico E História Da Humanidade: Uma Abordagem CTSA no Ensino Médio**
M. L. C. Linhares, L. E. Maria, L. Bueno, A. E. A. Pinto, J. A. P. Alves
UTFPR, Curitiba, Brasil
46. **A Evolução De Um Manual Didático De Física: Um Estudo Avaliativo**
A. C. Mello, N. M. D. Garcia
UTFPR, Curitiba, Brazil
47. **Utilização Do Software Tracker Para Enriquecer Aulas De Física Do 1º Ano Do Ensino Médio**
F. A. Oliveira
UTFPR, Curitiba, Brazil
48. **O Ensino De Física Para Alunos da Zona Rural**
L. G. Pascoaloto, S. B. Soltau
UNIFAL - MG, Alfenas - MG, Brazil
49. **Blog Objetos De Aprendizagem, Recursos Digitais E Virtuais Para O Ensino De Ciências da Natureza**
S. L. R. Da Silva, J. Da S. Gaudêncio, P. S. G. Biégas
UEPG, Ponta Grossa, PR, Brazil
50. **Atividades Experimentais Sobre Unidades e Medidas de Grandezas Aplicadas ao Ensino De Física**
A. L. O. Santos¹, H. M. Carriel¹, L. T. Nascimento¹, M. O. A. Silva¹, L. M. H. Leonardi¹, J. Rosa¹
¹IFPR, Paranaguá, Brazil
²CEPS, Paranaguá, Brazil
51. **Novas Linguagens Na Prática Pedagógica Do Ensino Da Física Escolar: Nos Simuladores**
E. Scafí
PUCPR, Curitiba, Brazil
52. **Interdisciplinaridade Na Prática: Desenvolvimento de uma Ilha de Racionalidade**
Josiane Carvalho Da Silva, Thalita Rodrigues Ribeiro, Ligia Esteves Maria, Angela Emilia De Almeida Pinto, Noemi Sutil
UTFPR, Curitiba, Brazil
53. **O PIBID e o Trabalho Desenvolvido Pelos Licenciandos em Física Do IFPR No Litoral Do Paraná**
K. V. F. Dias Da Silva¹, F. M. Plinta¹, L. M. H. Leonardi^{1,2}, J. Rosa¹
¹IFPR, Paranaguá, Brazil
²CEPS, Paranaguá, Brazil
54. **Medindo O Planeta Terra: Um Experimento Interdisciplinar**
J. F. Silva, S. B. Soltau
UNIFAL-MG, Alfenas, Brasil
55. **Ensino De Física Moderna: Uma Proposta Metodológica Para O Ensino Medio Integrando Diferentes Áreas do Saber**
J. F. T. Vissotto¹, C. D. Canestraro²
¹UFPR, Curitiba, Brazil
²PUCPR, Curitiba, Brazil
56. **Como os Alunos do Ensino Medio Obtém Informações Sobre Ciência**
A. L. M. Zanelatto, F. M. Santos, M. R. Lima, I. Kovalski, A. E. A. Pinto
UTFPR, Curitiba, Brazil

MESA REDONDA - 18h: Mulheres na Ciência**TERÇA-FEIRA 26/10 - MANHÃ****PLENÁRIA 2 - 8h****Prof. Dr. Denis Boyer**

Departamento de Sistemas Complejos - Instituto de Física - Universidad Nacional Autónoma de México

Symmetry breaking in biological systems

Symmetry breaking is an important concept in physics as it represents a mechanism by which many systems are forced to evolve, order and self-organize. In nonlinear dynamical systems, symmetry breaking gives rise to a variety of structures such as attractors and limit cycles. We present how these ideas can be applied to understand the dynamics and structure of some biological systems. We shall discuss, among other examples, pattern formation in systems composed of many elements, typically cells. In some biological networks, the number of attractors can be very large and the study of their dynamics becomes challenging. We will discuss the biological functions that such complexity can confer to these systems.

PALESTRA 6 - 9h**Prof^a. Dr^a. Marcia C. Barbosa**

Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Água Confinada: novos desafios

Na maioria dos materiais a diminuição da temperatura implica aumento monótonico na densidade. Este não é o caso da água que apresenta a 4°C um máximo na densidade. Além disso, observa-se um aumento não esperado na compressibilidade entre 0.1 MPa e 190 MPa e, a pressão atmosférica um aumento no calor específico a pressão constante. Não somente a termodinâmica, mas igualmente a dinâmica da água é pouco usual. O coeficiente de difusão da água tem um máximo a 4°C e 1.5 atm, enquanto que para líquidos usuais a difusão aumenta com a diminuição de pressão. Neste seminário propomos que as anomalias da água podem ser explicadas por um potencial de duas escalas. Mostramos que esta hipótese pode ser comprovada em potenciais efetivos que reproduzem as anomalias da água. Aplicamos este potencial de duas escalas a sistemas confinados, mostrando que o superfluxo da água confinada pode ser explicado através da competição entre as duas distâncias.

PALESTRA 7 - 10h**Prof. Dr. Eduardo Di Mauro**

Departamento de Física – Universidade Estadual de Londrina

A Ressonância Paramagnética Eletrônica (EPR) e suas aplicações

Será apresentado um resumo da técnica e suas aplicações em pesquisas realizadas nos últimos anos, e também em estudos que se encontram em fase de desenvolvimento. Entre os sistemas que serão tratados, destacam-se aqueles realizados com petróleo e seus derivados, polímeros, solos, minerais e vegetais, além de sistemas cristalinos.

PALESTRA 8 - 10h30**Prof. Dr. Antonio Carlos Bento**

Laboratório de Espectroscopia Fotoacústica e Fototérmica - Departamento de Física - Universidade Estadual de Maringá

Técnicas Fotoacústicas e Fototérmicas Aplicadas ao Estudo de Materiais: Estudos Espectroscópicos e Propriedades Térmicas de Vidros, Polímeros e Materiais Compósitos Biocompatíveis

A aplicação de métodos fotoacústicos e fototérmicos para o estudo de materiais foi introduzida no Brasil em meados de 1977 a partir de estudos em materiais semicondutores. Desde então, estes métodos vêm sendo continuamente desenvolvidos e difundidos em vários centros de pesquisa brasileiros, sendo principalmente aplicados em estudos espectroscópicos e de caracterização térmica. Nesta apresentação revisitaremos algumas aplicações desenvolvidas em nosso grupo, GEFF-UEM-DFI, em que um espectro de possibilidades pode localizar o grau de especialização dessas técnicas. Dentre elas: **TRANSIÇÃO DE FASE EM MAGNETOCALÓRICOS**: geração térmica via campo magnético e estudo do efeito do tamanho de partícula na transição Tc de ligas Gd-Si-Ge e Gd-puro, uma otimização de célula magnetoacústica e sua aplicação para o estudo de partículas Gd-Si-Ge entre 25 e $106\mu\text{m}$. Outra possibilidade de estudo é avaliar o **PERFIL DE PENETRAÇÃO DE SUBSTÂNCIAS EM MATERIAIS BIOCOMPATÍVEIS**: estudo de liberação de progesterona em blendas PHB/PCL e determinação do ciclo estral em vacas. Estudo da penetração e interação de peróxidos nas camadas de esmalte-dentina em procedimentos de clareamento dental e estudo comparativo com terapia fotodinâmica para determinar potencial uso de fotosensitzadores no tratamento de cárie dental com proposição de modelo quantitativo para dosagem de luz dentro da dentina. Ainda, caracterização de **PROPRIEDADES TÉRMICAS DE BIOMATERIAIS**: estudo de compósitos em pó de HAp+Nb₂O₅ com proposição de modelo para medida de propriedade térmica efetiva em composição binária e estudos de cimento endodôntico com base em cimento de portland (CER-cemento endodôntico rápido) de tempo de cura otimizado em que o efeito de tamanho de partícula e composição de fase líquida foram testadas e suas propriedades termofísicas medidas. Como mais comum aplicação tem-se a espectroscopia com estudo de **FOTOLUMINESCÊNCIA DE BLENDAS E VIDROS**: Estudos de Luminescência em diversas blendas e vidros dopados com terras raras serão apresentados, como de blendas PC PMMA+Eu ou Tb e em filmes de ZnO/PET. Além de estudos de vidros dopados com terras raras, Eu e Ce, candidatos para o desenvolvimento de dispositivos tipo “smart lighting” para controle de ciclo de emissão de luz branca. A maioria desses trabalhos está atualmente em desenvolvimento em nosso grupo, e muitos já estão publicados.

SESSÃO DE PÔSTERES 3 - 11h

Física Geral

1. **Model For The Resistance Force Acting On Circular Bodies In The Imminence Of Rolling**
A. L. O. Bilobran, R. M. Angelo
UFPR, Curitiba, Brazil
2. **Distinct Dynamical And Structural Properties Of A Core-Softened Fluid When Confined Between Fluctuating And Fixed Walls**
L. B. Krott, J. R. Bordin
UFRGS, Porto Alegre, Brazil
3. **Partícula Clássica Na Dinâmica De Nosé-Hoover**
G. Bortolini, E. P. M. Amorim
UDESC, Joinville, Brazil
4. **Three Level System In The Integrable Maxwell Bloch Lattices**
A. S. M De Castro¹, A. Lima-Santos²
¹UEPG, Ponta Grossa, Brazil
²UFSCar, São Carlos, Brazil
5. **Mapa Quântico Para Sistemas Quicados**
M. S. Custódio¹, W. Strunz², M. W. Beims¹
¹UFPR, Curitiba, Brasil
²Technische Universität Dresden, Dresden, Germany
6. **Método Numérico Alternativo Para Problemas De Autovalores**
C. A. Duarte
DFIS, UFPR, Curitiba, Brazil
7. **Método De Monte Carlo Aplicado A Uma Rede Fractal Vicsek Tridimensional**
T. S. Farias¹, M. Schmidt¹, F. M. Zimmer¹, J. Maziero²

¹UFSM, Santa Maria, Brasil

²UNIPAMPA, Bagé, Brasil

8. Sistema Embarcado Para Aquisição E Processamento De Dados De Interrogadores Ópticos Detecção De Picos De Redes De Bragg
F. J. A. Baptista, F. C. Janzen, C. Martelli, J. R. Galvao
UTFPR, Ponta Grossa, Brazil
9. Bifurcation Structures And Transient Chaos In A Four-Dimensional Chua Model
A. Hoffs, D. T. Da Silva, C. Manchein, H. A. Albuquerque
UDESC, Joinville, Brazil
10. Propriedades Do Mapa Padrão Na Transição Do Estado Conservativo Para O Dissipativo.
C. A. C. Jusseph^{1,2}, M. W. Beims¹
¹UFPR, Curitiba, Brazil
²UEPG, Medianeira, Brazil
11. Formação De Ecótonos Em Sistemas Com 3 Competidores
K. Kramer, M. G. E. Da Luz
UFPR, Curitiba, Brasil
12. Properties Of Phase Space Of Sticky Islands
T. Kruger, P. Galuzio, S. Lopes
UFPR, Curitiba, Brazil
13. Diagrama De Fases Do Modelo De Anderson Periódico
D. Mello, B. H. Bernhard
UDESC, Joinville, Brazil
14. Método De Criptografia Baseado Em Sistemas Caóticos Espacialmente Estendidos
R. M. Szmoski¹, S. E. De S. Pinto²
¹UTFPR, Ponta Grossa, Brasil
²UEPG, Ponta Grossa, Brasil
15. Unveiling And Exemplifying The Unitary Equivalence Of Discrete Time Quantum Walk Models
B. F. Venancio¹, F. M. Andrade², M. G. E. Luz¹
¹UFPR, Curitiba, Brazil
²UEPG, Ponta Grossa, Brazil
16. Motifs Em Redes Literárias
M. A. S. Viana¹, S. E. S. Pinto^{1,2}, R. F. Pereira³
¹UEPG, Ponta Grossa, Brazil
²ICSMB, Aberdeen, Scotland
³UTFPR, Ponta Grossa, Brazil
17. O Efeito Da Fragmentação Na Diminuição Das Taxas De Encontro Na Busca Aleatória
M. E. Wosniack¹, M. C. Santos¹, E. P. Raposo², G. M. Viswanathan^{3,4}, M. G. E. Da Luz¹.
¹UFPR, Curitiba, Brazil
²UFPE, Recife, Brazil
³UFRN, Natal, Brazil
⁴UFAL, Maceio, Brazil

Física Atômica e Molecular

18. Algoritmo Genético Acoplado A Um Índice Topológico Para Eliminação De Redundâncias E Aceleração Do Processo De Busca De Mínimos Em Aglomerados Moleculares
R. N. L. Baldez, A. A. Schmidt, P. C. Piquini
UFSM, Santa Maria, Brasil

19. **Colisões De Elétrons De Baixa Energia Com Piridina**
A. S. Barbosa, D. F. Pastega, M. H. F. Bettega
Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná
20. **Espalhamento Elástico De Elétrons Por 1,4-Dioxano**
A. S. Barbosa, M. H. F. Bettega
Departamento de Física - Universidade Federal do Paraná
21. **Espalhamento Elástico De Elétrons Por Moléculas De CF_3Cl , CF_2Cl_2 E CFCl_3**
T. C. Freitas, A. R. Lopes, M. H. F. Bettega
UFPR, Curitiba, Brasil
22. **Anomalias Dinâmicas E Termodinâmicas Em Um Modelo De Dímeros**
C. Gavazzoni, M. C. Barbosa, P. A. Netz
UFRGS, Porto Alegre, Brazil
23. **Método Téorico Computacional Para O Estudo De Transferência Eletrônica E De Energia Em Sistemas Moleculares**
D. A. Hoff, L. G. C. Rego, R. Da Silva
UFSC, Florianópolis, Brazil
24. **Waterlike Anomalies Of A Core-Softened Fluid Under Confinement**
L. B. Krott, M. C. Barbosa
UFRGS, Porto Alegre, Brazil
25. **Espalhamento De Pósitrons Por Moléculas De $\text{CH}_x\text{F}_{4-x}$ ($x=0, 1, 2, 3, 4$)**
E. Lange, M. H. F. Bettega, S. d'A. Sanchez
UFPR, Curitiba, Brazil
26. **Electron Collisions With 1-Butene And 2-Methylpropene Molecules**
A. R. Lopes, T. C. Freitas, M. H. F. Bettega
UFPR, Curitiba, Brasil
27. **Espalhamento De Elétrons Por Moléculas De CCl_4 , SiF_4 E GeF_4**
G. M. Moreira, A. S. Barbosa, M. H. F. Bettega
Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná
28. **Aprisionamento de Elétrons em Bases do DNA**
F. B . Nunes¹, M. T. Do N. Varella², D. F. Pastega¹, T. C. De Freitas¹, M. H. F. Bettega¹, S. d'A. Sanchez¹
¹ Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná
² Instituto de Física, Universidade de São Paulo
29. **Identificação De Povidona Em Comprimidos De Paracetamol Por Espectroscopia Fotoacústica**
R. L. S. Piazzetta¹, A. Somer¹, J. G. Camilotti¹, A. Gonçalves¹, C. Bonardi¹, G. K. Cruz¹, F. L. Beltrame¹, A. N. Medina², F. Sato², N. G. C. Astrath², A. Novatski¹
¹ UEPG, Ponta Grossa
² UEM, Maringá
30. **Sistemas Quânticos Unidimensionais: Laboratórios Para O Desenvolvimento Da Teoria Do Funcional Da Densidade**
M. B. P. Querne, D. Vieira
UDESC, Joinville, Brazil

Física da Matéria Condensada

- 31. A Model For Charge Transport In A Nano-Porous Network**
 G. A. Emidio, J. A. O. Freire
 UFPR, Curitiba, Brazil
- 32. Caracterização Espectroscópica Do Sistema $\text{TeO}_2\text{-Li}_2\text{O-BaO}$**
 R. L. S. Piazzetta, A. Assmann, A. Gonçalves, G. K. Cruz, F. C. Serbena, A. Novatski
 UEPG, Ponta Grossa, Brasil
- 33. Quantum Mechanical Modeling Of Excited Electronic States And Their Relationship To Cathodo-luminescence Of BaZrO_3**
 M. L. Moreira¹, R. U. Fassbender¹, T. Lilge¹, J. Andres², E Longo³
¹INCTMN, Physical and Mathematics Institute (IFM), Universidade Federal de Pelotas
²Departament de Química, Física i Analítica Universitat Jaume I
³INCTMN, Department of Physical Chemistry, Chemistry Institute, Unesp
- 34. O Papel Da Desordem Energética Na Dissociação De Portadores De Carga**
 J. A. Govatski
 UFPR, Curitiba, Brazil
- 35. Polarização Intramolecular E Separação De Carga De Carga Em Estruturas Fotossintéticas Artificiais**
 B. C. Hames, K. T. Mazon, L. G. C. Rego
 UFSC, Florianopolis, Brazil
- 36. Estudo De Irreversibilidades Magnéticas No Supercondutor Granular $\text{YBa}_2\text{Cu}_{2.985}\text{Fe}_{0.015}\text{O}_{7-\delta}$**
 L. S. Berchon¹, M. L. Hneda¹, J. L. Pimentel Jr.², P. Pureur¹
¹UFRGS, Porto Alegre, Brazil
²UFRGS, Rio Grande, Brazil
- 37. Uso De Geometrias Pm3 Na Determinação Da Estrutura Eletrônica DFT E TD-DFT De Derivados De PPV Contendo Grupos Nitrila (CN)**
 A. Camilo-Jr, J. R. Garcia, F. S. Dos Santos, K. C. C. W. Dos S. Klider, D. L. Bertuzzi
 UEPG, Ponta Grossa, Brasil
- 38. Identificação Das Fases Rutílio E Anatásio Em Filmes De TiO_2 Por Espectroscopia Raman**
 J. L. Gomes Jr., A. Novatski, A. Somer, A. Gonçalves, F. Camilotti, G. F. Costa, A. Assmann, G. B. Souza, O. M. Cintho, C. Bonardi, G. K. Cruz
 UEPG, Ponta Grossa, Brasil
- 39. Caracterização das Propriedades Mecânicas e Estruturais do Aço Superaustenítico ASTM A 744gr. CN3MN em Relação aos Aços Microligados (Nb-Mo) E AISI 304**
 F. C. Nascimento, W. R. Oliveira, J. Kublitski
 UEPG, Ponta Grossa, Brazil
- 40. Protocols For Morphological Control Of Magnetite Nanoparticles And Image Processing For Recognize Its Shapes**
 V. M. Lenart¹, S. L. Gomez¹, M. P. Calatayud², G. F. Goya²
¹UEPG, Ponta Grossa, Brazil
²UNIZAR/INA, Zaragoza, Spain
- 41. Gaussian And Critical Fluctuations In The Electrical Conductivity Of $\text{Y}_{0.99}\text{Ca}_{0.01}\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ And $\text{YBa}_{1.98}\text{Sr}_{0.02}\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ Single Crystals**
 L. F. Lopes¹, V. N. Vieira¹, F. T. Dias¹, D. L. Da Silva¹, P. Pureur², J. Schaf²
¹UFPel, Pelotas, Brazil
²UFRGS, Porto Alegre, Brazil

42. **Condutividade Térmica Do Bulk E De Nanofios De Silício Usando O Método De Müller-Plathe**
G. A. S. Lorenset, L. B. Da Silva
UFSM, Santa Maria, Brasil
43. **The Influence Of The Intra-Chain Charge Transfer On The Performance Of Organic Photovoltaic Devices Using Fluorene-Oligothiophene Copolymers As Active Layer**
C. F. N. Marchiori¹, A. G. Macedo², I. R. Grova¹, M. Koehler¹, L. S. Roman¹, L. Akcelrud¹
¹Universidade Federal do Paraná, Curitiba, Brazil
²Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Curitiba, Brazil
44. **Produção De Nanopartículas Metálicas Por Ablação A Laser Para Aplicações Em Inativação Fotodinâmica Na Odontologia**
T. W. Martins, C. C. Nass Sebrão, V. S. De Oliveira, I. L. Graff, P. H. C. França, V. P. Ditzel Westphalen, A. G. Bezerra Jr
UTFPR, Curitiba, Brasil
UFPR, Curitiba, Brasil
PUCPR, Curitiba, Brasil
Univille, Joinville, Brasil
45. **Análise De Dureza Vickers E Difração De Raio-X De Pedras Semipreciosas**
L. F. Y. Moletta, F. C. N. Borges
UEPG, Ponta Grossa, Paraná
46. **Morphology Study Of Organic Solar Cells Built With Fullerene And PSIF-DBT**
N. E. Monteiro¹, A. G. Macedo², C. F. N. Marchiori¹, L. S. Roman¹
¹Universidade Federal do Paraná, Departamento de Física, PR, Brazil
²Universidade Tecnologica Federal do Parana, PR, Brazil
47. **Produção De Quantum Dots De ZnS Via Ablação A Laser Em Meio Líquido**
R. Moos, V. S. De Oliveira, A. G. Bezerra Jr, W. H. Schreiner
UFPR, Curitiba, Brazil
48. **Dualidades Entre Teorias Na Rede: Os Modelos Z_n**
A. F. Morais, P. Teotonio-Sobrinho
USP, São Paulo, Brazil
49. **Produção E Caracterização De Ligas Fe-Ni-Co-Ti-Mo: Composição De Aço Maraging**
G. C. S. Nunes, V. Biondo, P. W. C. Sarvezuk, A. Paesano Jr.
UEM, Maringá, Brazil
50. **Caracterizações Estrutural E Magnética De Filmes Finos De Fega Crescidos Sobre Substratos De ZnSe/GaAs(001)**
R. C. Oliveira
UFPR, Curitiba, Brasil
51. **Síntese E Caracterização Do Supercondutor $Y_3Ba_5Cu_8O_{18}$**
C. P. De Oliveira¹, F. T. Dias¹, V. N. Vieira¹, D. L. Da Silva¹, P. Pureur², J. Schaf²
¹UFPEL, Pelotas, Brasil
²UFRGS, Porto Alegre, Brasil
52. **Molhabilidade De Filmes De Carbono Amorfo Hidrogenado: Modificação Induzida Por UV**
M. J. Particheli¹, J. M. Pureza¹, R. A. S. Zanon¹, J. F. Fragalli¹, M. M. Lacerda², K. C. G. Höfelmann¹
¹UDESC, Joinville, Brasil
²UFRJ, Xerém, Brasil
53. **Estudo Da Transição De Fase De Primeira Ordem No NiTi Utilizando Técnicas Fototérmicas**
R. R. Pezarini, H. S. Bernabe, F. Sato, L. C. Malacarne, N. G. C. Astrath, J. H. Rohling, A. N. Medina
UEM, Maringá, Brazil

TERÇA-FEIRA 26/10 - TARDE

PALESTRA 9 - 13h30

Prof. Dr. André Avelino Pasa

Departamento de Física – Universidade Federal de Santa Catarina

Eletrodeposição de Materiais para Geração e Armazenamento de Energia

Neste trabalho será apresentada uma breve revisão da técnica de eletrodeposição (deposição eletroquímica) e exemplos desta técnica para o crescimento de filmes finos de ligas metálicas, de semicondutores e de compósitos. Estes materiais são adequados para serem utilizados em dispositivos para geração de energia. Filmes de ligas de constantan serão aplicados em geradores termoelétricos de energia. Nestes geradores, um gradiente de temperatura gera em termopares de Cu/constantan, fabricados usando técnicas de microeletrônica, uma voltagem elétrica devida ao efeito Seebeck. Já os filmes do semicondutor óxido de cobre (Cu_2O), foram crescidos para serem utilizados em células solares e em fotocatodos para geração de H_2 . E, finalmente, compósitos de polianilina com óxido de grafeno foram depositados por eletroquímica e testados como supercapacitores para armazenamento de energia.

PALESTRA 10 - 14h

Prof. Dr. Oscar N. Mesquita

Departamento de Física – Universidade Federal de Minas Gerais

Optical Tweezers and Defocusing Microscopy to study DNA-ligand interactions and mechanical properties of red blood cells

In the first part of the talk, I will present our results on single-molecule DNA stretching experiments using Optical Tweezers. From the experiments we obtain the persistence and contour lengths of the DNA molecule. When DNA interacts with cationic cyclodextrin (CD), the persistence length of the complex formed changes nonmonotonically: for smaller concentrations of CD the persistence length decreases and then increases as the CD concentration increases further. We propose a two-sites quenched disorder statistical model, which fits the data very well and returns the local changes in persistence length, chemical affinity and cooperativity of DNA-CD reaction. Our model also fits well the literature data for the HU-DNA interaction. In the second part of the talk, I will present “Defocusing Microscopy”, a simple bright-field optical microscopy technique developed by us, which allows actual 3D imaging of transparent objects (phase objects). I will show our results for red blood cells (RBC) both for isotonic and hypotonic concentrations, where the image of the lower RBC membrane deformed due to adhesion to the glass substrate, can clearly be distinguished from the image of the upper membrane. In addition, by studying contrast fluctuations of the images we can obtain the elastic constants along each RBC membrane.

COMUNICAÇÕES ORAIS 3 - 14h30

14h30 - Cristian Bonatto - Universidade Federal de Pelotas

Complex Dynamics of Vertical-Cavity Surface-Emitting Lasers

C. Bonatto¹, M. L. Moreira¹, A. Bonatto^{2,3}

¹UFPel, Pelotas, Brazil

²UFRGS, Porto Alegre, Brazil

³UFPR, Curitiba, Brazil

14h45 - Antonio Sérgio M. de Castro - Universidade Estadual de Ponta Grossa

Effects of damping in the photon detection channel on the dynamical Casimir effect

A.S.M de Castro¹, R.A.N. Siqueira¹, V.V. Dodonov²

¹UEPG, Ponta Grossa, Brazil

²UNB, Brasília, Brazil

15h00 - Ricardo A. de Simone Zanon - Universidade do Estado de Santa Catarina

Estudo do efeito da dessorção atômica induzida por luz na dinâmica de carga de uma armadilha magneto-óptica de Rb

I. M. Campestrini¹, F. Arretche², R. A. De S. Zanon¹

¹UDESC, Joinville, Brasil

²UFSC, Florianópolis, Brasil

15h15 – Alessandra de Souza Barbosa - Universidade Federal do Paraná

Espalhamento de elétrons de baixa energia por halopirimidinas

A. S. Barbosa, M. H. F. Bettega

Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná

COMUNICAÇÕES ORAIS 4 - 16h

16h00 – Fábio Luiz Melquiades - Unicentro

Differentiation of land-use types in a small catchment using EDXRF data and multivariate analysis

F.L. Melquiades¹, L.F.S. Andreoni², E.L. Thomaz²

¹Departamento de Física, UNICENTRO, Guarapuava, Brazil

²Departamento de Geografia, UNICENTRO, Guarapuava, Brazil

16h15 – Diogo Zampieri Montanher - Universidade Estadual de Maringá

Magnetostrição sintonizável por frequência em Ni_{48.8}Mn_{31.4}Ga_{19.8}

D. Z. Montanher, O. A. Protzek, J. R. D. Pereira, L. F. Cótica, I. A. Santos

Universidade Estadual de Maringá, Maringá, Brasil

16h30 – Andrea Gerniski Macedo - Universidade Tecnológica Federal do Paraná

Bilayer and bulk heterojunction solar cells with functional poly(2,2'-bithiophene) films electrochemically deposited from aqueous emulsion

Andreia G. Macedo¹, Daniel C. Silva^{1,2}, Natasha A.D. Yamamoto², Liliana Micaroni², Regina M.Q. Mello², Lucimara S. Roman²

¹UTFPR, Curitiba, Brazil

²UFPR, Curitiba, Brazil

16h45 – Luiz Américo Alves Pereira - Universidade Estadual de Ponta Grossa

Superconducting electronics devices based on Superconductor - constriction - Superconductor (ScS) Junctions

L. A. A. Pereira, Pedro R. Junior, Alcione R. Jurelo

¹UEPG, Ponta Grossa, Brazil

SESSÃO DE PÔSTERES 4 - 17h

Áreas Clássicas de Fenomenologia e Outras Aplicações

1. Effect Of The Sintering Temperature In The Properties Of The Biocomposite Niobium Pentoxide-Hydroxyapatite

T.G.M. Bonadio, J.A. Da Cruz, W.M. Lima, A.N. Medina, M.L. Baesso, W.R. Weinand
UEM, Maringá, Brazil

2. Utilização Da Espectroscopia Fotoacústica Para A Determinação Da Taxa De Difusão De Fotossensibilizadores Na Dentina
L. Castro, J. Nagata, F. Sato, R. Terada, M. Fujimaki, M. Baesso
UEM, Maringá, Brasil
3. Radiant Heat Exchange Mediated By Gaseous Atmosphere
C. A. Duarte
UFPR, Curitiba, Brasil
4. A Thermocouple Vacuum Gauge For Low Vacuum Measurement
C. A. Duarte
DFIS, UFPR, Curitiba, Brasil
5. Nonlinear Optical Properties Of The E7 Thermotropic Liquid Crystal At The N-I Phase Transition
V.M Lenart¹, I.H. Bechtold², R.F. Turchiello³, A.M. Figueiredo Neto⁴, And S.L. Gomez¹
¹UEPG, Ponta Grossa, Brazil
²UFSC, Florianópolis, Brazil
³UTFPR, Ponta Grossa, Brazil
⁴USP, São Paulo, Brazil
6. Study Of Optical Properties Of Gold Agglomerates In Liquid Crystal System
V.M. Lenart, S.L. Gomez
UEPG, Ponta Grossa, Brazil
7. Scaling Law And Anti-Persistent Motion Of Annihilating Defects In A Lyotropic Liquid Crystal
R. R. Guimarães^{1,2,3}, H. V. Ribeiro^{1,2}, H. Mukai^{1,3}, P. R. G. Fernandes^{1,3}, R. T. De Souza⁴ Ervin K. Lenzi,^{1,2} Renio S. Mendes^{1,2}
¹UEM, Maringá, Brazil
²INCT-SC, Rio de Janeiro, Brazil
³INCT-FCx, São Paulo, Brazil
⁴UTFPR, Pato Branco, Brazil
8. Técnica De Espelho Térmico Utilizando Excitação Pulsada Em Materiais Com Baixa Absorção Óptica
G. V. B. Lukasievicz¹, N. G. C. Astrath¹, L. S. Herculano¹, V. S. Zanuto¹, S. E. Bialkowski², L. C. Malacarne¹
¹UEM, Maringá, Brazil
²USU, Logan, USA
9. A General Model For Laser-Induced Wavefront Distortion In Optical Materials
L. C. Malacarne, N. G. C. Astrath
UEM, Maringá, Brazil
10. Study Of The Thermal Diffusivity For Biocompatible Precursors For Various Concentrations Of Niobium Pentoxide Mixed With Hydroxyapatite
V. V. G. Mariucci, J. A. Da Cruz, T. G. M. Bonadio, A. N. Medina, M. L. Baesso, A. C. Bento
Universidade Estadual de Maringá
11. Photosensitizer And Light Diffusion Through Dentin In Photodynamic Therapy
A. C. Nogueira, A. X. Graciano, J. Y. Nagata, M. Fujimaki, R. S. S. Terada, A. C. Bento, N. G. C. Astrath, M. L. Baesso
UEM, Maringá, Brazil
12. Thermal Wave Interferometry Applied To The Study Of Thermal Effusivity Of Thermal Grease Via Sensitivity Thicknesses And Excitation Source Monochromatics And Polychromatic
A.M. Picolloto, V.A.Mariucci, A.N.Medina , M.L.Baesso, A.C.Bento
UEM, Maringá, Brazil

13. Considerações Sobre O Timbre Do Violino
B. S. R. Santos, T. C. Freitas
UFPR, Curitiba, Brazil
14. Aplicação Da Técnica De Lente Térmica No Estudo De Soluções Aquosas Do Corante Eosina Y Em Função Da Temperatura
L. S. Herculano, N. G. C. Astrath, L. C. Malacarne, V. S. Zanuto, G. V. B. Lucazievcz, O. A. Capeloto
Universidade Estadual de Maringá, Maringá, Brazil

Física das Partículas Elementares e Campos

15. Fotoprodução De Quarks Pesados Em Interações Coerentes No LHC
Y. L. Avila, V. P. Goncalves, W. K. Sauter
Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas
16. Um Estudo Sobre A Existência De Partículas Supersimétricas De Vida Longa Em Raios Cósmicos
V.M. Becker, L.F. Mackedanz
FURG, Rio Grande, Brazil
17. Would Be The Photon A Composed Particle? Quantization Of Field Fluxes In Electromagnetic Radiation
C. A. Duarte
DFIS, UFPR, Curitiba, Brasil
18. Quantum Double Models From A Spacetime Perspective
M. J. B. Ferreira, P. Padmanabhan, P. Teotonio-Sobrinho
USP, São Paulo, Brazil
19. Implementação De Detector De Múons Para Estudo Da Incidência De Partículas Enérgicas Em Santa Maria – RS E Região
B. Konrad¹, E. Lüdke¹, A. G. R. Adornes¹, A. M. Vieira¹, C. O. Graça¹, R. B. Adornes²
¹UFSM, Santa Maria, Brazil
²IFF, Júlio de Castilhos, Brazil
20. CP Violated Nn Interaction And Delta Ressonances
R. Lauken, C. M. Maekawa
FURG, Rio Grande, Brazil
21. Produção De Charginos E Neutralinos Dentro Do MSSM Com Diferentes Cenários Snowmass Points And Slopes (SPS)
F. K. Nobrega, M.C. Rodriguez
FURG, Rio Grande, Brasil
22. Deformed Quantum Double Models From Deformed Spacetime Invariants
M. J. B. Ferreira, P. Padmanabhan, P. Teotonio-Sobrinho
IF-USP, São Paulo, Brazil
23. Saturation Effects In The Deeply Virtual Compton Scattering At High Energies
D. Spiering, V. P. Goncalves
Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas
24. Funções Espessura E Sobreposição Nuclear Em Colisões Pb-Pb Ultrarelativísticas No LHC
A. Quadros, C. Mariotto
FURG, Rio Grande, Brazil
25. Probing The Color Glass Condensate At Forward Rapidities And Very Low Transverse Momenta In pp Collisions
M. L. L. Da Silva, V. P. Gonçalves
UFPel, Pelotas, Brazil

Física da Matéria Condensada

26. Fluctuation-Dissipation Relation For Kicked Environments

S. A. Abdulack^{1,2}, W. Strunz², M. W. Beims^{1,3}

¹Universidade Federal do Paraná, Curitiba, Brazil

²Technische Universität Dresden, Dresden, Germany

³Max Planck Institut for the Physics of Complex Systems, Dresden, Germany

27. Metodologias Para Aquisição De Imagens Da Matéria Orgânica Do Solo Por AFM

R. Ales, S. Da C. Saab, N. M. P. Dias

UEPG, Ponta Grossa, Brasil

28. Estudo Das Propriedades Espectroscópicas De Tecidos Dentários Sob Diferentes Condições De Estocagem

D. D. Almagro, F. Sato, R. C. Pascotto

UEM, Maringá, Brazil

29. Caracterização De Dispositivos Fotovoltaicos Orgânicos Construído Com O Co-Polímero Contendo Unidades De Fluoreno E 2,1,3-Benzotiadiazol

M.J.Bassi¹, N.A.D.Yamamoto¹, J.R.Cordeiro², J.Gruber², L.S Roman¹

¹Departamento de Física - Setor de Ciências Exatas - Universidade Federal do Paraná

²Departamento de Química Fundamental - Instituto de Química - Universidade de São Paulo

30. Relação Entre O Campo Elétrico Ótico Na Interface Polímero/Fulereno E A Eficiência De Dispositivos Fotovoltaicos De Bicamada

Leandro Benatto, Marlus Koehler

UFPR, Curitiba, Brasil

31. Assinatura Óptica Da Modulação De Composição No Desenvolvimento De Amostras Contendo Pontos Quânticos Autoformados

B. H. B. Santos¹, E. Ribeiro¹, K. D. Machado¹, J. R. R. Bortoleto², M. A. Cotta³

¹Universidade Federal do Paraná, Curitiba, Brazil

²Universidade Estadual Paulista, Sorocaba, Brazil

³Instituto de Física Gleb Wataghin; Universidade Estadual de Campinas, Campinas, Brazil

32. Comportamento Magnético Do Supercondutor YBaCuO Texturizado

T. Azevedo Braga, F. Teixeira Dias, D. Lagie Da Silva, V. Das Neves Vieira;

UFPel, Pelotas, Brasil

33. Espectroscopia De Espelho Térmico Com Excitação Pulsada

O.A. Capeloto, G.V.B. Lukasievicz, L.C. Malacarne, N.G.C. Astrath

UEM, Maringá, Brazil

34. Método Da Máxima Entropia Aplicado A Solução De Problemas Cristalográficos.

I. B. Catellani, L. F. Cótica, I. A. Santos, V. F. Freitas

UEM, Maringá, Brasil

35. Organic Field Effect Transistors (OFETS) With P3HT - Poly(3hexylthiophene) And Zinc Oxide (ZnO) Nanoparticles

C. De Col, W.S. Machado, I. A. Hummelgen

UFPR, Curitiba, Brazil

36. Crescimento E Caracterização De Filmes Finos Da Liga MnGa Sobre Substrato De Si(100) Através Da Técnica De Epitaxia Por Feixe Molecular (MBE)

C. Cruz, I. T. Neckel, D. H. Mosca, W. H. Schreiner, J. Varalda

UFPR, Curitiba, Brasil

37. **O Laboratório De Óptica E Optoeletrônica Do Depto. De Física-UEL**
J. L. Duarte, F. Franchello, L. Wouk, E. Laureto, I. F. L. Dias
UEL, Londrina, Brazil
38. **Nanocomposites Of Carbon Nanotube And Polyaniline Applied As Gas Sensor Device**
Marcelo Eising¹, Rodrigo V. Salvatierra¹, Aldo J. G. Zarbin¹, Carlos Eduardo Cava², Lucimara S. Roman¹
¹UFPR, Curitiba, Brasil
²UTFPR, Londrina, Brasil
39. **Crescimento De Cristais Cintiladores Nano E Meso Estruturados De BaZrO₃ Via Micro-Ondas**
R.U. Fassbender¹, M.L. Moreira², T. Lilge³, S. Tebcherane⁴
¹UFPel, Pelotas, Brazil
²UFSCar, São Carlos, Brazil
³UEPG, Ponta Grossa, Brazil
40. **Propagation Modes Immune To Dissipation In One-Dimensional Spatially Periodic Array Of Localized Dissipations**
S. C. Fernandez, V. S. Shchesnovich
UFABC, São Paulo, Brazil
41. **Simplified Calculation Of The DOS And The Magnetoresistance In 2DES**
C. A. Duarte
DFIS, UFPR, Curitiba, Brasil
42. **Fractional Quantum Hall Effect In Second Subband Of A 2DES**
C. A. Duarte¹, L. E. G. Armas², E. C. F. Silva², G. M. Gusev², A. K. Bakarov³, S. R. Wiedmann⁴, J.-C. Portal⁵
¹DFIS, UFPR, Curitiba, Brasil
²USP, S. Paulo, Brasil
³Inst. Semic. Phys., Novosibirsk, Russia
⁴HFML, Nijmegen, Netherlands
⁵GHMFL-CNRS, Grenoble; INSA, Toulouse; IUF, Toulouse - France
43. **Magnetoresistance In Alas Quantum Wells Under Tilted Magnetic Field**
C. A. Duarte¹, G. M. Gusev², A. K. Bakarov³, J.-C. Portal⁴
¹DFIS, UFPR, Curitiba, Brazil
²USP, S. Paulo, Brazil
³Inst. Semic. Phys., Novosibirsk, Russia
⁴GHMFL-CNRS, Grenoble; INSA, Toulouse; IUF, Toulouse - France
44. **Development Of Micro Controlled Irradiation Systems Based On Light-Emitting Diodes (LED) Arrays For Use In Light-Mediated Therapies**
R.C. Evangelista¹, D.D.A. Carneiro¹, F.C. Janzen¹, A.G. Bezerra-Junior², S.L. Stevan-Junior¹, R.F.T. Gomez¹
¹UTFPR - Campus Ponta Grossa
²UTFPR - Campus Curitiba
45. **Tribo-Mechanical Characterization Of Titanium Modified By Ion Nitriding For Bone Implants**
G.B. De Souza, B.A. Da Silva, G. Steudel, S.H. Gonsalves, C.E. Foerster And C.M. Lepienski
46. **Teoria Do Funcional Da Densidade Aplicada A Sistemas Quânticos Unidimensionais**
M. E. Bento, D. Vieira
Universidade do Estado de Santa Catarina - UDESC, Joinville, Brasil

ENCERRAMENTO - 18h

LIVRO DE RESUMOS

COMUNICAÇÕES ORAIS 1

Produção de Quarks Exóticos em Alguns Modelos Supersimétricos

M. C. Rodriguez

FURG, Rio Grande, Brasil

Neste seminário nos iremos mostrar que existe uma classe de duas extensões supersimétricas de alguns modelos com grupo de gauge aumentados em relação ao grupo de gauge do modelo padrão que eles possuem quarks exóticos (cargas distintas das usuais), além de algumas outras partículas interessantes não existentes na versão supersimétrica mínima. Mostraremos os mecanismos de produção destes quarks através de colisão próton próton que temos dois mecanismos distintos para sua produção. Ao final mostraremos que o LHC pode detectar estes quarks quer realmente eles existam na natureza.

Probing the Color Glass Condensate at Forward Rapidities and Very Low Transverse Momenta in pp Collisions

M. L. L. da Silva, V. P. Gonçalves

UFPel, Pelotas, Brazil.

The description of the hadron production at very forward rapidities and low transverse momentum is usually made using phenomenological models based on nonperturbative physics. However, at high energies and large rapidities the wave function of one of the projectiles is probed at very small Bjorken x , being characterized by a large number of gluons. In this kinematical regime, a new state of matter - the Color Glass Condensate (CGC) - is expected to be formed. One of the main characteristics of such system is the presence of a new dynamical momentum scale, the saturation scale Q_s , which can assume values very larger than the QCD confinement scale Λ_{QCD} and give the scale of the running coupling constant. In this paper we assume that in particular kinematical region probed by LHC forward (LHCf) experiment the saturation scale can be considered the hard momentum scale present in the process and calculate the forward neutral pion production at very low- p_T using a perturbative approach. We demonstrate that the CGC formalism is able to successfully describe the LHCf data, which can be considered as a compelling indication of the presence of non-linear QCD effects at LHC energies.

Wave-particle Duality: an Informational View

R. M. Angelo, A. D. Ribeiro

UFPR, Curitiba, Brazil

Recently, Bohr's complementarity principle was assessed in setups involving delayed choices. These works argued in favor of a reformulation of the aforementioned principle so as to account for situations in which a quantum system would behave simultaneously as wave and particle. Here we defend a framework that, supported by well-known experimental results and consistent with the decoherence program, allows us to interpret complementarity in terms of correlations of the system with an informer. Our proposal offers formal definition and operational interpretation for the dual behavior both in terms of nonlocal resources and the couple work-information. Moreover, our results invite us to reconsider the current status of the complementarity principle.

Análise da Estabilidade de uma Rede de Energia Regida pelo Modelo de Kuramoto

L. V. G. Fachini, R. M. Szmoski

UTFPR, Ponta Grossa, Brasil

Analisamos a estabilidade do subespaço de sincronização de uma rede de energia cuja dinâmica é regida por osciladores caóticos. A estrutura da rede foi obtida a partir do mapa geoelétrico do Estado do Paraná e o modelo de Kuramoto foi utilizado como dinâmica local da rede. A escolha do modelo deve-se à sua correspondência com

a equações que descrevem a potência transmitida e dissipada em uma rede de energia, onde a sincronizabilidade é uma condição fundamental para que que não ocorram blecautes. Encontramos os parâmetros de acoplamento a partir dos quais os elementos da rede sincronizam e, então, perturbamos alguns nós aleatoriamente na rede para investigar como a perturbação se propaga. Também realizamos ataques direcionados em pontos estratégicos da rede e comparamos a dimensão desses blecautes com aqueles desencadeados por ataques aleatórios. Verificamos que a dimensão dos ataques está relacionada tanto com o grau como com a centralidade do nó na rede. Enfim, propomos uma rede com conexões variáveis no tempo como um modelo de rede inteligente e mais estável.

COMUNICAÇÕES ORAIS 2

Solutions for a Fractional Fokker-Planck Equation

A. T. Silva¹, E. K. Lenzi², L. R. Evangelista²

¹UNIPAR, Umuarama, Brazil

²UEM, Maringá, Brazil

After the pioneer work of the botanic Robert Brown about the thermal motion of small particles and explanation proposed by Albert Einstein, this phenomena has been widely investigated in several fields of science. Depending on the nature of the stochastic process connected to the phenomena in analysis the characteristics manifested can be Markovian or non-Markovian. The first scenario has a linear time dependence for the mean square displacement, i.e., $\langle(x - \langle x \rangle)^2\rangle \sim t$, and the second one presents a different time behavior for this quantity, e.g., $\langle(x - \langle x \rangle)^2\rangle \sim t^\eta$, ($\eta < 1$ and $\eta > 1$ correspond to sub and superdiffusion, respectively), as a result, for example, of memory effects, long-range correlations, long-range interactions, or surface effects, present in the systems which play an important role on the dynamics of particles of the system and lead us to an anomalous diffusion. Several approaches such as fractional diffusion equations, nonlinear diffusion equations, generalized master equations, random walks, and generalized Langevin equations have been used to investigate these physical situations. Here, in connection with this scenario, we investigate the following fractional diffusion equation

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial}{\partial x} \rho(x, t) \right) - \frac{\partial}{\partial x} [F(x) \rho(x, t)] \quad (1)$$

With $D(x) = D|x|^{-\eta}$, the external force given by $F(x, t) = -kx + \frac{K}{x}|x|^{-\eta}$ and subjected to the boundary condition $\rho(\pm\infty, t) = 0$ with $\rho(x, 0)$ arbitrary.

[1] JOURNAL OF MATHEMATICAL PHYSICS 47, 073301 (2006).

[2] PRL 96,030601 (2006).

[3] PHYSICAL REVIEW A74, 044102 (2006).

Diffusion of Ionic Particles in a Matrix of Disordered Obstacles

A. S. Ferreira, A. Diehl

Instituto de Física e Matemática (IFM), Pelotas, Brasil.

Diffusion is one of the most fundamental processes by which material can move. It is important in biology, medicine, chemistry, materials science, engineering, physics, and in just about every aspect of our lives. Diffusion is a consequence of constant thermal motion of atoms and particles, resulting in a material moving from areas of high to low concentration. Using molecular dynamics, we investigate the diffusion of charged particles (ionic fluid) through a disordered media (or porous matrix of obstacles), driven by a chemical potential gradient. The porous media is simulated by a collection of fixed obstacles, composed of charged particles. The characteristic porosity of the porous matrix is attributed to the presence of the empty space between the obstacles, inside of which the ionic fluid diffuses, and plays an important role in the efficiency of diffusion. For instance, one of the effects of the obstacles is to impose a disorder in the conductive media. We investigate how the distribution of the obstacles (we have used a power law, gaussian and uniform distributions), as well as the presence of charged obstacles, affect the observed diffusion constant as well the Pair Distribution Function [$g(r)$] between particles-particles and particles-obstacles. Power law distribution, for instance, could lead to an anomalous diffusion (mean square displacement that is not proportional to the time), even with neutral obstacles. We have used Grand-Canonical Molecular Dynamics (GCMD) with the two Control Volumes (CVs), used to maintain

a fixed chemical potentials inside the two Cvs, in order to obtain the steady state quantities. We compare our results with previous experimental and theoretical results.

Descrição Microscópica de Materiais Magnéticos

B. H. Bernhard
UDESC, Joinville, Brazil

São analisados diferentes modelos microscópicos descrevendo uma rede com spins localizados e elétrons de condução, interagindo através de um termo de troca local J_K , um termo de troca J_H entre sítios vizinhos, da repulsão coulombiana U entre elétrons num mesmo sítio, e em presença de um campo magnético h . Alguns casos específicos são discutidos com base em artigos recentes e projetos de pesquisa em andamento, enfatizando a sua aplicabilidade a materiais magnéticos específicos. Na ref. [1], estudamos a competição entre a ordem magnética e o efeito Kondo na rede frustrada de Shastry-Sutherland. Foi utilizada uma aproximação de campo médio fermiônico, que introduz os parâmetros de ordem λ e γ que descrevem uma fase Kondo com correlações magnéticas de curto alcance. Obtivemos um diagrama de fases em boa concordância com observações experimentais recentes para alguns compostos de itérbio. Na ref. [2], consideramos um modelo com a mesma forma da rede de Kondo, mas com uma interação J_K ferromagnética, em presença de um campo magnético h . Os resultados obtidos levam a um diagrama de fases compatível com o diagrama observado para alguns materiais magnetocalóricos. Os resultados permitem descrever a evolução das curvas dos potenciais magnetocalóricos em presença de transições metamagnéticas.

- [1] B. H. Bernhard, B. Coqblin, C. Lacroix, Phys. Rev. B 83, 214427 (2011).
 - [2] D. Nascimento, B.H. Bernhard, Solid State Commun. 167, 40 (2013).
-

Distinct Dynamical and Structural Properties of a Core-Softened Fluid when Confined Between Fluctuating and Fixed Walls

L. B. Krott, J. R. Bordin
UFRGS, Porto Alegre, Brazil

Molecular dynamics simulations were used to study how the structural and dynamical properties of a water-like core-softened fluid under confinement behaves when the confining media is rigid or fluctuating. The fluid is modeled using a two-length scale potential, which reproduces in bulk the anomalous behavior observed in water. We perform simulations in the NVT ensemble with fixed flat walls and in the NpT ensemble using a fluctuating wall control of pressure to study how the fluid behavior is affected by fixed and non-fixed walls. Our results indicate that the fluid dynamical and structural properties are strongly affected by the wall mobility.

- [1] J. R. Bordin *et al*, J. Chem. Phys **137**, 084504 (2012).
- [2] J. R. Bordin, A. Diehl, and M. C. Barbosa, J. Phys. Chem. B **117**, 7047 (2013).
- [3] L. B. Krott and M. C. Barbosa, J. Chem. Phys. **138**, 084505 (2013).
- [4] L. B. Krott and J. R. Bordin, Submitted.

COMUNICAÇÕES ORAIS 3

Complex Dynamics of Vertical-Cavity Surface-Emitting Lasers

C. Bonatto¹, M. L. Moreira¹, A. Bonatto^{2,3}

¹UFPel, Pelotas, Brazil

²UFRGS, Porto Alegre, Brazil

³UFPR, Curitiba, Brazil

Conventional semiconductor lasers, i.e. edge-emitting lasers, show a rich and complex dynamics when subjected to modulation parameters or external disturbances, such as optical feedback or optical injection. However, when in free-running operation, such devices typically exhibit simple relaxation oscillations leading to a continuous-wave operation. The situation can be very different for the vertical-cavity surface-emitting lasers. For these

devices, the light polarization dynamics becomes relevant and should be taken into account. Then the usual modeling of these devices takes into account the light polarization dynamics, where additional nonlinearities, such as the coupling of the polarization states through carriers density, can lead to complicated dynamics, even for those devices in free-running operation. In this study, we report a detailed characterization of the dynamics of these devices in free-running operation and also the complex dynamics induced by external optical injection.

Effects of Damping in the Photon Detection Channel on the Dynamical Casimir Effect

A.S.M de Castro¹, R.A.N. Siqueira¹, V.V. Dodonov²

¹UEPG, Ponta Grossa, Brazil

²UNB, Brasília, Brazil

We consider effects of dissipation in the problem of photon creation from a vacuum inside an ideal cavity with vibrating walls in the resonance case. We take into account the interaction between the resonant field mode and a non ideal detector, modeled by a quantum damped harmonic oscillator connected with a thermal Markovian reservoir. The frequency of wall vibrations is taken to be twice the cavity normal frequency, modified due to the coupling with the detector only. The problem was treated, both analytically and numerically, in the framework of the standard master equation. We find the regimes (in the parameter space) of photon generation for the field and detector modes, which are supposed to be initially in general Gaussian states. We study numerically how the photon generation rate depends on the ratio of the modulation depth of the time-dependent cavity eigenfrequency to the coupling strength between the cavity mode and detector, as well as on the detector damping rate. We analyze how the presence of the damping affects the statistical properties of the quantum state in the detector (variances of the photon numbers, photon distribution function, and the degree of quadrature squeezing). Furthermore, we describe how losses act in time disturbing the photon counting precision, given the fact that the mean number of quanta in the detector mode increases with some time delay compared with the field mode.

Estudo do Efeito da Dessorção Atômica Induzida por Luz na Dinâmica de Carga de uma Armadilha Magneto-Óptica de Rb.

I. M. Campestrini¹, F. Arretche² e R. A. De S. Zanon¹

¹UDESC, Joinville, Brasil

²UFSC, Florianópolis, Brasil

O uso de armadilhas magneto-ópticas (MOT) na obtenção de amostras atômicas ultra frias, tem se tornado uma técnica de grande aplicação. Tais amostras, normalmente átomos neutros, têm sido extensivamente estudadas devido a sua larga aplicação no resfriamento e armadilhamento a laser; colisões frias; condensação de Bose-Einstein; espectroscopia de alta resolução, informação quântica, etc. Com o intuito de se aprimorar a eficiência destas armadilhas em se obter um grande número de átomos aprisionados e longos tempos de vida, a influência da luz de banda larga sobre os átomos aprisionados tem sido objeto de estudo do grupo. Tal influência se dá através do efeito de dessorção atômica induzida por luz, conhecido como LIAD. Este efeito foi observado pela primeira vez por Gozzini et al, em experimentos envolvendo o estudo de efeitos cinéticos da luz no vapor de sódio numa célula revestida de silano. A partir deste, diversos estudos teóricos e experimentais para adinâmica de LIAD vem sendo apresentados na literatura. Desta forma, o nosso objetivo consiste no estudo de um modelo de LIAD, baseado nos modelos propostos por Zang et al e Atutov et al, para a otimização do processos de o carregamento em uma armadilha magneto-óptica de Rubídio, e com isto, num segundo momento, poder modelar os dados experimentais por nós obtidos.

Espalhamento de Elétrons de Baixa Energia por Halopirimidinas

Alessandra de Souza Barbosa, Márcio Henrique Franco Bettega

Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná

Sabe-se que elétrons secundários de baixa energia podem causar quebra de simples e dupla fita do DNA através de um processo ressonante (quando o elétron é aprisionado temporariamente na região da molécula). Assim,

uma das motivações na área de espalhamento de elétrons por moléculas tem sido a caracterização adequada de ressonâncias em moléculas de relevância biológica. As halopirimidinas são empregadas na pesquisa biomédica há décadas. Sabe-se que a substituição da timidina no DNA por uma halopirimidina, sensibiliza a célula na radioterapia de tumores [Int. J. Rad. Onc. Biol. Phys. **10**, 1399 (1984)], aumentando o dano ao DNA. Neste trabalho apresentaremos seções de choque calculadas para o espalhamento elástico de elétrons de baixa energia pelas moléculas 2-cloropirimidina, 2-bromopirimidina e 5-bromopirimidina. Foi empregado o método multicanal de Schwinger [Phys. Rev. A **24**, 2473 (1981); Phys. Rev. A **30**, 1734 (1984)], implementado com pseudopotenciais [Phys. Rev. A **47**, 1111 (1993)] de Bachelet, Hamann e Schlüter [Phys. Rev. B **26**, 4199 (1982)]. Apresentaremos resultados obtidos nas aproximações estático-troca e estático-troca mais polarização para energias até 10 eV. Essas moléculas apresentam quatro ressonâncias de forma: três de natureza π^* localizadas no anel e uma da natureza σ^* , localizada na ligação C-halogênio. Nós compararemos nossos resultados com os resultados experimentais de Modelli e co-autores [J. Phys. Chem. A **115**, 10775 (2011)]. No geral há um bom acordo entre teoria e experimento. Os autores agradecem o suporte financeiro do CNPq, CAPES e Finep (CT-Infra), e computacional do Prof. Carlos de Carvalho do LFTC-DFis-UFPR e LCPAD-UFPR e do CENAPAD-SP.

COMUNICAÇÕES ORAIS 4

Differentiation of Land-use Types in a Small Catchment Using EDXRF Data and Multivariate analysis

F.L. Melquiades¹, L.F.S. Andreoni¹, E.L. Thomaz²

¹Departamento de Física, UNICENTRO, Guarapuava, Brazil

²Departamento de Geografia, UNICENTRO, Guarapuava, Brazil

The use of analytical techniques as energy dispersive X-ray fluorescence (PXRF) combined with statistical pattern recognition techniques can be offered as an adequate tool in order to obtain a feasible model that could permits the assessment of land use classification and soil sediment source. The objective of this study was to present a direct methodology, non destructive and without sample preparation to discriminate different land use types, employing energy dispersive X-ray fluorescence (EDXRF) and multivariate analysis. The methodology attempted to display the similarities of soil chemical compositions at different land use systems in a rural catchment. Principal component analysis (PCA) was used to evaluate the data. It were measured samples from planting of Nicotiana tabacum and Ilex paraguariensis (erva mate), areas with pastures, eucalypt plantations, faxinal and two control samples in areas with forest. From each land use it were collected samples in three different topography position of the catchment. Samples were analysed in powder form in specific cells, just grinding the samples to obtain particle size lower than 1 mm. The portable EDXRF measurement system employed was the PXRF-LFNA-02, composed by a Si- PIN detector (221eV resolution for 5.9keV energy, with 25µm Be window). Sample excitation was accomplished for 500s with a mini X-ray tube with Ag target (4W, 10-40kV, 0-100µA, diameter focus of 5 mm). The measurement geometry is 45° × 45° and the sample is positioned at 10 mm distance. Seven soil and sediment standard reference materials were used for system calibration, validation and elements quantification. It was possible to quantify, with the following range of concentrations, in mg Kg⁻¹: Ti (6800 – 10500), Mn (399 – 1045), Fe (26640 – 44053), Cu (191 – 291), Zn (101 – 210), Rb (10 – 28), Zr (333 – 1046). In conclusion, the application of PCA to either EDXRF spectra or metallic elemental concentration values makes it possible to identify differences in the sampled soil by land type. PCA with spectra analysis is easier because it is direct, i.e., it is not necessary to determine peak areas to obtain the results.

Magnetostrição Sintonizável por Frequência em Ni_{48.8}Mn_{31.4}Ga_{19.8}

D. Z. Montanher, O. A. Protzek, J. R. D. Pereira, L. F. Cótica, I. A. Santos
Universidade Estadual de Maringá, Maringá, Brasil

Uma rota alternativa foi usada para produzir o composto Ni_{48.8}Mn_{31.4}Ga_{19.8} com deformação mecânica induzida por campo magnético sintonizável por frequência. Medidas de microscopia eletrônica de varredura, difração de raios x, análise calorimétrica diferencial e susceptibilidade magnética revelaram a existência de uma estrutura martensítica, com período de modulação de 14 planos atômicos, o qual ocorre para temperaturas abaixo de

335 K. Medidas da deformação mecânica induzida por campo magnético foram realizadas por um método não convencional, revelando um comportamento dependente da frequência do campo e apresentando uma deformação mecânica de aproximadamente 2% em 25.5 kHz.

Bilayer and Bulk Heterojunction Solar Cells with Functional Poly(2,2'-bithiophene) Films Electrochemically Deposited from Aqueous Emulsion

Andreia G. Macedo¹, Daniel C. Silva^{1,2}, Natasha A.D. Yamamoto², Liliana Micaroni², Regina M.Q. Mello², Lucimara S. Roman²

¹UTFPR, Curitiba, Brazil

²UFPR, Curitiba, Brazil

Ultra thin films of poly(2,2'-bithiophene) with thickness of 1133 nm were electrochemically deposited on poly(3,4-ethylenedioxithiophene):poly(styrene sulfonic acid) modified indium tin oxide substrates using a new approach for electrochemical synthesis. Ultrasonic emulsification of aqueous perchloric acid and 2,2'-bithiophene monomer is an effective method to disperse this water insoluble monomer in micro droplets that improved the contact with the electrode. Rigorous control of the poly(2,2'-bithiophene) thickness was achieved by controlling the potential applied and the charge during the deposition. We studied thin films solar cells based on poly(2,2'-bithiophene) polymer as bilayer with C60, resulting a power conversion efficiency of 0.3%, and as buffer layer in bulk heterojunction solar cells. We show that poly(2,2'-bithiophene) films influenced positively the open circuit voltage and increased about 1.6 times the short circuit current, increasing the efficiency from 1.3% up to 2.9% from devices without buffer layer or with 11 nm of poly(2,2'-bithiophene), respectively.

Superconducting Electronics Devices Based on Superconductor-constriction-Superconductor (ScS) Junctions

L. A. A. Pereira, Pedro R. Junior, Alcione R. Jurelo

UEPG, Ponta Grossa, Brazil

Superconductor-constriction - superconductor (ScS) junction, characterized by a constriction between two superconducting bulky regions, can be easily produced through the reduction of the cross-sectional area of a sample. For a given applied electrical current in the ScS junction, the current density in the constriction can exceed the critical value and the superconductivity can be locally destroyed while the bulky regions remain in the superconducting state. In this work, we present the CVC of ScS junction produced by successive reduction of the cross-sectional area of top-seeded melt-textured YBCO - Ag sample. The results show that the CVC of the junction presents a typical SNS and hysteretic behaviors and their shape are dependent on the constriction dimension. It was possible to obtain a region with a negative differential resistance (NDR) in the CVC by connecting an ohmic resistor in parallel to the sample. This result suggests the application of ScS as electronic oscillators and radiation detectors.

SESSÃO DE PÔSTERES 1

Física Geral

Effects of quantum deformation on the spin-1/2 Aharonov-Bohm problem

F. M. Andrade¹, E. O. Silva²

¹UEPG, Ponta Grossa, Brazil

²UFMA, São Luís, Brazil

In this work we study the Aharonov-Bohm problem for a spin-1/2 particle in the quantum deformed framework generated by the κ -Poincaré-Hopf algebra. We consider the nonrelativistic limit of the κ -deformed Dirac equation and use the spin-dependent term to impose an upper bound on the magnitude of the deformation parameter ε . By using the self-adjoint extension approach, we examine the scattering and bound state scenarios. After obtaining the scattering phase shift and the S-matrix, the bound states energies are obtained by analyzing the pole structure of the latter. Using a recently developed general regularization prescription [Phys. Rev. D. 85 (2012) 041701(R)], the self-adjoint extension parameter is determined in terms of the physics of the problem. For last, we analyze the problem of helicity conservation.

Diffusion in heterogeneous system separate by a semipermeable membrane

M. A. F. dos Santos¹, F. S. Michels¹, R. S. Zola², L. R. Evangelista¹, E. K. Lenzi¹

¹Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, Maringá

²Universidade Tecnológica Federal do Paraná - Câmpus Apucarana

We investigate the particle diffusion in heterogeneous system separate by a semipermeable membrane. The particle dynamic is governed by the diffusion equation in the bulk and by kinetic equations on the surface which characterizes the membrane of the interface between the different media. The diffusion and kinetic equations are also considered in presence of fractional derivatives in order to enable us describe processes connected to anomalous diffusion. The results exhibit a rich variety of behavior for the particles in the interface or bulk depending on the choice of characteristic times present in boundary conditions or the fractional index present in these equations.

The n -site approximation scheme for the K multiplet-creation model with absorbing phase transitions

A. A. Ferreira

UFPel

We study the nonequilibrium phase transitions in the one-dimensional K multiplet creation model using the n -site approximation scheme. Here, $K = 0, 1, 2, 3, \dots$, represents the range of interactions between sites. When $K = 0, 1$ and $K = 2$ we recover the Singlet, Duplet and Triplet creation models respectively. We find, for $K = 0, 1$ and $K = 3$, the phase diagram in the space of parameters (γ, D) , where γ is the particle decay probability and D is the diffusion probability. Through data ($1 \leq n \leq 18$) we show that in the limit ($n \rightarrow \infty$) the $K = 0, 1$ models present a continuous transition of active state for inactive state (absorbing state for any value of $0 \leq D \leq 1$), while for $K = 2$ model, the n -site approximation scheme is inconclusive to determine the existence of tricritical point. In general, we obtain the critical value of γ and the “gap” density in the transition point for single and pair approximation ($\gamma_c(n = 1, K, D)$, $\Delta\rho(n = 1, K, D)$ and $\Delta\rho(n = 2, K, D)$).

Robustness of first-order phase transitions into absorbing states

C. E. Fiore

UFPR, Curitiba, Brazil

Inspired by recent findings we address the existence of a simple and robust ingredient providing generic discontinuous absorbing transitions in short range systems with single species, no extra symmetries nor law conservations. Our study considers simple variants of the contact processes. The influence of distinct interaction rules has been considered. Time dependent numerical simulations present results substantially different when compared to their non restrictive counterparts (in which the transitions are second-order), suggesting in all cases a first-order transition. Bimodal order-parameter distributions reinforce the appearance of a generic phase coexistence. All these common findings strongly suggest the existence of a minimum and fundamental mechanism ruling phase transition in short-range contact processes.

Estudo das oscilações amortecidas através da análise do pêndulo magnético

V. G. Garcia, A. G. Bezerra Jr, J. A. Lenz

UTFPR, Curitiba, Brazil

Ao se estudar sistemas oscilatórios, inicialmente considera-se que o sistema oscilante se comporte como um oscilador mecânico simples e ideal onde não atuam forças dissipativas tais como as de atrito ou de resistência do ar. Nesse tipo de sistema há conservação de energia dita mecânica ou total. Porém, sabe-se que nos osciladores reais a amplitude do movimento se reduz a medida que o tempo passa até chegar ao ponto de equilíbrio e ficar em repouso sem ter realizado nenhuma oscilação completa ou após algumas oscilações. Estas oscilações são denominadas de amortecidas. Segundo a literatura, normalmente são classificadas de acordo com o tipo de amortecimento em subamortecido ou levemente amortecido, superamortecido (cessa seu movimento após duas ou três oscilações) e criticamente amortecido (vai para o repouso sem completar uma oscilação completa). Para visualizar todos estes tipos de amortecimento considera-se um conjunto composto de mola e um corpo preso a mesma e este imerso num líquido. Outra maneira de se reproduzir este fenômeno é da utilização de um pêndulo magnético. Uma placa de alumínio presa a ponta de uma haste e solta de uma determinada altura e o conjunto pode oscilar em torno de um eixo de rotação com mínimo de atrito. A placa, ao alcançar a trajetória mais baixa, passa entre dois ímãs freando o pêndulo. Consegue-se a reprodução dos vários tipos de amortecimento regulando a distância entre os ímãs. Geralmente esta atividade experimental é trabalhada em sala de aula como meramente qualitativa. Para tornar a atividade mais significativa seria interessante que se pudesse obter dados relevantes durante a evolução da mesma. Assim, este trabalho sugere a vídeoanálise, mais especificamente o software livre Tracker, como ferramenta para a obtenção e tratamento dos dados referentes ao pêndulo magnético. A atividade é filmada e o aplicativo analisa o vídeo quadro a quadro mostrando como a amplitude diminui com o decorrer do tempo.

Formulação Lagrangiana para sistemas dissipativos

C. E. Krumreich, M. J. Lazo

FURG, Rio Grande do Sul, Brazil

Neste trabalho, generalizamos o Princípio da Mínima Ação proposto por Riewe para sistemas não conservativos, contendo forças dissipativas lineares dependentes de derivadas temporais de qualquer ordem. A Ação generalizada é construída a partir de funções Lagrangianas dependentes de derivadas de ordem inteira e fracionária. Diferente de outras formulações, o uso de derivadas fracionárias permite a construção de Lagrangianas físicas para sistemas não conservativos. Uma Lagrangiana é dita física se fornece relações fisicamente consistentes para o momentum e o Hamiltoniano do sistema. Neste Princípio da Mínima Ação generalizado, as equações de movimento são obtidas a partir da equação de Euler-Lagrange e, tomando-se o limite indo à zero para o intervalo de tempo definindo a Ação. Finalmente, como exemplo de aplicação, formulamos pela primeira vez uma Lagrangiana física para o problema da carga pontual acelerada.

NITRETAÇÃO IÔNICA DE AÇO INOXIDÁVEL MARTENSÍTICO AISI 420 POR DESCARGA LUMINOSA (PLASMA DC)B. C. E. S. Kurelo¹, S. L. R. da Silva¹, G. B. de Souza¹, C. E. Foerster¹ e C. Alves Jr²¹UEPG, Ponta Grossa, Brazil²UFRN, Natal, Brazil

A técnica de Descarga Luminosa (DL) pode ser utilizada para se elevar as propriedades mecânicas e tribológicas em superfícies de ligas metálicas, associando, assim, propriedades desejáveis como resistência à corrosão, com dureza e resistência ao desgaste mais elevadas. Neste trabalho, a técnica foi empregada em amostras de aço inoxidável AISI420 que possui microestrutura martensítica e, é empregado em instrumentos cirúrgicos, peças de motores a jato, dentre outras aplicações. As amostras foram polidas mecanicamente, limpas e então submetidas ao processo de decapagem em atmosfera de H₂ a 200°C durante 1 h, sendo então nitretadas em atmosfera de (N₂/H₂:80%/20%) na pressão parcial de 300 Pa, durante 6h nas temperaturas de 350°C, 400°C e 450°C. As superfícies foram caracterizadas pelas técnicas de difração de raios X, microscopia eletrônica de varredura e microscopia de força atômica. As propriedades mecânicas (dureza e módulo de elasticidade) foram avaliadas por indentação instrumentada, e, com o mesmo equipamento, realizaram-se os ensaios de nanorisco. Após a nitretação, verificou-se a predominância das fases ϵ -Fe_(2+x)N e γ' -Fe₄N devido a baixa solubilidade e alta difusividade de nitrogênio na martensita. No tratamento realizado a 450°C houve a formação de CrN devido ao efeito da depleção do cromo. Os valores de dureza obtidos para as três temperaturas de tratamento são estatisticamente iguais, devido à predominância na formação das fases γ' e ϵ independentemente da temperatura. Houve elevação nos valores de dureza de 2,8 vezes do valor da amostra de referência. Os perfis de módulo de elasticidade não se alteram significativamente com os tratamentos por DL. A resistência ao risco das superfícies modificadas aumentou para quaisquer temperaturas de tratamento. A técnica de DL mostrou-se adequada para melhoria nas propriedades estudadas nos meios onde este aço é empregado que exigem boas propriedades mecânicas e tribológicas.

Refinamento pelo Método de Rietveld de Fases Minerais de um Latossolo Vermelho Distrófico

W. Leite, S. C. Saab, A. M. Brinatti

UEPG, Ponta Grossa, Brazil

O Método de Rietveld (MR) é uma ferramenta comumente utilizada no estudo de materiais policristalinos. Esse método aliado aos dados de difração de raios X (DRX) tem-se mostrado eficaz no estudo qualitativo e quantitativo de diversos tipos de amostras sintéticas e naturais. Uma questão a ser levada em consideração em refinamentos pelo MR são os modelos estruturais propostas para o padrão de DRX, modelos estruturais adequados são desejáveis para a descrição correta do padrão total de difração e de forma mais realística a amostra estudada. Neste trabalho é apresentado o refinamento estrutural de minerais de um Latossolo Vermelho Distrófico, as fases Quartzo, Gibbsita, Goethita, Rutilio, Hematita, Muscovita, Caulinita e Halosita foram refinadas pelo MR. A partir de informações estruturais já conhecidas, disponíveis na literatura, foram refinados parâmetros de rede, posições atômicas e deslocamentos atômicos dessas fases. Foi utilizado o programa GSAS para refinamento, esse fornece o índice (R_F^2) que avalia a adequação das estruturas ao padrão de DRX experimental, devendo convergir a 1% ao final do refinamento no caso ideal, para a amostra estudada esse convergiu para 2,97%, mostrando boa adequação das estruturas propostas ao padrão de DRX. Observou-se também a manutenção do grupo espacial em todas as fases e uma adequação nas distâncias interatômicas e ângulos de ligação. Conclui-se que utilizando modelos de ajustes adequados é possível realizar o refinamento pelo MR em amostras naturais, com boa concordância para esse tipo de amostra.

Qualidade do Refinamento pelo Método de Rietveld em amostras de solo

W. Leite, S. C. Saab, A. M. Brinatti
UEPG, Brazil

O método de Rietveld (MR) baseia-se na aproximação de parâmetros instrumentais e da amostra, obtidos por meio de modelos matemáticos, assim de descrever a forma do padrão total de difração. Para acompanhar a convergência e qualidade do refinamento são definidos índices de discordâncias R , definidos a partir das intensidade calculadas ($y_{Cal.}$) e observadas ($y_{Obs.}$). O primeiro índice R , é o R_{wp} , originado da função minimização utilizada pelo MR e normalizado pelas intensidades observadas. Este índice avalia a qualidade do refinamento calculando a diferença percentual da intensidade calculada e observada, o melhor valor possível para R_{wp} é chamado de R - esperado (R_{esp}). Das grandezas R_{wp} e R_{esp} , pode-se atribuir um fator de qualidade do refinamento, goodness of fit; dado por $S = \frac{R_{wp}}{R_{esp}}$. Existe um problema referente a este fator, baixos valores de R_{esp} , provenientes de uma boa coleta de dados, podem superestimar valores de S , tornando-o duvidoso como índice de qualidade geralmente adotado na literatura. Neste trabalho propõem-se analisar a qualidade do refinamento a partir de curva de diferença ($y_{obs.} - y_{obs.}$), onde define-se os parâmetros de qualidade para um bom refinamento a partir da distribuição de frequências para essa curva. Essa distribuição deve seguir uma distribuição gaussiana, com a largura total a meia altura (fwhm) tendendo a zero para representar um bom refinamento e demonstra que os erros presentes no ajuste são de natureza sistemática. Foram refinadas três amostras, duas proveniente de amostras de solo e um padrão de Y_2O_3 , observou-se que o refinamento estava finalizado quando a curva de distribuição possuía uma tendência gaussiana e que a fwhm dessa estava estabilizada. A fwhm das distribuições devem convergir para um valor obtido previamente do refinamento de um material padrão. Pois essa indicará o momento de finalizar as iterações e também é um indicativo da qualidade do refinamento realizado.

Diffusion Equations and Spatial Fractional Derivatives

A. F. B. Duarte, J. M. G. Pereira, E. K. Lenzi
UEM, Maringá, Brazil

We devote this work to discuss the consequences on the solutions when three different types of spatial fractional derivative are incorporated in the diffusion equation. Particularly, we focus our discussion on the Riemann - Liouville, Caputo and the fractional operator proposed by Yang et al. in Appl. Math. Model. 34, 200 (2010). In all cases, we have an anomalous spreading of the system which can be connected to a rich class of anomalous diffusion processes.

Nascimento da dinâmica caótica e mudanças de estabilidade em sistemas conservativos

C. Manchein¹, M. W. Beims²

¹UDESC, Joinville, Brazil

²UFPR, Curitiba, Brazil

Nesta apresentação discutiremos os principais resultados que foram publicados recentemente nas Refs. [C. Manchein, M.W. Beims. Phys. Lett. A **377**, 789 (2013) e M.S. Custódio, C. Manchein, M.W. Beims. Chaos **22**, 026112 (2012)], em que descrevemos essencialmente, como ocorre a transição da dinâmica regular (integrável/quase-integrável) para caótica, conforme o parâmetro de não-linearidade, de determinados sistemas conservativos a tempo discreto e também contínuo, for incrementado. Mostramos que as cascatas de bifurcação nesta classe de sistemas apresentam um diagrama generalizado, que contém várias informações relevantes relacionadas à localização de órbitas periódicas (ressonâncias), à largura das ilhas de regularidade, à presença de toros iracionais e à existência de infinitas ressonâncias de ordens superiores. Estimamos ainda a taxa de contração das ilhas de regularidade em sistemas conservativos ao longo de bifurcações de dobramento de período, no valor aproximado de 3,9; condizente com a literatura correlacionada. Utilizamos para tais investigações o mapa (padrão) de Chirikov-Taylor, o sistema de Hénon-Heiles e uma rede de mapas conservativos acoplados. Vale ressaltar ainda, que o método numérico proposto nestes trabalhos pode ser utilizado no estudo de regimes regulares e mesclados (coexistência de domínios regulares+caóticos), sempre que o parâmetro de não-linearidade for incrementado.

NonMarkovian reaction diffusion process on a substrate in a semi-infinite mediumF. S. Michels¹, M. A. F. dos Santos¹, M. K. Lenzi², G. Gonçalves³, E. K. Lenzi¹¹Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá²Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Paraná³Departamento de Engenharia Química, Universidade Estadual de Maringá

We investigate a reaction diffusion process of system composed by two different chemical substances in semi-infinite medium for which the reaction occurs on the surface, where the active sites are present, in contact with the system . The reaction process is considered reversible of first order, i.e., $\mathcal{A} \rightleftharpoons \mathcal{B}$, and governed by fractional kinetic equation. We also consider the presence of the fractional derivatives in the bulk equations in order to enable us to describe process connected to anomalous diffusion. In this scenario, we obtain the behavior of solutions of the substances in the bulk and in the surface where the reaction process is present.

Oral tolerance under the perspective of complex systemsP. J. Miranda¹, M. Delgobo¹, S. E. S. Pinto^{1,2}, G. M. Favero¹¹UEPG, Ponta Grossa, Brazil²University of Aberdeen, Aberdeen, United Kingdom

Tolerância oral pode ser definida como estado de inibição ou estabilização da resposta imune específica mediada por células T, obtida através da ingestão de抗ígenos inócuos, como proteínas presentes na dieta. O fenômeno de tolerância oral já é conhecido a mais de um século, porém apenas recentemente foi observado seu papel na homeostase do sistema imunológico, promovendo supressão da imunopatologia em modelos experimentais, como tratamento preventivo em diferentes alergias, além de seus efeitos indiretos na resposta inflamatória e regenerativa. Enquanto grande parte dos estudos levou ao entendimento dos mecanismos bioquímicos e moleculares envolvendo a geração e manutenção de células T regulatórias e sua função supressora nos tecidos linfoides associados ao intestino, nós buscamos investigar a rede de respostas imunológicas desencadeadas na tolerância oral. Nosso objetivo é identificar a contribuição relativa que cada elemento da rede possui, através de parâmetros topográficos e dinâmicos. A construção da rede baseou-se no conhecimento atual sobre tolerância oral;抗ígenos e demais componentes do sistema imunológico (ex. linfócitos, células dendríticas, citocinas e anticorpos) foram representados como nós na rede. Interações, relações regulatórias, e transformação de componentes foram descritos através de arestas direcionadas, começando no nó fonte (antígeno) e terminando nos nós alvo. Para avaliar o fluxo dinâmico, foi implementado um algoritmo de caminhada aleatória, sendo determinado o fluxo relativo de iTregFoxP3+ em diferentes tempos até estabilização. O modelo demonstra uma alta centralidade de intermediação das células CD103+, interleucinas TGF-β e IL-10 e ácido retinóico na geração de iTregFoxP3+. Perturbações na rede, através do knockout individual de nós, identificaram elementos necessários para a ocorrência da tolerância oral. Essa abordagem integrada do processo condiz com as evidências biológicas de que o microambiente presente nos tecidos linfoides associados ao intestino é responsável pela manutenção de um estado de tolerância a抗ígenos apresentados pela via oral.

Comparison between some bipartite entanglement measures and a geometrical approach.

D. F. Orsini, M. G. E. da Luz

UFPR, Curitiba, Brazil

We compare in this work, numerically and analytically, some entanglement measures applied to bipartite pure systems. The measures are the following: the Q measure, by Meyer and Wallach, von Neumann Entropy, Linear Entropy and distance from an unentangled state. Besides that, we present a geometrical study, starting from the Q measure, that enables a visualization of the entanglement behavior in bipartite pure systems.

Phase diagrams for contact processes in distinct sublatticesC. E. Fiore¹, S. Pianegonda^{1,2}¹Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, Brazil²Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre

We study a competition between contact processes in distinct sublattices on a square lattice using mean field approximation and Monte Carlo simulations. Creation process depends on the interaction with first and second neighbors sites and the annihilation rate increases with the number of occupied first neighbors. We consider two versions. In the former, particles in the same sublattice interact as in the contact process while in the opposite sublattice the interactions obey the threshold dynamics and vice-versa in the second case. Mean-field theory predicts the possibility of absorbing, symmetric and asymmetric phases, separated by continuous and discontinuous transitions, depending on suitable choices of the control parameters for each model. Monte Carlo simulations confirm these results qualitatively.

Diagrama de fases de materiais magnetocalóricos

J. C. Rosa, B. H. Bernhard

UDESC, Joinville, Brasil

O modelo da rede de Kondo é adotado para descrever uma variedade de materiais magnéticos contendo momentos localizados e elétrons de condução. O diagrama de fases é obtido dentro de uma aproximação de campo médio, incluindo as fases ferromagnética (FM) e antiferromagnética (AF), como função da interação de troca local J_K e da concentração eletrônica n . As magnetizações parciais são determinadas de maneira autoconsistente em função da temperatura em presença de um campo magnético h . O diagrama h - T inclui as fases homogêneas FM e AF, e uma fase PM a altas temperaturas. O efeito magnetocalórico (MCE) é caracterizado pela variação isotérmica da temperatura ΔS_T . Dando continuidade a estudos recentes, incluímos a presença da repulsão coulombiana local U na banda de condução, investigando a sua influência nas transições de fase e no MCE.

- [1] D. Nascimento, B.H. Bernhard, Solid State Commun. 167 (2013) 40
- [2] F. Alfaro, B.H. Bernhard, Physica B 404 (2009) 3066
- [3] B.H. Bernhard, M.C. Siqueira, Solid State Commun. 149 (2009) 1777

Influence of an extra-dimension on the dynamics of the standard map

R. M. da Silva, C. Manchein

UDESC, Joinville, Brasil

In this work, we study the transition from integrable to weakly chaotic dynamics in a three-dimensional system, named Modified Standard Map (MSM). Our main motivation for choosing the standard map, besides being easy to handle, is related to the fact of this map has many interesting behaviors, generally presented by nonlinear dynamical systems. We start our investigation characterizing the influence of an extra-dimension in the dynamics of standard map, that can be changed varying the parameters K and δ , responsible for the nonlinearity and the coupling with the extra-dimension, respectively. According the parameters are varied, the regular/mixed/chaotic regimes of the system can be identified with the calculation of the finite-time Lyapunov exponent [1]. Furthermore, to some parameter set, we present the phase space projections of MSM to illustrate the transition from regular/mixed to chaotic motion with the increasing of δ (keeping K fixed). Another important aspect studied is related to the influence of the extra-dimension in the decay of Recurrence Time Statistics for the standard map. Our results show that the regular islands are destroyed as the coupling increases, and this tendency can be visualized by the transition from polynomial [2] to exponential decay of the recurrences.

- [1] C. Manchein; M. W. Beims. Phys. Lett. A. **377**, 789 (2013)
- [2] D.L. Shepelyansky. Phys. Rev. E. **82**, 055202-1 (2010)

Quimera em Mapas Acoplados

Moises Souza Santos¹, Jose Danilo Szezech Junior²

¹Programa de Pós Graduação em Ciências, UEPG, Ponta Grossa, Brasil

²UEPG, Ponta Grossa, Brasil

Neste trabalho nos analisamos redes de mapas acoplados de forma não-local. A sua evolução espaço-temporal e os padrões de comportamento que surgem para este tipo de sistema, mais especificamente analisamos os chamados estados quimera. Nestes estados há coexistência de regiões coerentes (periódicas) e incoerentes (caóticas) através da rede conforme o sistema evolui. O sistema estudado consiste de uma rede com N mapas idênticos com acoplamento não-local conforme a equação:

$$z_i^{t+1} = f(z_i^t) + \frac{\sigma}{2P} \sum_{j=i-P}^{i+P} [f(z_j^t) - f(z_i^t)], \quad (2)$$

onde i está relacionado com a posição do oscilador ao longo da rede ($1 \leq i \leq N$) o parâmetro P está relacionado ao número de vizinhos acoplados de cada lado do sitio de índice i , nos trabalhamos com $P = 32$, ou seja, cada elemento da rede está acoplado com 32 vizinhos de cada lado, número de mapas acoplados $N = 100$ e $0 \leq \sigma \leq 1$ é a intensidade do acoplamento. A função $f(z)$ é a conhecida equação do mapa logístico:

$$f(z) = az(1-z). \quad (3)$$

O parâmetro de controle a é escolhido de tal forma que o mapa exiba um comportamento caótico quando o mesmo está isolado na rede.

Correlações Quânticas em Sistemas de Dois Qbits: Dinâmica sob Acoplamento com Banho Térmico

A. C. S. Costa, R. M. Angelo, M. W. Beims
UFPR

Nosso trabalho consiste na análise do fenômeno de descoerência para um sistema de dois qbits acoplado com um reservatório composto por N osciladores em equilíbrio térmico. Determinamos as características centrais do modelo, em particular o tempo de descoerência e, em seguida, o decaimento das correlações quânticas, medidas pelo emaranhamento e discordância, e dos aspectos não-locais, a partir das desigualdades de Bell.

Física da Matéria Condensada

Spectroscopic properties of Pr³⁺ doped and Pr³⁺/Yb³⁺ codoped tellurite-tungstate glasses

M. P. Belancon^{1,2}, J. D. Marconi^{2,3}, L. C. Barbosa²

¹UTFPR, Pato Branco, Brazil

²UNICAMP, Campinas, Brazil

³UFABC, Santo André, Brazil

A study of the broadband near-infrared emission in Pr³⁺ single doped and Pr³⁺/Yb³⁺ codoped tellurite-tungstate glasses for optical amplification is presented. In the Pr³⁺ single doped samples pumped at 474 nm the emission band at 1480 nm presents a FWHM of 140 nm. The Yb³⁺ addition produces a FWHM broadening up to 155 nm, achieved through the 1G4-3H5 transition. The emission spectra when the codoped sample is pumped at 980 nm shows efficient energy transfer from Yb³⁺ to Pr³⁺, resulting in an intense Pr³⁺ emission around 1330 nm. This shows that changing the pump wavelength it is possible to select the 1D2-1G4 or the 1G4-3H5 transition, displacing the emission band from 1480 to 1330 nm.

Colloidal nanoparticle green synthesis via laser ablation

A. G. Bezerra Jr.¹, F. R Henrique², V. S. Oliveira², N. Mattoso², I. L. Graff², W. H. Schreiner²

¹UTFPR, Curitiba, Brazil

²UFPR, Curitiba, Brazil

The design and synthesis of nanoscale materials with controlled properties is an important challenge within nanoscience and nanotechnology. In particular, metal nanoparticles (NPs) constitute promising materials in fields such as sensing, imaging, and therapeutics as well as for applications in optoelectronics and biomedicine. The synthesis of NPs is usually done by chemical methods that have to be specifically designed for each type of nanoparticle material. These chemical routes lead to unreacted precursors and additives that tend to remain in the final colloidal product, thus requiring huge efforts for an efficient purification. This is especially important in applications to biology and nanomedicine where pure colloids are generally needed. Laser ablation in liquid (LASiS) has emerged in the last decade as an alternative approach for nanoparticle generation. LASiS constitutes a potential green synthesis technique for it allows the production of colloids directly from nearly all classes of materials in pure solvents. We present results in the laser ablation of diverse materials in different solvents. Our LASiS approach employs a Q-switched Nd:YAG laser delivering 1064nm, 200ns pulses at kHz frequencies. Several different pure metal plate materials (Ag, Au, Co, Cr, Cu, Fe, Mo, Ni, Si, Ti, V, and W) were used as targets and laser ablation was performed in different solvents such as water, acetone, THF, isopropyl alcohol, and propylene glycol. The colloidal samples were characterized by multiple techniques: DLS, AFM, TEM, UV-vis spectroscopy, XAS, and SAED. Our results indicate that, depending on the material-solvent combination, LASiS can lead to the controlled production of a variety of different metals, oxides, and carbonyl NPs. In addition, our approach also points to the possibility of generating small size, narrow distribution NPs together with high production rates. This suggests LASiS could play a major role in the green synthesis of NPs for several applications.

Preparation of polymeric nanostructures in porous anodic alumina template

F. N. Cidade, L. S. Roman, A. G. Macedo

Departamento de Física, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Curitiba, Paraná, Brasil

The aim of this work is to prepare porous and well ordered polymeric nanostructures by using the exposition to organic vapors technique combined with the use of porous anodic alumina oxide (AAO) as template. In a first step, thin films are deposited onto glass substrates by casting or spin coating, subsequently; they are placed in contact with the AAO template and harvested in a sealed flask containing organic vapors, this result in a partial dissolution and infiltration of the polymeric material into the template. In a second step the AAO template is removed by selective dissolution. Initial tests were performed with films of poly-(3-hexylthiophene) (P3HT) conjugated polymer. Morphology and optical properties will be characterized by scanning microscopy techniques (SEM and AFM) and spectroscopy techniques (UV-VIS and PL), respectively.

van Hemmen model study with cluster

D. S. Dalcol, C. F. Silva, F. M. Zimmer

UFSM, Santa Maria, Brazil

This work presents a theoretical study proposed to describe the spin glass phase (SG) using van Hemmen model with cluster. The first three Hamiltonian terms, which describe the model with cluster spin glass, represent the intercluster interactions, with other words the interactions among different clusters. The last Hamiltonian term considers the intracluster interactions, i.e., interactions among magnetic moments belonging to the same cluster, which we consider a square lattice structure. To find the free energy we need to calculate the configurational average: thermodynamic usual average and average about the random variables χ and η , which follow a probability distribution $P(\chi, \eta)$. From the free energy equation we can find thermodynamics information of the issue, such as the order parameter SG (q) and magnetization (m). The results are obtained through a numeric analysis of q and m graphs versus the temperature. These results were analysed for different cluster size (spin set), we also varies the ferromagnetic average interaction and the intracluster interaction. Therefore, build diagrams of phase of the temperature versus ferromagnetic average interaction is possible, that show the competition among SG, ferromagnetic (FE), paramagnetic (PM) and mixed (SG+FE) phases. The diagrams

show for high temperature a second order transition between FE and PM phases. For low temperature values and ferromagnetic interactions was found the SG phase. Rising the ferromagnetic interaction a first order transition occur between SG and FE, and mixed and FE phases. The transitions between SG and mixed are second order. Increasing the intracluster interaction the magnetics phase appearance for higher temperatures compared when we do not consider this interaction.

Identificação de íons manganes em vidros aluminosilicato de calcio dopados com MnO₂

A. Gonçalves¹, A. Novatski¹, A. Somer¹, R. L. S. Piazzetta¹, J. L. Gomes Jr.¹, G. K. Cruz¹, F. Astrath², F. Sato², A. M. Neto², M. L. Baesso²

¹UEPG, Ponta Grossa, Brazil

¹UEM, Maringá, Brazil

No presente trabalho foram estudas as propriedades ópticas de vidros aluminosilicato de calcio com baixa concentração em sílica, dopados com diferentes concentrações em peso de MnO₂ (0,25; 0,5 e 1,5%). Para o estudo destas propriedades utilizou-se as técnicas de excitação x emissão, luminescência e tempo de vida. Os resultados obtidos mostram que para a amostra com menor concentração do dopante, para uma excitação centrada em 265nm são observados dois centros emissores, um proveniente da base em 480nm e outro em 550nm. Para as demais amostras a emissão em 550nm também ocorre para uma excitação em 440nm. Para uma excitação em 365nm (equivalente a um laser de Kr⁺) são observadas 3 emissões diferentes: uma em 425nm (esta é mesma da base e também observada pelo experimento de luminescência), outra em 560nm e um ombro largo em 640nm. Para estas duas últimas emissões foram determinados os tempos de vida dos íons excitados, os quais são da ordem de 8ms. De acordo com a literatura estes valores são condizentes para os íons Mn²⁺ e Mn³⁺.

Modification of PEDOT:PSS anode buffer layer with HFA for flexible polymer solar cells

L. F. Lima¹, N. A. D. Yamamoto¹, R. E. Perdomo², V. L. Calil^{3,4}, R. Valaski³, A. G. Macedo^{1,5}, M. Cremona^{3,4}, Lucimara S. Roman¹

¹Laboratory of NanoStructured Devices (DiNE), Department of Physics, Federal University of Paraná, Curitiba, Paraná, Brazil

²Engineering and Materials Science (PIPE), University Federal of Paraná, Curitiba, Brazil

³Instituto Nacional de Metrologia, Qualidade Industrial e Tecnologia INMETRO, Duque de Caxias, Rio de Janeiro, Brazil

⁴Departament of Physics, Pontifical Catholic University of Rio de Janeiro, PUC-Rio, Rio de Janeiro, RJ, Brazil

⁵Department of Physics, Technological Federal University of Paraná, Curitiba, Paraná, Brazil

Organic photovoltaic devices (OPVs) has been object of intense research due to their advantages such as the possibility to produce devices with larger area and lower cost methods when in comparison with the conventional photovoltaic devices (PVs) as well as the possibility to produce flexible devices. Flexible devices are feasible possibility for increasing the OPVs efficiency by increasing of the radiation absorption at larger incident angles, which is a source of efficiency decrease in flat-glass based devices, making the development of new flexible and transparent substrates for the glass substitution an important issue. Poly(imides) (PI) are well known for its high thermal stability, having superior mechanical and electrical properties, and transparency. An important commercial example of a PI derivative is the poly(ether-imide) (PEI) that is an advanced amorphous thermoplastic polymer whose applications varies from medical to electronics areas. In this work we present our attempts to construct flexible photovoltaic devices. We developed flexible substrates based on indium tin oxide (ITO) films deposited on PEI with low resistivity and high optical transmittance for use in solar cells. Poly(3,4-ethylenedioxythiophene):poly(styrenesulfonate) (PEDOT:PSS) was used as intermediate layer in order to improve the positive charge carrier injection/collection. The poly[9,9-diethyl-fluorene-co-bithiophene] (F8T2) polymer and fullerene (C₆₀) were used as electron donor and acceptor materials, respectively. PEDOT:PSS sheet resistance must be decreased considerably for a wider application, what requires modifications in the production of the PEDOT:PSS based electrodes. The effect of PEDOT:PSS modified with an amphiphilic fluoro compound was investigated on the performance of flexible organic solar cells in bilayer geometry with pure and hexafluoroacetone (HFA) treated PEDOT:PSS. The spin-casted PEDOT:PSS films had its sheet resistance reduced from 7 MΩ to 40 kΩ after a single step HFA treatment, reflecting in an enhancement of power conversion efficiency in the photovoltaic cells from 0.45% up to 1.30%.

THE CORRELATION BETWEEN MAGNETIC IRREVERSIBILITY AND ZERO RESISTANCE TEMPERATURES OF $Y_{1-x}Ca_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ ($x = 0.01$ and 0.1) SINGLE CRYSTALS

D. G. Macedo¹, V. N. Vieira¹, F. T. Dias¹, D. L. da Silva¹, P. Pureur², J. Shaf²

¹Instituto de Fisica e Matematica, UFPEL ²Instituto de Fisica, UFRGS

We report on dc magnetization and ac magneto resistance measurements of $Y_{0.99}Ca_{0.01}Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ [Y(Ca1%)BCO] and $Y_{0.9}Ca_{0.1}Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ [Y(Ca10%)BCO] single crystals with the aim of to study the role of the hole chemical doping on the correlation between the magnetic irreversibility, T_{irr} (H) and the zero resistance, T_r (H). The zero field cooled, M_{ZFC} (T) and field cooled cooling, M_{FCC} (T) dc magnetization measurements were performed in a SQUID magnetometer to constant magnetic fields applied up to 50kOe (H // c). The ac (7Hz) magneto resistance measurements were performed by a PPMS to constant applied magnetic fields up to 50 kOe (J // ab). The T_{irr} (H) is defined as the temperature that differences the reversible from irreversible behavior of the M_{ZFC} (T) and M_{FCC} (T) magnetizations. The zero resistivity temperature, T_r (H) is obtained from the threshold of the plateau where resistance, R(T) curve falls to zero. The T_{irr} (H) and T_r (H) data of the Y(Ca1%)BCO sample approximately matches in all H-T diagram range. This behavior is a signature that the flux dynamics of this sample is dominated by Abrikosov dynamic. Differently is the behavior of the T_{irr} (H) and T_r (H) data of the Y(Ca10%)BCO sample. In the low field region of the H-T diagram the T_r (H) data of the Y(Ca10%)BCO sample falls systematically underneath of the T_{irr} (H) data and at H-T high field region the T_r (H) data matches the T_{irr} (H) data. In this scenario, T_{irr} (H) and T_r (H) do not depend on the same parts of the sample. While the T_{irr} (H) depends on wellcoupled grain clusters, the T_r (H) depends on grain arrays traversing the whole sample. Along such long range paths, the T_r (H) can be attained only at some temperature below the T_{irr} (H). On the other hand, in fields above several kOe, the T_{irr} (H) is dominated by the intragrain Abrikosov flux dynamics while the T_r (H) is still ruled by the grain junctions.

Study of polyaniline/carbon nanotubes composite, electrical properties and application in field effect transistors

L. C. Mariano¹, R. V. Salvatierra², A. J. G. Zarbin², L. S. Roman^{1,3}

¹Programa de Pós Graduação em Engenharia e Ciência dos Materiais (PIPE), UFPR, Curitiba-PR

²Departamento de Química, UFPR, Curitiba-PR

³Departamento de Física, UFPR, Curitiba-PR

Carbon Nanotubes (CNT) has been extensively applied in optoelectronics devices individually or in combination with other materials, being an interesting material to study its electric properties [1]. The polymer Polyaniline (PANI) presents several properties that stand out among the conductive polymers, varying its conductivity from insulator to semiconductor and conductor by protonation [2], having applications in composites with CNTs [3]. In this work we studied the electrical properties of CNT/PANI composite applied in FETs using the polymer polymethyl-methacrylate (PMMA) as electrical insulator. The FET was assembled on glass substrate, with the CNT/PANI composite as a semiconductor layer, aluminum as electrodes and PMMA as an insulator layer. The CNT/PANI composite was deposited by biphasic synthesis [2], the insulator PMMA was deposited by spin coater and the Aluminum electrodes was deposited by evaporation. The devices were electrically characterized by Semiconductor Parameter Analyzer equipment and the characteristic curves obtained through the electrical I x V measures on assembled devices, exhibit a region with characteristics of Drain current control as a function of applied voltage on Gate, being observed that when increases the concentration of CNTs in the composites, also increases the electrical conductivity in the device.

Acknowledgments: CNPQ, CAPES and INCT.

[1] C.E. Cava, R. Possagno, M. C. Schnitzler, P. C. Roman, M. M. Oliveira, C. M. Lipiensky, A. J. G. Zarbin, LS Roman. Iron- and iron oxide filled multi-walled carbon nanotubes: Electrical properties and memory devices. Science Direct, Chemical Physics Letters 444 (2007) 304-308

[2] R. Salvatierra, M. M. Oliveira, A. J. G. Zarbin. One-Pot Synthesis and Processing of Transparent, Conducting, and Freestanding CNT-PANI Composite Films. Chem. Mater. 22 (2010) 5222-5234

[3] V. Gupta, N. Miura. Polyaniline-single wall carbon nanotube (PANI-SWCNT) composites for high performance supercapacitors. Science Direct, Electrochimica Acta 52 (2006) 1721-1726

Simulation of Electronic Structures of Transition Metal Oxides

H. P. Martins, E. B. Guedes, R. J. O. Mossanek and M. Abbate
UFPR, Curitiba, Brazil

The correct interpretation of the electronic structure (ES) of materials is crucial to understand the microscopic origin of their physical properties as well as for the development of new compounds. In transition metal oxides (TMO's) however, effects such as electron correlation, disorder, spin-orbit interaction and covalence can lead to a variety of complex and intricate electronic structures, which sometimes present features that are not completely understood. Experimentally, spectroscopic techniques show up as suitable tools for studying the ES of materials because they directly access the electronic states in the sample. In parallel, the most successful theoretical methods are the DFT- and DMFT-based ones. For some materials, however, the approximations in the exchange-correlation potential and the impurity approach, respectively, have shown to miss some features in the experimental spectra. In this scenario, $p - d$ -based cluster models come out as alternatives for simulating the ES of materials because they are capable of treating the most relevant local interactions. The cluster model considered in this case treats electron correlation (Hubbard U) and (T)ransition (M)etal d - (L)igand 2p hybridization and multiplet effects, and it is solved by the standard configuration interaction method. We present a program developed in *MATLAB* to simulate the ES (photoemission spectra, x-ray absorption spectra and optical conductivity) of TMO's with perovskite structure assuming a regular TML^6 octahedron (O_h symmetry). In addition, two non-local screening channels were added to effectively account for the medium. An interface with plotting options, calculation of the Kanamori parameters and a few other functionalities are also implemented. Some known literature examples are shown and discussed.

THE ROLE OF THE CHEMICAL DISORDER ON THE CONDENSATION KINETIC ENERGY DENSITY OF THE $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ SINGLE CRYSTAL

A. P. A. Mendonça^{1,2}, V. N. Vieira², R. F. Lopes^{2,3}, F. T. Dias², P. Pureur³

¹UFPR, Curitiba, Brazil

²UFPel, Pelotas, Brazil

³UFRGS, Porto Alegre, Brazil

We report on isofield reversible DC magnetization of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, $\text{Y}_{0.99}\text{Ca}_{0.01}\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ and $\text{YBa}_{1.75}\text{Sr}_{0.25}\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ single crystals with the purpose to study the role of the Sr ion size and Ca hole doping disorder on the condensation kinetic energy density, $K_S(T, B)$ of the $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ superconducting state. The zero field cooled and field cooled cooling isofield reversible dc magnetizations measurement was performed by a SQUID MPMS-XL magnetometer when magnetic fields up to $50k\text{Oe}$ were applied parallel to the c axis of these samples. The valuation of the $K_S(T, B)$ from reversible isofield dc magnetization data is supported by the viral theorem of superconductivity that . According to this theorem the behavior of the $K_S(T, B)$ is determined from $K_S = -\vec{B} \cdot \vec{M}$. In particularly the application of the London formulation to the viral theorem of superconductivity allow the determination of the Ginzburg-Landau parameter (k) value estimation from the $K_S(T, B)$ data. The results of the $K_S(T, B)$ of our samples show the same profile behavior that is characterized by the observation of a maximum $K_S(T, B)$ intensity to $T \ll T_C$ that smoothly decrease as T_C until become zero at $T = T_C$. The magnetic field increases the $K_S(T, B)$ intensity. On the other hand the chemical doping with Ca and Sr produce a significant reduction of the $K_S(T, B)$ intensity and a proportional enhancement of the k value when contrasted to the results obtained to the pure sample. We suggested that superconducting granularity effects introduced by chemical doping as a probable reason for the observation of the last particular behaviors.

Síntese e estudo das propriedades ferroicas do sistema $(\text{Bi}_{1-x}\text{Nd}_x)(\text{Fe}_{1-y}\text{Co}_y)\text{O}_3$

A. J. Mincache, D. Montanher, I. A. Santos, L. F. Cótica
UEM, Maringá, Brazil

O estudo de materiais cristalinos multiferroicos é de grande interesse acadêmico e tecnológico devido a correlação entre as propriedades ferroelétricas e ferromagnéticas. Dentre estes materiais, destacam-se os compostos com estruturas do tipo perovskita tal como o BiFeO_3 . Neste trabalho utilizamos duas metodologias de processamento.

Na primeira, as amostras foram obtidas por moagem em altas energias, conformação dos cerâmicos por prensagem isostática e sinterização em atmosfera livre. Na segunda metodologia, as cerâmicas foram obtidas seguindo um procedimento idêntico ao primeiro, diferenciando-se apenas pela sinterização - altas taxas de aquecimento e resfriamento (quenching). Com esta rota foram processadas cerâmicas com as composições nominais de $(\text{Bi}_{1-x}\text{Nd}_x)(\text{Fe}_{1-y}\text{Co}_y)\text{O}_3$ $x=0$, $x=10$, $y=0$, $y=2$ e $y=4$. Difração de raios X constatou o grupo espacial R3c (simetria romboédrica). A resistividade elétrica em função do tempo demonstrou ser altamente dependente da densidade sendo igual a 94% para todas as amostras. Por fim a medida de magnetização revelaram um aumento da magnetização com adição de cobalto.

Propriedades termodinamicas de um modelo Falicov-Kimball

G. Peruzzo, A. C. Lausmann, E. J. Calegari

UFSM, Santa Maria, Brasil

A primeira teoria capaz de descrever metais, isolantes e a transição metal-isolante foi a teoria de bandas que se baseia no preenchimento das bandas para distinguir metais e isolantes. No entanto, essa teoria falha no caso de alguns óxidos de metais de transição. Na tentativa de explicar o comportamento apresentado por esses óxidos, em 1937, Peierls apontou a forte repulsão Colombiana entre os elétrons como causa do comportamento isolante. Logo esses sistemas passaram a ser denominados sistemas de elétrons fortemente correlacionados. Um dos modelos utilizados para estudar esses sistemas é o modelo de Falicov-Kimball. No presente trabalho, um modelo com interação do tipo Falicov-Kimball foi investigado usando a técnica das funções de Green a qual nos permite calcular quantidades físicas importantes de um sistema, incluindo explicitamente a dependência dessas quantidades em relação à temperatura. As funções de Green envolvidas no problema foram obtidas dentro da aproximação Hubbard I. As quantidades físicas de interesse são: densidade de estados, estrutura de bandas, potencial químico, calor específico e entropia. A primeira etapa do trabalho consistiu em obter as funções de Green para o modelo e, a partir dessas, as expressões para as estruturas de bandas e as densidades de estados. Na segunda etapa, foi desenvolvido um programa computacional em linguagem fortran 77 para executar os cálculos numéricos. Os resultados numéricos mostram que a interação (G) entre elétrons em orbitais d e f afeta a estrutura de bandas e, consequentemente, as densidades de estados. Também, podemos observar que, além de influenciar na largura do gap, G afeta os picos da densidade de estados. O estudo inclui também a investigação do comportamento da energia por partícula, da entropia e do calor específico em função da temperatura para diferentes ocupações e potencial de interação G .

Hydrostatic pressure sensors based on carbon spheres dispersed using hexadecyltrimethylammonium bromide in a poly(vinyl)alcohol matrix.

R. Rodrigues, I. A. Hummelgen

UFPR, Curitiba, Brazil

Carbon nanoparticles, in general, show a poor dispersion in aqueous solution, imposing difficulties for the production of homogeneous distributions of carbon nanoparticles dispersed in polymer matrixes, for example. Inhomogeneous dispersion of particles in a polymer lead to inhomogeneity of physical characteristics of the composite at the microscopic level and limitations in the preparation of homogeneous composite thin films for device applications. Inhomogeneity of the electrical conductivity, for example, impose serious constraints against device miniaturization, because it may cause a broad dispersion of performances of nominally equivalent devices produced with composite thin films. In the present work we obtained a homogeneous dispersion of undoped carbon spheres, N-doped carbon spheres and B-doped carbon spheres using hexadecyltrimethylammonium bromide (CTAB) as surfactant. The dispersion was prepared in a poly(vinyl alcohol) matrix, due to good elasticity and possibility of obtaining composite thin films deposited by casting onto interdigitated electrodes to prepare hydrostatic pressure sensors. These sensors are submitted to different pressures measuring the corresponding its conductance that shows an almost linear dependence on pressure, high sensitivity and good reproductibility.

Propriedades Dielétricas e Magnéticas da cerâmica AlFeO₃ sintetizada via moagem de altas energias

G. M. Santos, G. S. Dias, D. M. Silva, I. A. Santos, L. F. Cótica
UEM, Maringá, Brasil

O composto AlFeO₃ é um material multiferróico magnetoelétrico livre de metais pesados (lead-free). Sua importância científica e tecnológica está relacionada com o fato de apresentar piezoelectricidade, ferroelectricidade e ferrimagnetismo em baixas temperaturas. Neste trabalho investigamos a síntese, densificação, propriedades dielétricas e magnéticas do composto multiferróico magnetoelétrico AlFeO₃. Proporções estequiométricas dos precursores hematita (α -Fe₂O₃) e alumina (α -Al₂O₃) foram submetidas a moagem de altas energias e o pó resultante foi sinterizado em fluxo de oxigênio em 1450°C por 6 horas para a obtenção da cerâmica do composto AlFeO₃. Análises estruturais utilizando a difração de Raios X conjuntamente com o método de refinamento de Rietveld mostraram que o composto possui uma simetria ortorrômbica com grupo espacial Pna2₁. A caracterização morfológica (microestrutural) da cerâmica foi obtida utilizando-se a microscopia eletrônica de varredura. Para a determinação das propriedades multiferróicas da cerâmica de AlFeO₃ foram realizadas caracterizações dielétricas utilizando espectroscopia de impedância e magnéticas utilizando-se um magnetômetro SQUID e um magnetômetro de amostra vibrante.

Dependência da carga ôhmica no efeito magnetoelétrico extrínseco em cerâmicas ferromagnéticas

D. M. Silva, D. Z. Montanher, I. A. Santos, L. F. Cótica, J. R. D. Pereira
UEM, Maringá, Brasil

Recentes pesquisas acerca do efeito magnetoelétrico extrínseco em cerâmicas ferroelétricas em forma de disco tem demonstrado ser uma excelente alternativa aos materiais magnetoelétricos convencionais. Sendo assim, neste trabalho, discutiremos sobre as interações eletro-magneto-mecânica encontradas na cerâmica de titanato zircônato de chumbo (PZT) em forma de disco. Neste estudo, observamos um aumento da resposta magnetoelétrica do material quando a frequência do campo magnético oscilante aplicado e sintonizado com a frequência de ressonância piezoeletrica, observamos também uma forte dependência da resposta magnetoelétrica em função da carga ôhmica acoplada a essa cerâmica. Tal dependência proporciona uma maior diferença de potencial quanto maior for o valor da carga ôhmica. Além disso, a frequência de ressonância é afetada por essa carga, podendo ser ajustada por meio dela.

Método de auto-verificação do valor do parâmetro difusividade térmica medido pela técnica OPC

A. Somer, A. Gonçalves, A. Novatski, F. Camilotti, G. F. Costa, J. L. Gomes Jr., R. L. S. Piazzetta, C. Bonardi, G. K. Cruz
UEPG, Ponta Grossa, Brasil

O fenômeno fotoacústico surge quando uma luz periodicamente modulada incide sobre um material, este absorve tal radiação e produz uma variação de pressão na camada de gás adjacente a ele. Uma das técnicas que se utiliza desse fenômeno é a técnica fotoacústica de célula aberta (OPC), que permite a obtenção da difusividade térmica de um material. Os processos de difusão térmica e flexão termoelástica são os responsáveis pela geração do sinal fotoacústico. Neste trabalho, exploramos o potencial uso da técnica de OPC para estudar a eficácia desses processos na geração do sinal. Mais especificamente, observa-se que, se o processo de flexão termoelástica torna-se mais eficaz enquanto que a espessura da amostra é diminuído, esta informação pode ser usada para obter um método de auto-verificação do valor do parâmetro medido difusividade térmica. O método baseia-se na medição do parâmetro que dá a amplitude (C2) de flexão termoelástica como uma função da espessura da amostra (ls). A dependência esperada desse parâmetro com a espessura da amostra, de acordo com o modelo teórico, é $C2 \propto ls^{-3}$. Para isso foram produzidas cinco amostras de alumínio de diferentes espessuras: 330, 440, 465, 740 e 890 micrômetros de espessura. Os resultados para a amostra de alumínio tiveram uma dependência com $C2 \propto ls^{-2.8}$. Além disso foi obtido um bom valor de difusividade térmica, $(8,4 + -0.3)10^{-5}m^2/s$ sendo o valor teórico $8,610^{-5}m^2/s$.

Efeitos do crescimento de óxido de titânio por tratamento de oxidação térmico sobre a difusividade térmica em amostras de Ti, TiG2 e TiG5

A. Somer, A. Novatski, A. Gonçalves, F. Camilotti, G. F. Costa, A. Assman, J. L. Gomes Jr., R. L. Piazzetta, G. B. Souza, O. M. Cintho, C. Bonardi, G. K. Cruz
UEPG, Ponta Grossa, Brazil

Titânio puro comercial (Ti), Titanio grau 2 (TiG2) e titânio grau 5 (TiG5) possuem excelente biocompatibilidade e por isso são utilizados para diferentes tipos de implante. Esta biocompatibilidade se deve a camada de óxidos de titânio formada na superfície do metal a temperatura ambiente. Essa camada de óxido pode ser melhorada por um tratamento de oxidação térmico. O objetivo deste trabalho é avaliar o efeito da camada de óxido crescida pelo tratamento de oxidação térmico sobre o valor da difusividade térmica medidas pela técnica OPC (Open Photoacoustic Cell). Para isso foram preparados dois conjuntos de amostras os quais foram submetidos a diferentes tratamentos de oxidação, uma a 600°C e outro a 700°C, ambos por 12, 24, 36, 48 e 60 horas. Foi possível observar que a camada de óxido afeta fortemente o valor da difusividade térmica das amostras. No caso do tratamento térmico a 600°C a difusividade térmica de todas as amostras aumentou, enquanto que o tratamento térmico a 700°C diminui a difusividade térmica das amostras.

Flexible photovoltaic devices based on printed polymer nanoparticles dispersed on aqueous media

N. A. D. Yamamoto^{1,2}, L. S. Roman¹, A. C. Arias²

¹Physics Department, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, Brazil

²Electrical Engineering and Computer Sciences, University of California Berkeley, Berkeley, United States of America

Highly efficient organic devices based on the blend of an electron-donating and an electron-accepting material require fine control of the phase separation in order to improve the charge transport by creating electron acceptor-donor interfaces in the nano-scale. Aiming for the control of the film nanomorphology across large areas devices and toxic solvent free inks, we present organic photovoltaic devices (PVDs) based on polymer nanoparticles synthesized in aqueous media through the miniemulsion process. A new nanoparticulate bulk heterojunction blend of the polymer poly[2,6-(4,8-didodecylbenzo[1,2-b:4,5-b]dithiophene)-alt-5,5-(2,5-bis(2-butyl octyl)-3,6-dithiophen-2-yl-2,5dihydropyrrolo[3,4-c] 57pyrrole-1,4-dione)] (P(TBT-DPP)) with the fullerene indene-C₆₀-bisadduct (ICBA) were successfully miniemulsified in water by the method previously reported by Kietzke et al [1]. We have prepared dispersions with several concentrations of the P(TBT-DPP):ICBA blend ratios and tested as printed active layer in the PVDs. The devices were fabricated as follows: the nanoparticle aqueous dispersions were doctor blade coated in air onto PEN/PEDOT:PSS substrates whereas the PEDOT:PSS layer was also printed using the blade coating technique. Then a layer of C₆₀ (40 nm) and Al (100 nm) were thermally evaporated. These devices exhibit power conversion efficiencies up to 0.57% (AM1.5). The nanoparticle devices have shown improved performance when compared to the conventional P(TBT-DPP):ICBA blends blade coated in the same conditions. As indicated by the film morphology probed by Atomic Force Microscopy, this method has shown to be an efficient approach to impose a fine fixed length scale of phase separation and improved charge transport. In the conventional BHJ blends the phase separation is in the order of 500 nm, whereas in the nanoparticle films it is in the range of 80 - 90 nm which is the average size of the nanoparticles in the dispersions.

Outras Áreas

Estudo da faixa dinâmica em redes neurais excitáveis

F. S. Borges, E. L. Lameu, A. M. Batista
UEPG, Ponta Grossa, Brasil

Nossos sentidos tem limitações anatômicas e fisiológicas, portanto, qualquer relação quantitativa entre o estímulo e a sensação deve ter limites superiores e inferiores. A faixa dinâmica é a diferença entre o maior e o menor valor de uma quantidade variável. Experimentos psicofísicos em faixa dinâmica são relevantes para pesquisas sobre implantes cocleares em humanos. Verificou-se que há diferenças entre o ouvido normal estimulado acusticamente e o ouvido surdo estimulado eletricamente. Em um sistema neural realístico, há coexistência de sinapse excitatórias e inibitórias, o comportamento dessas sinapses são fundamentais para a compreensão de como os circuitos neurais produzem a função cognitiva. Neste trabalho, estudamos a dinâmica coletiva de redes neurais excitáveis com sinapses inibitórias e excitatórias em resposta a um estímulo externo. Investigamos a faixa dinâmica exibida por uma rede de autômatos celulares com sinapses químicas e elétricas onde os estímulos são modelados por uma função de Poisson e a resposta obtemos pela taxa média de disparos.

Representative elementary volume (REV) for soil porosity measurements through X-ray computed tomography

J. A. R. Borges¹, L. F. Pires¹, S. Passoni¹, F. A. M. Cassaro¹, R. J. Heck²

¹UEPG, Ponta Grossa, Brazil

²University of Guelph, Guelph, Canada

A representative elementary size (RES) corresponds to the volume, area or length of a sample, necessary to provide measurements which represent the whole. The computed tomography (CT) is suitable for measurements of RES of soil samples used to assess its physical properties. In this study, the representative elementary volume (REV) was evaluated for porosity (ϕ) measurements of samples of a Brazilian soil of clay texture, from data obtained via X-ray third generation CT. Images with 60 μm resolution were obtained from 5 soil samples. By using the program Image J, measurements of ϕ for 14 concentric sub volumes ranging from 0.3 to 58.2 cm^3 were carried out. For image processing the pores were subdivided in 3 size classes: small, medium and large. The following criteria were used in order to define REV: i) relative deviation of ϕ value between the last and each of the other volumes 7 – 11% (CV for ϕ measurements) and ii), that at least 3 consecutive volumes cannot present different ϕ values, using the variation criterion in item i. The results indicate the stabilization of the ϕ values to the 5 analyzed samples, in which 4 of them the REV was obtained in a 7% of variation to a volume of 42.8 cm^3 . In relation to the different size classes, ϕ stabilization was observed for big and small porous, for all the samples. However, for the medium ones, one sample was not stabilized and just one of them reached the REV at 7% of variation. The rest of them reached the REV at 8 and 9% to a volume of 42.8 cm^3 . This result can be explained by the subdivision of medium and big porous, mainly, when different volumes are selected in the sample.

Representative length intervals of samples to measure the soil mass attenuation coefficient

J. A. R. Borges, L. F. Pires, J. C. Costa
UEPG, Ponta Grossa, Brazil

Nuclear techniques such as computerized tomography (CT) and gamma-ray attenuation (GAT) have been widely applied to soil physical properties measurements. However, the sample used has to be of a certain size in order to represent the physical property of that soil in the field. In this context, analyses of the representative size of the samples are essentials due to the dependency of the physical properties with the size sample. The soil mass attenuation coefficient (μ_s) is an important parameter for CT and GAT analysis. When experimentally determined (μ_{es}), the use of suitable sized samples enable to determine it precisely, as well as to reduce measurement time and costs. This study investigated the representative elementary length (REL) of sandy and clayey soils for μ_{es} measurements. Two radioactive sources were employed (^{241}Am and ^{137}Cs), three collimators (2-4 mm diameters) and 14 thickness (x) samples (2-15 cm). Results indicated an ideal thickness interval of 12-14 and 2-4 cm for the sources ^{137}Cs and ^{241}Am , respectively. The application of the results

obtained from source ^{241}Am for sandy soil in representative elementary area (REA) evaluations for soil bulk density (ρ_s) measurements via CT, indicates that μ_{es} average value for $x > 4$ cm might induce to the use of samples with an unrepresentative size. As a consequence, ρ_s might be over or underestimated, generating inaccurate conclusions about the physical quality of the soil under study.

Statistical analysis applied to GVHD: pathways and genes expression

F. R. Brondani¹, E. M. Simão^{1,2}, E. G. Góes¹

¹Instituto de Matemática, Estatística e Física, Universidade Federal do Rio Grande, Rio Grande, RS, Brasil

²Programa de Pós Graduação em Nanociências - Centro Universitário Franciscano (UNIFRA), Santa Maria, RS, Brasil

Purpose: Graft-versus-host disease (GVHD) is an immunologically mediated inflammatory reaction, and remains a major cause of morbidity and mortality in patients undergoing allogeneic hematopoietic stem cell transplant. In addition, the role of various cells, pathways, and others factors associated to GVHD remains an issue. In this study, a statistical analysis was applied to GVHD in order to better delineate pathways and genes expression related to the development of the disease. Methods: The National Cancer Institute (NCI) Nature Interaction Pathway and Reactome were used as reference databases in order to study Class-I and II major histocompatibility complex (MHC), TNF activation, apoptosis and inflammation pathways related to GVHD. Transcriptome data were obtained using the Affymetrix Human Genome U133 Plus platforms GPL570. Relative activity and relative diversity were used to determine alterations in a specific pathway and, in such cases the fold change of each gene was applied. Analyses were conducted using Via Complex and Bioconductor packages. Results and Discussion: We observed alterations in the relative activity and relative diversity regarding to pathways associated to MHC-Class I. MRC1 was a gene located across the fold change, which contained significant alterations. This finding is important because this gene participates in cell recognition, as well as participates in the processes of neutralization of pathogens. The pathway related to the phosphorylation of CD3 and TCR zeta chains also was altered. This pathway is activated by the CD3 and TCR genes, which are related to the T-cells growth. The genes IL2 and CD69 showed high fold change. These findings are important because these genes are associated with cell activation (NK and T-Cells) and toxicity related to GVHD. Conclusion: Relative activity, diversity and fold change techniques applied to GVHD showed that MHC-Class I is the major pathways of this disease.

Analysis of the Effectiveness of Control Schemes in Neuronal Bursting Synchronization

F. F. Carvalho, R. L. Viana, C. A. S. Batista

UFPR, Curitiba, Brazil

The study of synchronization of complex networks has revealed interesting features, as a special case, the bursting synchronization of neuronal networks have been associated with diseases, like the rest tremor caused by Parkinson's disease. Since the synchronization of neuronal networks is related with diseases, to control such undesirable rhythms is a goal of great interest. In recent years techniques were developed to suppress bursting synchronization of neuronal networks, like Deep Brain Stimulation DBS and the Delayed feedback signal control. In this work we computationally simulated a network with 10.000 sites, each site representing a neuron. The dynamic behavior of a neuron was simulated with Rulkov's map, and the synchronization of the network is reached by coupling the neurons. The coupling used was the global coupling, in which each neuron is connected with each other. This coupling is obtained by adding a term in the Rulkov's map, proportional to the mean field produced by all neurons. Once the synchronization is warranted we are now interested in suppressing this synchronized state. Two different ways were tested to suppress the bursting synchronization, the first one is the most conventional method, a time-periodic external signal current, and the second one is the delayed feedback signal current. This work consisted in the analysis of the effectiveness of both methods employed. This procedure was repeated for a network that exhibits the small-world topology.

Uma Proposta Didática sobre a Experiência de Millikan

O. Cossi Jr, A. C. Mello, Y. Takahashi, S. Adam, J. A. Lenz, A. G. Bezerra-Jr
UTFPR, Curitiba, Brazil

Um aspecto importante no ensino de física é a inserção de experimentos relevantes relacionados à física moderna, isso aliado à utilização de atividades investigativas, baseadas em roteiros abertos, acessíveis a públicos amplos. Neste trabalho, propomos uma abordagem didática para a experiência de Millikan. Este experimento, originalmente realizado em 1911, possibilitou a determinação da carga elétrica elementar e encerra diversos aspectos relacionados à história da Física e ao método científico. Na atividade experimental, gotas microscópicas eletrizadas são borrifadas entre as placas de um capacitor, no qual um campo elétrico atua. Deste modo, surge uma força elétrica que age sobre as gotas. Uma chave permite alternar o potencial das placas do capacitor, e, portanto, o sentido do movimento das gotas. Realizando algumas dezenas de medidas, com o auxílio de câmera-filmadora, determina-se que a carga das gotas é um múltiplo inteiro de um valor: a carga elementar do elétron. Dada sua complexidade, trata-se de um experimento que não é de fácil acesso a estudantes e professores do ensino médio e mesmo de universidades que dispõe de menos recursos. O presente trabalho tem por objetivo apresentar uma abordagem didática desta experiência mediada pelo software livre Tracker. O Tracker é um software que permite realizar videoanálise de movimentos quadro a quadro. Nossos vídeos podem ser utilizados em atividades demonstrativas de modo a que o experimento seja acessível à comunidade. Com a utilização do Tracker analisamos vídeos de gotas se movendo sob diferentes valores de tensão, e os resultados obtidos foram disponibilizados em uma plataforma virtual, juntamente com um roteiro de uso, que estudantes e professores de física poderão utilizar para ter uma forma de acesso ao experimento de Millikan. Este trabalho faz parte de uma iniciativa voltada à disseminação e ao uso de ferramentas computacionais no ensino-aprendizagem da Física.

Is the nocturnal atmospheric boundary layer chaotic?

F. D. Costa¹, A. C. Acevedo²

¹UNIPAMPA - Campus Alegrete, Alegrete, Brazil

²UFSM, Santa Maria, Brazil

Frequently, during calm nights, the thermal stratification is intense enough to dampen the turbulence perturbations almost entirely. In such case, the surface decouples from the upper boundary layer and mixing may occur intermittently, during episodes of variable, non-periodic duration and amplitude. In a recent study, the authors proposed a simplified model that was able to reproduce the non-periodic nature of the intermittent turbulent events in the decoupled stable boundary layer. The model is based on solutions to prognostic equations for the wind components, air and ground temperature and turbulent kinetic energy (TKE) at a vertical grid composed of 3 or more vertical levels in the atmosphere and one level at the surface. In the present paper, that model is investigated from a dynamical system approach, aiming at answering the question whether the stable boundary layer may be realistically represented by a chaotic set of equations. The results show that for some sets of external conditions, the model solutions are given by period-3 periodic time series, a sufficient condition for chaos existence. Solutions are shown to be highly sensible to the initial conditions, evidenced by the fact that the model has a positive largest Lyapunov exponent for some ranges of external parameters, and these results allow affirming that the system is, indeed, chaotic. It is shown that the system complex behavior is originated by a periodic oscillation at the lowest vertical atmospheric level, which becomes non-periodic as it propagates upwards by the turbulence transport term of the TKE prognostic equation. Then, the same term causes TKE propagation downward and a consequent non-periodic resulting signal at the lowest atmospheric level, where the initial periodic mode is still present.

Equivalência Dinâmica entre Modelos Neurais em Neurociência

F. A. S. Ferrari, R. L. Viana
UFPR, Curitiba, Brazil

Desde 1937 sabe-se que os neurônios são capazes de transmitir e propagar sinais elétricos e ainda em 1952 Hodgkin e Huxley propuseram o primeiro modelo para descrever a dinâmica neural baseado em resultados

experimentais obtidos a partir de neurônio de lulas. A partir disso diversos modelos com e sem evidências experimentais têm sido desenvolvidos. O propósito deste trabalho é mostrar que apesar de alguns modelos serem essencialmente fenomenológicos o estudo das propriedades dinâmicas pode apresentar propriedades globais, contribuindo significativamente com a neurociência. Neste trabalho apresentaremos um comparativo entre dois modelos, o modelo de Huber-Braun, com evidências experimentais e o modelo de Rulkov, essencialmente fenomenológico. Observa-se que ambos os modelos podem apresentar propriedades similares, esta similaridade é o que permite a construção de modelos simples para o estudo da dinâmica cerebral. E nos permite a partir de modelos simples inferir resultados que podem contribuir inclusive com o diagnóstico, prevenção e impacto de doenças neuro-degenerativas no funcionamento cerebral.

Definition of representative areas for measurement of soil bulk density of samples collected in volumetric rings by using 2D tomographic images

T. R. Ferreira, L. F. Pires

UEPG, Ponta Grossa, Brazil

A representative area interval (RAI) to be adopted in soil bulk density (d_s) measurements, for samples collected in cylinders, through the computed tomography (CT) technique was defined in this work. A first generation CT equipped with a ^{241}Am source was used. Twelve samples from two different soils in texture were analyzed (red-yellow latosol RYL and red nitosol RN). Measurements of d_s were carried out by using the CT and the volumetric ring (VR) methods. From CT data, concentric matrices have been selected with areas varying from 1.1×1.1 to $40.7 \times 27.5 \text{ mm}^2$. For the definition of RAI, the following criteria were utilized: 1) d_s average value relative deviation (RD) between the last and each of the remaining areas not superior to 10, 8, 6, 4 e 2%; 2) d_s average value RD between each area and the d_s obtained for VR equally not superior to criteria adopted in (1); and 3) that at least three consecutive areas cannot present different RD values using the variation criterion adopted in (1) and (2). Since d_s measurements by VR presented CV of 4% (RYL) and 2% (RN), such values were adopted as reference to determine RAI. Thus, based on the results of this work the selection of areas between $16.5 \times 16.5 \text{ mm}^2$ - $27.5 \times 27.5 \text{ mm}^2$ (RYL) and $25.5 \times 25.5 \text{ mm}^2$ - $29.7 \times 27.5 \text{ mm}^2$ (RN) inside CT images provide representative d_s values for the soils here studied.

Sincronização em Redes Neurais com Acoplamentos Elétricos e Químicos.

E. L. Lameu¹, F. S. Borges¹, A. M. Batista¹, J. D. Szezech Jr.¹, R. L. Viana²

¹UEPG, Ponta Grossa, Brasil

²UFPR, Curitiba, Brasil

Os recentes avanços tecnológicos tem possibilitado a análise da estrutura e dinâmica do sistema nervoso como, por exemplo, o comportamento de neurônios, suas interações, algumas desordens neurológicas e os mecanismos que estão por trás do seu funcionamento. O transporte de sinais elétricos no cérebro ocorre através de sinapses elétricas e químicas, através de variações do potencial de membrana entre os neurônios conectados entre si, por meio de seus axônios e dendritos. Podemos aproximar a organização topológica e as ligações entre os neurônios com uma rede, onde os nós são os neurônios e as arestas são os axônios e dendritos. Neste trabalho estudamos uma rede neuronal onde a dinâmica dos neurônios é descrita pelo modelo fenomenológico dos Mapas de Rulkov. Consideramos acoplamentos do tipo elétrico e químico(excitatórios e inibitórios) e avaliamos os intervalos dos parâmetros de acoplamento onde o sistema apresenta sincronização.

Radiation dose from breast imaging studies: determination of the absorbed dose by thyroid by using Monte Carlo-PENELOPEM. Leidens¹, P. Nicolluci², E. G. Goes¹¹Instituto de Matemática, Estatística e Física, Universidade Federal do Rio Grande²Departamento de Física, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto

Purpose. The main motivation to the radiographic examination of the breast is the early detection of breast cancer. However, the absorbed dose from these examinations has not been well established. A study was performed in order to obtain an estimate of the dose absorbed by thyroid using Monte Carlo-PENELOPE method and a phantom. Methods. Monte Carlo-PENELOPE toolkit [1], that included a mathematical anthropomorphic phantom, was used to simulate the conditions present in mammography by using screen-film system. The breast was simulated under compression considering the presence of adipose tissue and crano-caudal view. The simulation was carried out using x-rays of 28 keV [2]. The relative dose in the thyroid was calculated with respect to the dose absorbed by the breast. Results. According to the methodology used here, the thyroid received a relative dose of 0.062%. Conclusions. The radiation dose absorbed by the thyroid gland from breast imaging studies is considered low when compared to the dose absorbed by the breast. On the other hand, recent reports have suggested that an increase in the incidence of thyroid cancer in women could be due to exposure to x-rays during breast imaging studies. Thus, our findings may be important in epidemiological studies concerning the use of ionizing radiation.

[1] Sechopoulos I, Hendrick R E: Mammography and the Risk of Thyroid Cancer. American Roentgen Ray Society. AJR 2012; 198:705-707. DOI: 10.2214/AJR. 11.7225.

[2] M G DAVID, E J PIRES, M A BERNAL, J G PEIXOTO AND C E DEALMEIDA: Experimental and Monte Carlo-simulated spectra of standard mammography-quality beams. The British Journal of Radiology, 85 (2012), 629-635. DOI: 10.1259/bjr/73088072.

One-dimensional chemical coupling for Rulkov neurons

R. L. Viana and I. T. Martynetz

UFPR, Curitiba, Brazil

The Rulkov model for neurons is widely used to describe behavior of neurons. When we have a network of one-dimensional neurons, they interact with others through of synapses electric and chemical. This work will show how neurons synchronize from a coupling of a given chemical substance. And how can be determined the phase of bursting neurons, and what their critical value for the transition from synchronized to non- synchronized, using the order parameter.

Study of structural changes in Paracoccidioides brasiliensis infected lung tissue by FTIR photoacoustic spectroscopyG. R. Morais, F. Sato, M. L. Baesso, A. N. Medina, E. M. Morato, L. Hernandes, T. I. E. Svidzinski
UEM, Maringá, Brazil

This study evaluated physical, chemical and morphological changes in lungs of mice infected with Paracoccidioides brasiliensis. The animals were inoculated with 0.1 mL of fungal suspension of the P. brasiliensis 18 isolate and were euthanized 1, 2, 4 and 8 weeks after inoculation. The upper left lobe of the lung was isolated, fixed and processed for paraffin embedding. The sections were stained with H&E for histopathological study, with Gomori-Grocott to locate and identify the fungus, and with TUNEL immunostaining to detect the occurrence of programmed cell death. The lower and middle right lobes were analyzed by Fourier Transform Infrared Photoacoustic Spectroscopy (FTIR-PAS) to investigate physical and chemical features of the infected lungs. The results showed that lungs infected by P. brasiliensis underwent structural changes that varied according to the time period analyzed, and that changes in the absorption bands of different chemical groups resulted from these morphological changes. The results suggest that the combination of FTIR-PAS spectroscopy with morphological evaluation is an effective procedure for the study of paracoccidioidomycosis, one of the most important systemic mycoses that can damage the lung architecture and consequently impair the respiratory function.

X-ray microtomography as a tool to characterize the soil macropore distribution

S. Passoni, I. F. Pires, J. A. R. Borges, R. J. Heck
UEPG, Ponta Grossa, Brasil

Micromorphological analysis represents an important tool to characterize soil structure. Through this technique, it is possible to obtain information on the shape, volume and number of macropores. This study presents a three dimensional (3D) characterization of shape and number of pores of soil samples submitted to the non-tillage system. For that, a third generation X-ray microtomograph equipped with a detector of the plain type was employed. The voltage applied to the X-ray tube was 120 kV and the current 80 mA. The soil samples analyzed were collected at three different depths (0-10, 10-20, 20-30 cm). Results obtained enabled qualitative (images) and quantitative (3D) analyses of the soil structure revealing the potential of the microtomographic technique and enabling to verify differences in the soil macroporosity along the different depths. The macroporosity was 5.14% in the 0-10 cm, 5.10% in the 10-20 cm and 6.64% in the 20-30 cm layers. The macroporosity of unclassified pores (UN) was 0.3% (0-10 and 10-20 cm) and 0.4% (20-30 cm) and of equant pores (EQ) it was 0.01% at the three depths under analysis. This result has shown that the depth 0 to 20 cm presents the same effect of this system management on soil structure. The highest amount of the macroporosity value is related to the unclassified porous class, which is an indication of great connectivity among pores.

Network of networks with modified Hodgkin-Huxley equations

T. L. Prado, S. R. Lopes
UFPR, Curitiba, Brazil

The study of complex networks are fundamental for the comprehension of neuronal behaviour. Dynamical effects emerge from the interaction of individual dynamics from each neuron, such as synchronization phenomena, self-organized criticality, chaotic bursts and many others. In this work we propose to study synchronization from network of networks with thousands of individual neurons, each of them a Huber-Braun set of equations, that is modified Hodgkin-Huxley equations for thermally sensitive neurons, and analyse the evolution of such large system. The internal connections will respect the small-world rules and there will be an external adjacency matrix, with small-world properties and variable number of most near connections. There is a lot of important complex effects that we study and analyse with the complex order parameter from kuramoto, recurrence quantification analysis and spacial visualization of time series evolution. In the end there is a brief evaluation of our first results and future analysis.

Análises mineralógicas e elementar das frações granulométricas de horizontes de solos coesos por técnicas espectroscópicas, difração de Raios X e método de Rietveld

L. V. Prandel, S. C. Saab, A. M. Brinatti, N. F. B. Giarola
UEPG, Ponta Grossa, Brasil

A caracterização de propriedades mineralógicas do solo por técnicas espectroscópicas e difração de raios X é essencial para o entendimento de diversas práticas agrícolas e a solução de problemas ambientais. A espectroscopia de Fluorescência de Raios X (FRX) é uma técnica elementar não destrutiva, a espectroscopia no Infravermelho (IR) revela a presença de minerais, e a Difração de Raios X (DRX), juntamente com o método de Rietveld (MR) identifica e quantifica minerais em solos. Dessa forma, utilizando-se dessas técnicas foi possível caracterizar solos tais quais Argissolos e Latossolos Amarelos e Acinzentados da região dos Tabuleiros Costeiros (Nordeste e Sudeste do Brasil), os quais apresentam propriedades coesas, isto é, elevado grau de dureza quando secos e friáveis quando úmidos. Cinco amostras de solos coesos foram submetidas a processos de dispersão e fracionamento físico por sedimentação. Essas amostras e suas frações granulométricas foram analisadas por DRX-MR, IR e FRX. Resultados de DRX-MR revelaram a presença majoritária de caulinita (50 a 60 %) e halositita (20 a 30 %) na fração argila, predominância de quartzo nas frações areia (acima de 99 %) e silte (40 a 95 %). Minerais como Goethita, Gipsita, Anatásio e Rutílio apareceram nas frações silte e argila em menor quantidade (1 a 8 %). Esses resultados corroboraram com os espectros obtidos pela técnica de IR. De maneira geral, óxidos como SiO_2 e Al_2O_3 , encontrados nas frações argila e silte por FRX estão relacionados com a presença de Caulinita, Halositita e Gipsita; o Fe_2O_3 (inferior a 7 %) deve-se a Goethita; a presença de TiO_2 (inferior a 5 %) deve-se principalmente ao Anatásio. Nas frações areia, foi constatada uma grande quantidade

de SiO₂ e isso se deve a predominância de Quartzo. Assim, a técnica de DRX-MR identifica e quantifica os minerais destes solos complementando resultados obtidos por técnicas espectroscópicas.

A análise de redes sociais na literatura

M. A. Ribeiro¹, S. E. S. Pinto^{1,2}

¹UEPG, Ponta Grossa, Brasil

²ICSMB, Aberdeen, Scotland

Rede social é uma estrutura composta por pessoas ou organizações, conectadas por um ou vários tipos de relações, que partilham valores e objetivos comuns. Um exemplo são as rede sociais virtuais (facebook, linkdin, orkut e etc). A ideia de rede social começou a ser usada há cerca de um século, para designar um conjunto complexo de relações entre membros de um sistema social a diferentes dimensões, desde a interpessoal à internacional. Uma característica das redes sociais é a mudança da sua topologia. Portanto, estudos topológicos sobre rede sociais corroboram a elucidação do comportamento dos indivíduos que se inserem na rede. Com base nestas definições, este estudo teve por objetivo a construção da rede complexa formada pelos personagens do livro "O fio da navalha", do autor W. Somerset Maugham. O enredo relata a história de um ex-soldado de guerra que viaja pelo mundo conhecendo pessoas e costumes, formando assim sua própria rede social. Formada a rede, calculou-se a distribuição de grau, assortatividade, transitividade, componente gigante, as medidas de centralidade de intermediação de aresta e vértice para caracterização da rede e as comunidades, auxiliando na caracterização da rede como uma rede social real de interações de indivíduos.

Sobre o complexo e a ncomplexidade da Cama Limite Noturna

D. O. Santos

IFAM, Manaus, Brasil

Neste artigo, será abordado a complexidade da camada limite noturna bem como a utilização da equação da energia cinética turbulenta. Será analisado cada termo da equação para observação da complexidade causada pelo caos. Para entendermos melhor o acoplamento da Cama Limite Noturna (CLN), que auxiliam no processo de comportamentos desconhecidos assim como os fatores que influenciam a temperatura estável da Amazônia. Se caso as imprevisibilidade da deformação da superfície encontrada nos corpos rígidos no estado físico gasoso, os gases que formam a atmosfera circulariam de forma totalmente diferente ao movimento das nuvens observado entorno do planeta.

Aplicação da espectroscopia de lente térmica para a avaliação da fotoestabilidade de óleos vegetais

E. L. Savi¹, N.G.C. Astrath¹, M. L. Baesso¹, L. C. Malacarne¹, P. T. Matumoto-Pintro¹, C. P. Croge²

¹UEM, Maringá, Brazil

²UFPR, Curitiba, Brazil

Os óleos vegetais são conhecidos por serem instáveis quando expostos a luz e, consequentemente, estão sujeitos a fotoreações químicas. Assim, o presente trabalho analisa a fotoestabilidade de óleos de soja em função do tipo de antioxidante que possuem, utilizando a técnica experimental de Espectroscopia de Lente Térmica (ELT) com feixe duplo e descasado. As amostras de óleo foram preparadas com antioxidante sintético, sem antioxidante e com antioxidante natural advindo da semente da uva. Para complementar as informações necessárias das amostras no processo de avaliação teórico, são realizadas outras medidas de Espectroscopia Óptica. Os experimentos de ELT foram efetuados em temperatura ambiente, variando a potência e o comprimento de onda do feixe de excitação. Os transientes de ELT mostraram o efeito fotoquímico e o efeito de difusão de massa, quando as amostras são expostas a comprimentos de onda próximos ao UV. Os dados obtidos experimentalmente são modelados numericamente, e as propriedades físicas e químicas das amostras são determinadas quantitativamente. A partir da determinação da seção de choque de reação química, foi possível comparar a fotoestabilidade dos óleos de soja para diferentes antioxidantes. Os resultados apresentados aqui demonstram que a espectroscopia

de lente térmica resolvida no tempo pode ser usada como uma ferramenta analítica muito sensível para a medida quantitativa de processos de reação químicos induzidos via laser em soluções.

SESSÃO DE PÔSTERES 2

Astronomia/Cosmologia

A Correlação entre Dispersões de Velocidades do [Fe II] Usando Espectroscopia de Campo Integral

Marina Bianchin, Rogemar André Riffel

UFSM, Santa Maria, Brasil

Galáxias ativas apresentam emissão nuclear mais intensa que as galáxias normais, seu espectro eletromagnético não pode ser explicado pela emissão devida a estrelas. O modelo unificado é uma representação esquemática dos principais constituintes de um Núcleo Ativo de Galáxia (AGN), buraco negro supermassivo (BNS), disco de acreção (responsável pela intensa emissão nuclear), toróide de poeira, as regiões de formação de linhas largas e a de linhas estreitas. Essa classificação não é relativa à morfologia da galáxia hospedeira, mas apenas a região nuclear. Os AGNs podem ser divididos em classes, que levam em conta o ângulo de visada em relação ao observador e a luminosidade nuclear. Um aspecto extremamente importante no estudo das Galáxias Ativas é a determinação da massa do BNS, pois vários fenômenos físicos dependem dela. Esse parâmetro pode ser obtido usando a relação $M - \sigma_*$. Uma relação empírica entre a dispersão de velocidades das estrelas do bojo de certa galáxia e a massa do BNS. Analisamos duas galáxias com núcleo Seyfert 2 (emissão não tão intensa e observadas paralelamente ao toróide) e barradas, Mrk 1066 e Mrk 1157. Estas foram escolhidas pois são as únicas para as quais temos medidas simultâneas de $\sigma_{[FeII]}$ e σ_* . Plotamos os gráficos dessas duas quantidades para cada uma das galáxias usando o software IDL. A rotina r-correlate fornece o coeficiente de correlação R, quanto mais próximo de 1 maior é correlação entre as grandezas analisadas. Neste caso, encontramos para Mrk 1066 $R = 0.23$ e para Mrk 1157 $R = 0.10$, ambas apresentam uma baixa correlação entre $\sigma_{[FeII]}$ e σ_* . Os resultados encontrados, apesar a baixa correlação, coincidem com aqueles já apresentados para uma amostra maior de galáxias barradas.

Symmetry Energy and the Strangeness Content of a Neutron Star

R. Cavagnoli¹, C. Providência², D. P. Menezes³

¹ UFPEL, Pelotas, Brasil

² Universidade de Coimbra, Coimbra, Portugal

³ UFSC, Florianópolis, Brasil

The search for constraints to the huge variety of equations of state used to describe neutron star matter is one of the main goals in nuclear astrophysics. In this work, we study how the density dependence of the symmetry energy and its slope parameter affects the equations of state (EOS) of asymmetric nuclear matter and the strangeness content of neutron stars. The study is performed using relativistic mean field (RMF) models. Using the $\omega - \rho$ vector meson interaction, in different RMF models, we also investigate its effect on the neutron stars equation of state, hyperon creation and the direct Urca process. It is found that charged (neutral) hyperons appear at smaller (larger) densities for smaller values of the slope parameter L of the symmetry energy. A linear correlation between the radius and the strangeness content of a star with a fixed mass is also found.

Gás de Chaplygin obtido espontaneamente de ação generalizada através da simetria de Noether.

L. G. Collodel, G. M. Kremer

UFPR, Curitiba, Brazil

Neste trabalho, investigamos um modelo de Universo homogêneo, isotrópico e plano; composto por matéria, radiação e energia escura. Esta é representada por um campo taquiônico, o qual tem um acoplamento não-mínimo com o escalar de curvatura. Adotamos a abordagem de Palatini, considerando a conexão-afim como sendo independente da métrica. Restringindo a dinâmica àquela que apresenta uma simetria de Noether, obtemos tanto o potencial de auto-interação do campo taquiônico, como sua função de acoplamento, naturalmente; sem enunciar-las de forma *ad-hoc*. Como resultado, a energia escura comporta-se como um gás de Chaplygin, cuja evolução encontra-se na natureza dinâmica de um campo taquiônico de potencial constante. As diferentes

soluções (incluindo a constante cosmológica), correspondentes à diferentes valores do potencial, são confrontadas com atuais valores de parâmetros observacionais.

Evolução Morfológica de Galáxias

J. P. Cougo, F. Ferri
FURG, Rio Grande, RS

O presente trabalho tem por objetivo apresentar as ferramentas básicas que serão usadas para estudar a evolução morfológica das galáxias em seus diversos ambientes ao longo da evolução do Universo, a partir de dados de grandes surveys como o J-PAS/Pau-Brasil e o Dark Energy Survey. A análise será baseada em parâmetros morfológicos medidos nas imagens, através de fotometria com aberturas, ajuste de elipses, ajuste de funções de brilho bidimensionais, momentos estatísticos bidimensionais e outros. De forma a auxiliar esta análise usaremos técnicas de deconvolução e supressão de ruídos baseadas na transformada de wavelets. Os algoritmos serão implementados de forma paralela de modo a permitir o processamento do volume esperado de dados em tempo hábil, utilizando tecnologia CUDA e OpenMP. Em resumo queremos processar um grande número de galáxias automaticamente, identificando as fontes, deconvoluindo as imagens, suprimir ruído, analisando as distribuições de brilho a fim de obter os parâmetros físicos de cada objeto. Deste modo queremos entender como as galáxias evoluem morfológicamente, quando surgem suas diferentes estruturas morfológicas e o que podemos inferir do seu estado dinâmico a partir disto. No presente estágio, apresentaremos as ferramentas básicas, o fluxo de trabalho, e a análise de casos teste a partir de surveys semelhantes com dados já disponíveis.

Física das Partículas Elementares e Campos

Determinação da distribuição de glúons do próton na fotoprodução de méson vetoriais no Grande Colisor de Hadrôns

L. A. S. Martins, W. K. Sauter, V. P. Gonçalves
Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas

O estudo da estrutura interna dos prótons e nêutrons atrai a atenção da comunidade da Física de altas energias a muitos anos. Na última década, o colisor HERA estudou em detalhe interações elétron-próton no regime de altas energias, fornecendo uma imagem mais precisa do conteúdo de quarks e glúons no interior do próton. Os dados de HERA permitiram vincular satisfatoriamente o conteúdo de quarks de mar, mas a incerteza presente em glúons ainda é grande, como pode se verificar ao compararmos as previsões advindas das distintas parametrizações partônicas, realizadas por diferentes grupos que se especializaram na realização de ajustes globais aos dados experimentais. Tal aspecto e o início de funcionamento do LHC motivam o estudo de novos observáveis que permitam vincular com precisão esta distribuição no regime de altas energias. Neste trabalho estudamos a fotoprodução de mésons vetoriais (J/ψ e Υ) em colisões elétron-próton e em interações coerentes no LHC, considerando diversas parametrizações existentes para as distribuições de glúons. Considerando que a seção de choque γp e a distribuição de rapidez para o processo pp são proporcionais ao quadrado da função de distribuição de glúons no próton, a diferença entre as distintas parametrizações existentes na literatura são amplificadas. Nossos resultados demonstram que este processo pode ser utilizado para vincular o comportamento da distribuição de glúons discriminando entre essas parametrizações usando interações coerentes.

Física dos Fluidos, Plasmas e Descargas Elétricas

Propriedades Anômalas em um Modelo Puramente Repulsivo

A. A. Bertolazzo, M. C. Barbosa
UFRGS, Porto Alegre, Brazil.

A água é a substância mais importante para a vida. Suas propriedades diferem de líquidos normais em faixas de temperatura propícias para a preservação da vida e uso industrial. Já foram descobertas 69 destas propriedades anômalas na água, mas o que a torna tão diferente de líquidos normais ainda é um enigma. Muitos modelos foram propostos afim de entender os principais mecanismos que levam a anomalias. Entretanto, estes não conseguem prever todas as propriedades da água, tanto qualitativamente como quantitativamente e a eficiência de cada um destes modelos acaba se restringindo a uma faixa pequena de temperatura. Acredita-se que a presença de ligações de hidrogênio em água seja o principal fator para a existência de anomalias. Assim, interações atrativas são consideradas elemento fundamental para este fenômeno em modelos de rede. Neste trabalho analisamos um modelo puramente repulsivo em uma rede tridimensional. Utilizando o método de Monte Carlo e apresentamos algumas propriedades anômalas como as presentes em água neste modelo.

Efeitos Transversais Não Paraxiais na Propagação de Pulses Eletromagnéticos Não Lineares em Plasmas

Alexandre Bonatto^{1,2}, Roger Pizzato Nunes², Cristian Bonatto³, Renato Pakter², Sergio Roberto Lopes¹, Felipe Barbedo Rizzato²

¹ UFPR, Curitiba, Brasil

² UFRGS, Porto Alegre, Brasil

³ UFPel, Pelotas, Brasil

Neste trabalho estudamos a interação fracamente não linear entre trens de pulses eletromagnéticos e campos de carga espacial (*space-charge*) em sistemas de laser-plasma. Direcionamos a análise aos regimes que evoluem com a coordenada no referencial dos pulses, mas sem fazer uso da aproximação paraxial ou da propagação dos pulses na velocidade da luz (aproximação do tipo *underdense*). Com isso, construímos um modelo que nos permite investigar regimes nos quais as escalas transversal e longitudinal dos pulses são comparáveis. Analisamos regimes ressonantes e não ressonantes de excitação de ondas de *space-charge*. Em ambos os casos, com o auxílio de estimativas analíticas e simulações numéricas, examinamos até onde trens de pulses eletromagnéticos podem se propagar antes de serem afetados pelos efeitos transversais destrutivos.

Sincronização caótica no oscilador Colpitts

R. C. Bonetti¹, A. M. Batista²

¹ Pós-Graduação em Ciências, UEPG, Ponta Grossa, Brazil

² UEPG, Ponta Grossa, Brazil.

Atualmente muitos esforços no sentido de desenvolver osciladores caóticos para a aplicação em sistemas de comunicação tem destacado a necessidade do entendimento dos fenômenos não-lineares exibidos por certos osciladores eletrônicos. Deste modo, a teoria de bifurcações, análises qualitativas, sincronismo e fluxo em sistemas não-lineares desempenham papel importante para este entendimento. Há uma clara necessidade de caracterizar o comportamento complexo exibido por osciladores eletrônicos, entre eles, podemos citar o oscilador Colpitts, que é um circuito baseado num oscilador indutor-capacitor que foi projetado por Edwin Henry Colpitts. É um oscilador de alta frequência que apresenta em sua saída um sinal com frequência determinada. O oscilador Colpitts exibe um rico comportamento dinâmico quando certos valores dos parâmetros do sistema são variados. Neste trabalho analisamos o comportamento dinâmico do oscilador Colpitts variando os parâmetros do sistema, relacionados a fenômenos não-lineares, tais como, bifurcações, sincronismo e regimes caóticos, demonstrando assim que a análise das bifurcações pode ser utilizada como uma ferramenta para o circuito exibir comportamento caótico e que numa configuração mestre-escravo dependendo dos parâmetros os circuitos sincronizam.

Movimento de Deriva no Plasma de Fusão

R.S. Oyarzabal, J.D. Szezech Jr, A.M.Batista

¹ UEPG, Ponta Grossa, Brazil

Nas bordas do plasma confinado em um tokamaks ocorre o transporte radial de partículas. Neste trabalho estudamos o transporte de partículas através do modelo proposto por Horton¹ e estendemos a descrição de advecção caótica para o movimento de deriva de partículas em plasmas de fusão. Consideramos o movimento de deriva $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ de uma partícula carregada em um tokamaks devido a presença de uma ou mais ondas de derivas. Para uma onda, o sistema é integrável em todas as trajetórias do espaço de fase. Estuda-se a dinâmica do sistema de acordo com o parâmetro de confinamento do plasma em um tokamaks U . Para $U = 0$ todas as órbitas são fechadas. Para $0 < U < 1$ órbitas fechadas e abertas e para $U > 1$ todas as órbitas são abertas. Para duas ondas inicia-se o caos no espaço de fase e o sistema já não é integrável. Iremos estudar a advecção caótica neste modelo para entender o comportamento do transporte de partícula no plasma de fusão.

¹ W. Horton. Plasma Physics and Controlled Fusion 27, 937 (1985).

Teoria de turbulência fraca para feixes de alta intensidade.K. Pascoal¹, J. Pavan¹, R. Gaelzer²¹ UFPel, Pelotas, Brazil² UFRGS, Porto Alegre, Brazil

A interação entre um feixe de elétrons e o plasma ambiente é de fundamental importância em Física de plasmas, tanto no estudo de plasmas de laboratório quanto de plasmas espaciais e astrofísicos. A Teoria de Turbulência Fraca consiste em uma fórmulação empregada para descrever a interação entre as partículas e ondas de um sistema feixe-plasma. Essa teoria é estritamente válida quando o plasma é fracamente instável, o que para um sistema feixe-plasma corresponde a considerar feixes de baixa intensidade. O presente trabalho se propõe a estender a validade da Teoria de Turbulência Fraca para descrever fenômenos envolvendo feixes de alta intensidade. Especificamente, a relação de dispersão é modelada de acordo com sua solução numérica e incorporada na determinação dos termos quase lineares e dos termos não lineares de acoplamento de três ondas. Os resultados da evolução temporal de ondas e partículas obtidos com essa abordagem são apresentados e comparados a simulações PIC.

Pseudo-molecular approach for the elastic constants of nematic liquid crystals interacting via anisotropic dispersion forcesP. S. Simonario¹, F. C. M. Freire¹, L. R. Evangelista¹, R. Teixeira de Souza²¹ UEM, Maringá-PR, Brazil² UTFPR, Apucarana-PR, Brazil

The bulk as well as the surface-like elastic constants of a nematic liquid crystal are calculated for an ensemble of particles interacting via anisotropic dispersion forces using the pseudo-molecular method. The geometrical anisotropy of the molecules is also taken into account in the calculations by choosing a molecular volume of ellipsoidal shape. Analytical expressions for the elastic constants are obtained as a function of the eccentricity in the molecular volume shape. The method allows one to explore the dependence on the molecular orientation with respect to the intermolecular vector by analysing the magnitude and the behaviour of macroscopic elastic parameters defining the nematic phase.

Numerical simulation of rarefied gas flow through a thin orifice based on the *ab initio* potential

J.L.Strapasson, F.Sharipov

UFPR, Curitiba, Brazil

Rarefied Gas flow of a noble gas through an thin orifice is studied on basis of *ab initio* potential in order to understand the influence of potential on flow rate and flowfield.

Aerotermodinâmica de veículos espaciais na reentrada atmosférica

J.L.Strapasson, F.Sharipov

UFPR, Curitiba, Brazil

Estudo de aerotermodinâmica de satélite de reentrada utilizando simulação direta de Monte Carlo.

Física da Matéria Condensada**Kinetic Energy Density induced by high magnetic fields in Bi-2212 single-crystal**Moises Leonardi de Almeida¹, Paulo Pureur¹, Fabio Teixeira Dias², Valdemar das Neves Vieira²¹UFRGS, Porto Alegre, Brazil²UFPel, Pelotas, Brazil

We report on systematic field-cooled and zero field-cooled magnetization experiments in a $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8-\delta}$ (Bi-2212) single crystal with the purpose of studying the magnetically induced kinetic energy density (E_k). The Bi-2212 single crystal was prepared using a self-flux method [1]. The magnetization measurements were made using a superconducting quantum interference device magnetometer (SQUID). The method consisted in first cooling down the sample to temperatures below the critical temperature in zero field (ZFC). Fields within the range 10-50 kOe were then applied along the crystalline c-axis. Subsequently, the magnetization was measured while cooling the sample back to low temperatures (FCC) in the same field. The measurements carried out according to the ZFC-FCC protocol allow the determination of the temperature interval where the magnetization behaves reversibly.

The field-induced kinetic energy is associated with the currents around Abrikosov vortices. This energy is obtained from magnetization measurements through the expression $E_k = -\vec{M} \cdot \vec{B}$, proposed theoretically by M. Doria [2], where \vec{M} and \vec{B} are the magnetization and the induction field, respectively.

This study is limited to the temperature region where the pinning effects are negligible and the magnetization is reversible; this region extends from nearly below the critical temperature down to the irreversibility temperature T_{irr} .

The obtained results allow the estimation of the upper critical field and are in accordance to the expectations of the Abrikosov theory for type-II superconductors [3].

[1] S. Kishida et al. Journal of Crystal Growth 205, 284-288 (1999).

[2] M. Doria. Journal of Superconductivity and Novel Magnetism 22, 235-238 (2009).

[3] M. Tinkham. Introduction to Superconductivity, (1996).

Oxidação de Nanofios de InP: um estudo de primeiros princípiosMe. Mailing Berwanger¹, Dr. Paulo Cesar Piquini², Dra. Cláudia Lange dos Santos²¹UFSM, Santa Maria, Brasil²UNIFRA, Santa Maria, Brasil

Um estudo de nanofios de InP oxidados, assim como das etapas iniciais do processo de oxidação é realizado usando cálculos de primeiros princípios e dinâmica molecular a 300K, dentro da Teoria do Funcional da Densidade. O Fosfeto de Índio um material com propriedades óticas conhecidas, tanto em fase macroscópica quanto em estruturas nanométricas (SANTOS; PIQUINI, 2010). Entretanto, pouco se sabe sobre a influência da camada óxida que se forma espontaneamente sobre as paredes de nanofios de InP em suas propriedades eletrônicas e ópticas. Foram realizados cálculos de primeiros princípios, como implementados no código computacional VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) (KRESSE; FURTHMÜLLER, 1996), o qual resolve as equações de Kohn-Sham (KOHN; SHAM, 1965), dentro da Teoria do Funcional da Desidade (DFT) (HOHENBERG; KOHN, 1964). Um nanofio de InP na fase wurtzita num ambiente contendo um gás de moléculas O₂ é usado para simular as etapas iniciais do processo de oxidação do nanofio. A dinâmica molecular revela que as moléculas de O₂ se dissociam preferencialmente em reações com átomos de P, com os átomos de oxigênio sendo incorporados em suas camadas superficiais. A simulação de dinâmica molecular do nanofio de InP já oxidado revela uma função distribuição de pares muito próxima à do fio puro, embora haja desestruturação da

fase cristalina local. Os defeitos gerados pela presença dos átomos de oxigênio levam a um fechamento do gap de energia, devido principalmente à contribuições vindas dos átomos de In ligados ao oxigênio.

Estudo Teórico de Impureza Substitucional de Eu em Bulk de PbSe e PbTe

Sandro Silva da Cunha, Rogério Baierle

UFSM, Santa Maria, Brasil

Neste trabalho utilizamos cálculos de primeiros princípios para estudar a estabilidade e as propriedades eletrônicas do PbSe e PbTe dopados com Eu. Empregamos o formalismo da teoria do funcional da densidade (DFT) e o termo de troca e correlação é descrito pela aproximação da densidade local (LDA+U). A interação entre os elétrons de valência e caroço é descrita pelo método PAW. Correções relativísticas (Acoplamento Spin-Órbita) na forma implementada no código computacional VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) foram empregadas e nossos resultados apresentam que o Eu no sítio do Pb possui uma energia de formação de 3.67eV e 4.04eV para o PbSe e PbTe, respectivamente. Com relação a parte eletrônica obtivemos que o Eu no sítio do Pb é uma impureza doadora rasa, ou seja, o nível de Fermi está ressonante com o fundo da banda de condução e os níveis f do Eu estão no gap (PbSe) ou ressonante com o topo da banda de valência (PbTe).

Soil clay fraction analyzed by atomic force microscopy

N. M. P. Dias, S. C. Saab, A. M. Brinatti, L. F. Pires

UEPG, Ponta Grossa, Brazil

The atomic force microscopy (AFM) is a technique for direct measurements in three dimensions of the mineral structure in nanometric scale. In the literature, there are studies which approach the characterization of surfaces in atomic scale through AFM, such as humic substances and minerals. However, the number of studies aiming to characterize the clay fraction minerals in soil using this technique is not representative. In this work AFM was used for the morphological characterization of the clay fraction of samples collected at the soil surface of a Dark Latosol from the south of Brazil. For the sample characterizations free softwares (Gwyddion and Image J) were used allowing the quantification of the area, perimeter and height of the clay fraction. The Shimadzu atomic force microscopy (SPM 9600) was utilized for image acquisition. For each image the phase and topography were obtained. The scan areas selected were $5 \times 5 \mu\text{m}$. The analyzed images presented particle agglomerates due to the high concentration of them in the mica substrate. The particles height varied from 5 to 25 nm. This result demonstrates the potential of the AFM technique for clay measurements in the nanometric scale. In relation to clay particle area distributions about 81% of these particles presented areas smaller than 30.000 nm^2 and 84% perimeter smaller than 1.000 nm. It was also possible to identify individual particles with height between 1 and 3 nm after dilution for separation of the clay particles

Production of ultra-small Si-based nanoparticles by pulsed laser ablation in acetone

G. L. Plautz¹, V. Silva de Oliveira², W. H. Schreiner¹, A. G. Bezerra Jr.³, I. L. Graff¹

¹Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, Brazil

²Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Ciência dos Materiais (PIPE), Universidade Federal do Paraná, Curitiba, Brazil

³Departamento Acadêmico de Física, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Curitiba, Brazil

In this work we investigate the properties of Si-based nanoparticles obtained by pulsed laser ablation of Si target immersed in acetone. We produce solutions of nanoparticles by irradiating the target with the first harmonic of a Nd:YAG laser ($\lambda = 1064 \text{ nm}$). Once the nanoparticles size distribution of the solution is characterized by dynamic light scattering (DLS) measurements, it is re-irradiated with another, high-power, Nd: YAG laser ($\lambda = 266 / 337 \text{ nm}$) during different periods of time. Such irradiations significantly decrease the mean size and dispersion of the nanoparticles. We found that the re-irradiation reduces the mean size from 30 nm for the original solution to 1 nm after cumulated 90 minutes of irradiation. Those conclusions are in agreement with photoluminescence (PL) measurements where we compared the outcomes for the original solution, pure acetone,

irradiated acetone, and re-irradiated solution. The solution with the ultra-small nanoparticles presents a clear PL signal in the blue-green region when excited with wavelengths ranging from 350 to 410 nm. Analysis of the nanoparticles by means of X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) shows that their chemical composition is SiO₂. Solutions of such small-size nanoparticles of Si (in the so-called quantum-dot regime) have a great potential for applications in biotechnology and medicine, especially in diagnostics.

Síntese e Caracterização de Soluções Sólidas de BiFeO₃-PbTiO₃ via Moagem em Altas Energias e Micro-Moagem

O. A. Protzek, V. F. Feitas, D. Z Montanher, I. A. Santos
Universidade Estadual de Maringá

Com os recentes avanços tecnológicos, a procura por materiais capazes de realizar mais de uma tarefa simultaneamente aumenta cada vez mais, dentre esses materiais destacam-se os materiais multiferróicos devido ao seu vasto potencial para aplicação em novos dispositivos multifuncionais, como transdutores, dispositivos de memória magnetoelétrica, dispositivos magnéticos controlados eletricamente, dispositivos piezoeletricos magneticamente controladas, sensores inteligentes miniaturizados, entre outros. Um sistema promissor para tais aplicações é o (1-x)BiFeO₃-(x)PbTiO₃ (BFPT), por apresentar altas temperaturas de transição ferroelétrica, sendo ideal para aplicações que necessitam de estabilidade em altas temperaturas e de alto grau de polarização. Neste trabalho foram preparadas amostras com composição nominal (0.6)BiFeO₃ - (0.4)PbTiO₃, dopadas com 3% de La₂O₃ (BFPT-3L). As amostras foram preparadas via moagem em altas energias e subsequentemente foram submetidas à micro-moagem a fim de se reduzir o tamanho de partícula, visando uma maior densificação do material. Essas amostras foram sinterizadas em forno convencional e posteriormente submetidas a análises de difratometria de raios X (DRX), densidade, pelo método de Arquimedes, microscopia eletrônica de varredura (MEV), resistividade elétrica DC, permissividade elétrica em função da frequência e medidas de histerese elétrica. Os resultados obtidos indicam que o processo de micro-moagem contribui substancialmente para a diminuição do tamanho médio de grão, possibilitando assim a obtenção de cerâmicas altamente densas, da ordem de 97%, e com alta resistividade elétrica, possibilitando assim a caracterização elétrica do material.

Estudo de propriedades estruturais, energéticas e eletrônicas de nanotubos BC₈N

E. Ribas¹, M. Machado¹, S. Azevedo²

¹ UFPel, Pelotas, Brazil

² UFPB, Paraíba, Brazil

O interesse em materiais compostos formados por nitreto de boro carbono ($B_xC_yN_z$) tem se intensificado devido ao seu grande potencial de aplicabilidade e também por serem candidatos promissores para o desenvolvimento de novos dispositivos eletrônicos em nanoescala. A grande semelhança estrutural entre o grafite e o nitreto de boro hexagonal motivou a síntese dos $B_xC_yN_z$, onde espera-se que as propriedades de tais compostos híbridos sejam intermediárias entre as do grafite semimetalíco e as do BN hexagonal isolante. Além disso, as propriedades mecânicas destes compostos podem ser similares àquelas do diamante e BN cúbico, o que permite a perspectiva de novos materiais superduros. Neste trabalho foram investigadas as propriedades estruturais, energéticas e eletrônicas de nanotubos $B_xC_yN_z$ (formados pela conexão intercalada de fitas de C e BN ao longo do eixo do tubo, sendo duas de cada tipo para cada estrutura) através de cálculos de primeiros princípios. O objetivo é observar deformações nos tubos e alterações em suas estruturas eletrônicas, mantendo fixa uma estequiometria específica e variando o diâmetro. Para a estequiometria BC₈N foram feitos cálculos para tubos zigzag ((10,0), (20,0), (30,0) e (40,0)) e armchair ((10,10), (20,20), (30,30) e (40,40)). Observamos que para tubos de menor diâmetro ocorreram maiores deformações, sendo que estas foram mais visíveis nos tubos zigzag, devido a maior flexibilidade nas ligações entre as fitas de C e BN. Pela análise energética, os tubos de maiores diâmetros se mostraram mais estáveis devido ao aumento de ligações favoráveis e sua forma mais planar. Já a análise eletrônica mostrou que os tubos armchair são metálicos, independente do diâmetro, enquanto que os zigzag apresentam, em geral, um pequeno gap de energia que varia entre 0,2 eV a 0,4eV. Apenas o tubo (30,0) apresentou comportamento metálico.

ESTUDO DAS PROPRIEDADES ESTRUTURAIS, ENERGÉTICAS E ELETRÔNICAS DE NANOTUBOS BC₆N

R. C. Rodrigues, M. Machado
UFPEL, Pelotas, Brazil

Nanotubos de carbono (NC), apresentam propriedades físico-químicas únicas. Estudos teóricos e experimentais mostraram que dependendo do diâmetro e quiralidade o tubo é metálico ou semicondutor. Tal comportamento pode ser qualitativamente explicado em termos da estrutura de banda e dos vetores de onda discretos permitidos pelas condições de contorno nos tubos de carbono. Similarmente, os compostos III-V podem ser encontrados em estruturas hexagonais e tubulares microscópicas. O material III-V com maior similaridade ao carbono é o nitreto de boro (BN), que como o carbono, é encontrado em estruturas sp² e sp³. Assim, podemos criar combinações estequiométricas do tipo B_xC_yN_z. Devido à ionicidade do BN e ao seu grande gap de energia (~ 4.9 eV), tubos desse material apresentam maior uniformidade nas propriedades eletrônicas quando comparados ao carbono. Tubos de BN serão sempre semicondutores (quase) unidimensionais. Isso pode ser tecnologicamente vantajoso porque amostras contendo tubos de tamanhos e estruturas diferentes podem ser crescidas com propriedades predeterminadas. Neste trabalho fizemos a substituição parcial de carbono por átomos de boro e nitrogênio, levando-nos a formação de compostos ternários BC₆N de grandes diâmetros. Tais composições permitem a obtenção de estruturas de bandas com gap de energia intermediário entre os apresentados pelo grafite e pelo nitreto de boro. Mais especificamente, estudamos, através de cálculos *ab-initio*, a estabilidade das estruturas BC₆N através da determinação da energia de formação, energia de coesão e energia de strain. Além disso, investigamos as propriedades eletrônicas de tais estruturas, na ausência de defeitos. Em relação às propriedades estruturais nossos resultados mostram que os tubos assumem uma forma elipsoidal com diferentes excentricidades, as quais dependem do diâmetro do tubo. A análise energética mostra que tubos de grande diâmetro são mais estáveis e a análise eletrônica mostra que os nanotubos são semicondutores com gaps direto de energia, variando entre (~ 0,3 - ~ 1,1) eV.

Anomalous Diffusion and Electrical Response of Ionic Solutions

E. K. Lenzi, P. R. G. Fernandes, T. Petrucci, H. Mukai, H. V. Ribeiro, M. K. Lenzi, G. Gonçalves
UEM, Maringá, Brazil.

We analyze the electrical response obtained in the framework of a model in which the diffusion of mobile ions in the bulk is governed by a fractional diffusion equation of distributed order subjected to integro-differential boundary conditions. The analysis is carried out by supposing that the positive and negative ions have different mobility and that the electric potential profile across the sample satisfies the Poisson's equation. In addition, we also compare the analytical results with experimental data obtained from ionic solutions of a salt dissolved in water, revealing a good agreement and evidencing that the dynamics of the ions can be related to different diffusive processes and, consequently, to anomalous diffusion.

Production of bismuth nanoparticles with laser ablation

R. G. T. Rosa¹, C. A. Duarte¹, W. H. Schreiner¹, A. G. Bezerra Jr.²
¹UFPR, Curitiba, Brazil
²UTFPR, Curitiba, Brazil

Metal and semimetal nanoparticles have attracted a great attention on recent decades due to their unique physical properties. Recent works report a huge number of applications over a plethora of areas ranging between photonic devices and biomedical engineering. The production of colloidal nanoparticles is often based on chemical methods, what leads to the contamination of the solution with the reagents. There are, also, other ways to produce nanoparticles that do not require chemical reagents, such as the laser ablation. This is probably one of the most interesting techniques when the purity of the colloid is required. In the present work we show the production method of colloidal bismuth nanoparticles utilizing laser ablation in various solvents. Bismuth nanoparticles are known for its low toxicity and are, possibly, good candidates for the application as biosensors. The extinction spectra were studied and the surface plasmon resonance is localized at the UV region (about 250 nm). Dynamic Light Scattering measurements and TEM images of the samples show that we were able to produce nanoparticles with mean size around 60 nm. We also studied the effect of the addition of cysteine in

the sample in water, where the surface plasmon peak presents a blueshift and the solution turns its color from dark brown to transparent. The shift in the absorption spectra is often related with the functionalization of the nanoparticles. Additional experiments are being carried out to verify this hypothesis.

Thermal-optical characterization of DLC films and connection with their possible application

D. T. Dias¹, A. Ferreira da Silva², V. J. Trava-Airol³

¹ UTFPR, Ponta Grossa, Brazil

² UFBA, Salvador, Brazil

³ INPE, São José dos Campos, Brazil

Diamond-like carbon (DLC) film is widely used in biotechnology and materials science. Their versatility allows them to be used in a variety of commercial and industrial applications, such as protective coatings aerospace, cosmetics, electronics, industrial wear parts, infrared optics, medical implants, dry lubrication systems, UV coating and others. Each application of this material strongly depends on the thermal-optical properties. The preparation conditions of the material can influence its quality and the adherence degree to the surfaces. The DLC films were deposited on glass by modified Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition system with varying deposition time from 2 to 30 min. Photoacoustic techniques for the thermal-optical characterization of the films were used. Absorption bands, energy gap and transmission bands were determined from the Photoacoustic Spectroscopy. The effective thermal diffusivity was found using the Open Photoacoustic Cell Technique. Spectroscopic results around 330-400 nm showed a better absorption and a low transmission for samples with 30 and 20 min of deposition. The values of the energy gap from 3.62 to 3.69 eV are comparable to those previously reported for hydrogenated amorphous carbon (a-C:H) soft. In the infrared region the band -OH overtone decreased with increasing deposition time. On the other hand, the measures of thermal diffusivity presented an increase of this variable with deposition time reduction.

Investigações dielétricas no compósito PVDF/Ba_{0,3}Na_{0,7}Ti_{0,3} Nb_{0,7}O₃

J. M. Rosso, V. F. Freitas, T. G. Bonadio, I. A. Santos

UEM, Maringá, Brazil

Compósitos ferroelétricos polímero-cerâmica combinam as vantagens da fase cerâmica com aquelas da matriz polimérica, tais como altos coeficientes piezelétricos e piroelétricos, boas propriedades mecânicas, baixa densidade e alta flexibilidade. Contudo as técnicas de processamento podem alterar algumas propriedades físicas importantes, principalmente aquelas centradas em uma fase individual do compósito. Neste trabalho o polímero comercial PVDF (Alfa Aesar) e o pó cerâmico Ba_{0,3}Na_{0,7}Ti_{0,3} Nb_{0,7}O₃ (BTNN30/70), (processado por moagem em altas energias), foram usados para processar o compósito polímero-cerâmica na razão 1:1. As amostras obtidas foram investigadas por difração de raios-x (DRX), microscopia eletrônica, espectroscopia na região do infravermelho (IR) e medidas dielétricas. Os resultados revelaram uma amostra morfologicamente homogênea, com medidas dielétricas dos compostos bem inferiores as relatadas para a cerâmica BTNN30/70. Além disso, as medidas dielétricas mostraram que ocorreu uma transição de fase ferroelétrica para elétrica em aproximadamente 360 K (1kHz) e a 230K (1kHz) para o compósito e para a cerâmica, respectivamente. Quanto as investigações de IR, os resultados ilustram que não ocorreu uma alteração significativa das bandas de IR características do compósito PVDF/BTNN30/70 consolidado em 453 K. No entanto, bandas de IR, do polímero, em torno de 1200, 1152, 854 cm⁻¹ foram suprimidas depois da consolidação.

Método alternativo para preparação de vidros aluminosilicato de cálcio com concentração de sílica entre 7 e 30% preparados em vácuo.

M. Sandrini, J. R. M. Viana, R. F. Muniz, J. H. Rohling, A. C. Bento, M. L. Baesso, A. N. Medina

UEM, Maringá, Brazil

Vidros Aluminosilicato de Cálcio (CaO:Al₂O₃:SiO₂), quando preparados em vácuo, apresentam uma combinação de propriedades térmicas, ópticas e mecânicas, que tornam estes materiais promissores para aplicações

ópticas, principalmente aquelas nas quais o vidro é mantido sobre condições agressivas. Estudos recentes têm mostrado que essa matriz pode ser utilizada como hospedeira para íons opticamente ativos, o que agrupa as características luminescentes dos íons ao vidro, podendo ser aplicados como meio ativo de lasers de estados sólido ou como fontes de luz branca. Recentemente demonstramos que a composição da matriz, principalmente a quantidade de Sílica, influência diretamente na intensidade e nos comprimentos de onda da emissão desse sistema. No entanto, um fator recorrente em vários trabalhos com essa matriz vítreia é a existência de um intervalo de concentração de Sílica - entre 7% e 30% em massa - para o qual não se obteve a vitrificação do material quando preparados em vácuo. Neste trabalho, apresentamos um método alternativo ao processo de produção destes vidros que possibilitou a obtenção de amostras dentro desse intervalo crítico. A alteração proposta consiste na utilização de fritas de vidros como material precursor. Tais fritas são provenientes dos vidros com 7% e 34% de Sílica, respectivamente, as quais são obtidas diretamente da fusão ao vácuo dos óxidos precursores. Com este procedimento, foram produzidas amostras com concentrações de 7, 10, 15, 20, 30 e 35% de Sílica, dopadas com íons de Európio. Estas amostras foram caracterizadas quanto às suas propriedades térmicas, ópticas e termo-ópticas. Os resultados apresentaram ótima concordância com os observados para amostras produzidas pelo processo tradicionalmente utilizado pelo grupo, indicando que a utilização das fritas de vidros como precursores é uma alternativa eficaz para obtenção de vidros aluminosilicato de cálcio preparados a vácuo, no intervalo crítico de composição.

Distribution of conjugated segments for a polymer melt in a cubic lattice model

J. A. Santos, J. A. Freire
UFPR, Curitiba, Brazil

The distribution of conjugated segments, besides being an important quantity for charge transport in disordered conjugated polymers, is determinant in the photo-physics of those systems. We computed the exact distribution of segment lengths for a lattice model of an ideal polymer chain as a function of the chain rigidity and the total number of segments in the chain. Flory [1] suggested that real chains behave like ideal chains in the melt. Experiments [2] verified this hypothesis for the end-to-end distance, which was observed to scale as $N^{1/2}$ in the melt. To verify if our expression for the segment distribution (that was obtained for a single ideal chain) also holds in the melt, we modeled a set of self-avoiding walks (SAW) in a cubic lattice [3] and numerically computed the segment distribution.

Uso de camada de Estanho como uma grade no eletrodo intermediário em transistor orgânico de efeito de campo em arquitetura vertical

K. F. Seidel¹, L. Rossi² e I. A. Hümmergen³

¹ UTFPR, Ponta Grossa, Brasil

² UTFPR, Curitiba, Brasil

³ UFPR, Curitiba, Brasil

Atualmente, transistores são elementos fundamentais em circuitos eletrônicos. Um grande esforço tem sido feito nos últimos anos para desenvolver transistores de efeito de campo orgânicos e torná-los competitivos com seus similares inorgânicos. Devido à baixa mobilidade dos portadores de carga em muitos dos semicondutores orgânicos, o transistor de efeito de campo convencional (FET) normalmente impõe algumas limitações, como de alta tensão operacional e tempos de resposta longos. Uma arquitetura proposta para contornar alguns desses problemas é o transistor orgânico de efeito de campo em arquitetura vertical (VOFET). Este é constituído por camadas que estão empilhadas de modo a formar uma célula capacitiva na parte inferior e um dispositivo a dois terminais na parte superior. Neste trabalho é mostrado que nesta arquitetura, onde a espessura do canal é da ordem de espessura do semicondutor, conseguimos obter um dispositivo onde a corrente no canal é modulada pelo efeito de campo gerado pela porta a baixas tensões (1.2 V). Outras vantagens obtidas nesta arquitetura, em relação ao FET, é a possibilidade de trabalhar em modo de operação dreno-comum e/ou fonte-comum e, o fato de poder aplicar tanto tensão positiva quanto negativa na porta resultando numa maior razão on/off. O ponto crítico observado nestes dispositivos é referente à estrutura do eletrodo intermediário, que deve ser fina o suficiente para ser permeável ao campo elétrico gerado na porta, porém, com espessura suficiente para ter boa condução no plano do filme. Informações obtidas nas comparações dos resultados de VOFETs com eletrodo intermediário composto por Al, Al/SPAN (SPAN - polianilina sulfonada) e Sn, mostram que a estrutura granular

do Sn tem se mostrado a mais adequada para a aplicação nesta arquitetura. Estes resultados condizem com o modelo teórico proposto por Tessler *et al.* no qual mostra que a eficiência desta arquitetura está relacionada à estrutura do eletrodo intermediário.

Antiferromagnetismo através do Método de Monte Carlo aplicado ao Modelo de Ising

Diego Luan Ferreira da Silva, Mateus Schmidt, Fábio Mallmann Zimmer
UFSM, Santa Maria, Brazil

Com o desenvolvimento da mecânica quântica, tiveram muitos avanços no campo de estudos dos materiais magnéticos. Tais avanços permitiram uma série de aplicações tecnológicas destes materiais, levando ao desenvolvimento de novos dispositivos de armazenamento de dados. O conhecimento acerca das propriedades dos materiais magnéticos é, portanto, alvo de grande interesse da sociedade científica e o estudo teórico desses materiais é importante para a compreensão do comportamento da matéria. Por exemplo, o estudo dos materiais magnéticos torna possível compreender quais fatores levam à uma transição de fase e permite caracterizá-los com base nas diferentes propriedades apresentadas na região da temperatura crítica. O modelo de Ising (MI) destaca-se no tratamento de sistemas magnéticos, devido a sua simplicidade e por reproduzir as principais características de um material magnético. Porém, este modelo nem sempre tem solução analítica conhecida, tornando necessária a utilização de métodos aproximativos ou simulações computacionais para obtenção de resultados. O Método de Monte Carlo (MMC) é um eficiente método para simulação do MI, especialmente quando tratado com o algoritmo de Metropolis. Nossa propósitos é simular geometrias de rede para o MI utilizando o algoritmo de Metropolis para as redes quadrada (2D) e cúbica (3D) com interações superantiferromagnéticas, investigando assim o comportamento da matéria na região próxima da T_c . A fase superantiferromagnética é caracterizada pelo alinhamento dos spins do material, que podem ser imaginados como filmes finos compostos por camadas alternadas de metal ferromagnético. Neste trabalho apresentamos os resultados obtidos a partir das simulações do MMC do MI com interações superantiferromagnéticas, fazendo uma análise na região da T_c para redes quadradas (2D) e cúbicas (3D). Comparamos os resultados com os obtidos por meio de outros métodos aproximativos, onde analisamos alguns observáveis sob efeito de um campo externo, como a magnetização por spin, energia interna, calor específico e a susceptibilidade magnética. Esses resultados permitem obter um melhor entendimento sobre a fase superantiferromagnética e compreender como ela se comporta próximo à T_c .

Structural and Optical Properties of Cerium Oxide (CeO_2) Thin Films Produced by Spray and Drop Casting Techniques

T. G. Silva, C. C. Baganha, E. Ribeiro, K. D. Machado, N. Mattoso, E. Silveira
UFPR, Curitiba, Brazil

The demand on transition metals to produce high performance electronic devices has increased in recent years due their large spectrum of intrinsic properties, and their ability to modify physical properties under the environment that it is immerse. Tailoring the physical properties of these materials are nowadays high desirable for industrial applications and in research of new technologies. This environment adaptable behavior makes transition metals very attractive to substitute conventional materials in several electronic devices, which after constant miniaturization process, present low gain, current leakage and limited transport properties. Cerium dioxide is the most common rare earth (inner transition metal oxide) semiconductor, which presents excellent catalytic properties, high reactivity with oxygen, high dielectric constant (15 to 26) and a wide energy band gap (3-4 eV). In this work we produced thin films of Cerium dioxide by spray and by drop deposition of an aqueous solution of cerium dioxide particles on borosilicate glass substrates, which were initially at room temperature and after annealed at different temperatures, from 200 to 400 °C. For structural analysis, x-ray diffraction (XRD) patterns from each film were obtained. Transmittance in the UV-VIS-IR spectral range and photoluminescence properties of these films were achieved. Scanning electron microscopy (SEM) micrographs are performed in order to observe the morphological aspects of the films surface.

Propriedades dielétricas de cerâmicas multiferróicas de TbMnO₃

L. G. D. Silveira¹, G. S. Dias¹, L. F. Cótica¹, J. A. Eiras², D. Garcia², J. A. Sampaio³, F. Yokaichiya⁴, I. A. Santos¹

¹ UEM, Maringá, Brasil

² UFSCAR, São Carlos, Brasil

³ UENF, Campos dos Goytacazes, Brasil

⁴ IPEN, São Paulo, Brasil

Materias multiferróicos são de grande interesse tecnológico e acadêmico. As manganitas de terras-raras com estrutura tipo perovskita, como TbMnO₃ e DyMnO₃, têm sido objeto de particular interesse científico devido à origem magnética da polarização elétrica nesses materiais. No entanto, questiões envolvendo as correlações entre as propriedades estruturais, propriedades dielétricas, transporte de cargas e ordenamento magnético, ainda precisam ser esclarecidas. Em vista disso, neste trabalho investigou-se o comportamento dielétrico, frente à variação de frequência e temperatura, de duas amostras policristalinas de TbMnO₃ processadas em atmosferas diferentes. Os resultados mostraram a ocorrência de duas anomalias dielétricas acima de 100 K, relacionadas à ativação térmica de portadores de carga e ao seu movimento no interior e no contorno de grãos. A análise da condutividade dc indicou que os portadores de carga se movem entre sítios inequivalentes através de saltos. Além disso, observou-se uma forte correlação entre as propriedades dielétricas e a estrutura cristalina das amostras. Uma relaxação dielétrica, ocorrendo abaixo de 100 K, também foi observada. Esta relaxação segue o modelo empírico de Cole-Cole e foi atribuída ao tunelamento de polarons. Os resultados indicam que a dinâmica desta relaxação é afetada pelas propriedades magnéticas e estruturais e por anisotropias intrínsecas ao composto TbMnO₃.

Optoelectronic and Electrical properties of GaSe₉ Thin Films

M. C. Siqueira¹, J. P. M. Serbena¹, K. D. Machado¹, G. B. de Souza², C. G. G. de Azevedo³, J. H. D. da Silva³

¹ Universidade Federal do Paraná, Curitiba, PR, Brazil

² Universidade Estadual de Ponta Grossa, Ponta Grossa, PR, Brazil

³ Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, Bauru, SP, Brazil

Amorphous solid materials have become increasingly important for their potential uses in many different technological applications such as displays, solar cells, x-ray detectors, infrared transmission windows [1, 2]. In the present work, a study of some physical properties of amorphous thin films based on the GaSe₉ alloy is presented. The films were produced by vacuum thermal sublimation. Its electronic and optical properties were investigated using XPS and transmittance spectroscopy measurements, which allowed us to construct an estimated band diagram of GaSe₉ semiconductor. Near infrared spectroscopy was used to calculate the optical absorption and extinction coefficients. Electrical characterization consisted on current versus voltage measurements in ITO/GaSe₉/Al devices, from which it was possible to estimate the barrier height in ITO/GaSe₉ interface using the Fowler-Nordheim theory [3].

1 - F. Kessler, D. Rudmann, Sol. Energy 77, 685 (2004).

2 - R.E. Johanson, H. Fritzsche, A. Vomvas, J. Non-Cryst. Solids 114, 274 (1989).

3 - R. H. Fowler, L. Nordheim, Proc. R. Soc. London Ser. A, 119, 173 (1928).

Preparação e caracterização estrutural de nanopartículas de prata em um vidro sódio-borato

M. F. de Souza, G. Kellermann

Departamento de Física, UFPR, Curitiba, Brazil

O trabalho realizado teve como objetivo a preparação e estudo do mecanismo envolvido na formação de nanocristais de Ag no vidro 72B₂O₃ – 28Na₂O (% em moles) supersaturado com Ag, durante o tratamento isotérmico do vidro. As amostras do vidro inicial foram preparadas a partir da fusão dos reagentes na forma pó, seguido de um resfriamento rápido do material fundido até a temperatura ambiente usando a técnica de *splat – cooling*. Foram obtidas lâminas de vidro transparente à luz visível, com espessuras entre 100 μm e 150 μm, contendo átomos de Ag homogeneamente dispersos em seu interior. Na caracterização das amostras foi utilizada a técnica de espalhamento de raios X a baixo ângulo (SAXS). As medidas de SAXS foram realizadas na linha de SAXS do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), Campinas, SP, utilizando radiação 1,078

À. Serão apresentados os resultados correspondentes ao vidro tratado isotermicamente a 560 K durante 90 minutos. A partir da análise das curvas de espalhamento foi possível obter a função que descreve a distribuição de raios dos nanocristais. Estudos anteriores por TEM, deste mesmo compósito, mostraram que os nanocristais formados tinham forma aproximadamente esférica. A análise das curvas de SAXS foi feita então assumindo partículas esféricas homogêneas imbebidas em um vidro também homogêneo. Os melhores acordos entre as curvas experimentais e as curvas ajustadas foram obtidos quando uma função lognormal foi usada para descrever a distribuição de raios dos nanocristais $N(R, t)$. A partir das funções $N(R, t)$ foi possível a determinação da dependência temporal do: raio médio, densidade numérica e dispersão relativa em tamanho dos nanocristais. A análise comparativa destes parâmetros e a intensidade de SAXS integrada - que é proporcional ao volume total das nanopartículas -, tomada em diferentes períodos ao longo do tratamento térmico, permitiu a determinação do mecanismo envolvido no crescimento dos nanocristais de prata.

Análise teórica da adsorção de moléculas sobre nanofitas de carbono

C. Souza, M. Koehler
UFPR, Curitiba, Brasil.

Propriedades importantes fazem do grafeno um centro de interesse em diversas áreas de pesquisas. A nanofita, apresentando uma mudança na resistividade quando expostas a certas moléculas, desperta a investigação quanto a sua aplicabilidade como detector químico. Espera-se que a sua sensibilidade seja elevada, a ponto de detectar um evento individual de uma única molécula ser adsorvida na superfície do sensor de gás à base de grafeno. Motivados por esta possibilidade, iniciamos um estudo teórico através de métodos *ab initio* da presença das moléculas do tolueno e 2-propil-1-pentanol adsorvida sobre uma nanofita semicondutora. Nossas simulações indicam que estas moléculas, presentes no ar exalado de pessoas portadoras de câncer de pulmão, podem provocar mudanças significativas na estrutura eletrônica da nanofita que são passíveis de detecção experimental. Esse resultado sugere que nanofitas de carbono possam ser aplicadas para o desenvolvimento de sensores químicos visando o diagnóstico do câncer de pulmão.

Improvement in the performance of organic field effect transistor by using a poly(3,4-ethylenedioxythiophene):poly(styrenesulfonate) layer.

Ana C. B. Tavares, Isidro Cruz-Cruz and Ivo A. Hümmelgen
UFPR, Curitiba, Brazil.

Organic materials exhibit potential applications due to their interesting properties like low fabrication cost, easy processability and flexibility [1]. One of the most important devices based on organic materials is the Organic Field-Effect Transistor (OFET), which has been intensively studied in the last years. In the present work we show a new strategy to increase the output current of the OFET, keeping at the same time the low voltage operation, which consists in the use of a thin layer of poly(3,4-ethylenedioxythiophene):poly(styrenesulfonate) (PEDOT:PSS) deposited by spin-coating. PEDOT:PSS was chosen based on its good properties like high transparency and chemical stability, among others, as reported in the literature [2,3]. According to our results, the additional PEDOT:PSS layer in the organic field-effect transistors results in changes in the morphology of the semiconductor and partial suppression of charge traps at the insulator/semiconductor interface.

- [1] T. A. Skotheim, R. L. Elsenbaumer, J. R. Reynolds, Handbook of conducting polymers. CRC press, (1998).
- [2] G. Heywang, F. Jonas, Poly(alkylenedioxythiophene)s-new, very stable conducting polymers. Adv. Mater., 4: 116-118. (1992).
- [3] A. Elschner, S. Kirchmeyer, W. Lovenich, U. Merker, K. Reuter, PEDOT: Principles and Applications of an Intrinsically Conductive Polymer. CRC Press, (2010).

Polarization Energy of a Benzene Dimer

R. Tromer, J. Freire
UFPR, Curitiba, Brazil.

In order to correctly describe the energy states of an organic system it is necessary to take into account polarization effects due to the charges localized in the molecules of the entire system. Recently, some authors investigated these effects using a polarizable force field scheme. Nagata et. al. investigated the polarization effects of a system consisting of Alq₃ molecules. The polarization effect was supposedly taken into account employing electrostatic potential (ESP) charges for neutral and anionic molecules. Fuchs et. al. developed a more sophisticated approach to include the effects of Polarization via Thole's method [2] of assigning an effective polarizability to each atom in the molecule. In this work, we investigated the polarization effect of a benzene dimer with the charge confined to one of the molecules. To assure that the charge will remain in the charged molecule, we use the Extended Hückel method (EH), with the caveat of assigning a zero value to all overlap integrals between atomic orbitals belonging to different molecules. we compared the correctness and the numerical efficiency of the ESP charge method, Thole's method and the EH method of computing the polarization energy. We found that the EH method is a little more expensive but correctly describes the intra-molecular energy, which the ESP method and Thole's method does not, and the inter-molecular electrostatic energy, which the ESP method and Thole's method also does.

Influência da composição no estado de valência dos íons Eu incorporado ao vidro Aluminosilicato de Cálcio

J. R. M. Viana, A. M. Farias, M. Sandrinis, J. H. Rohlings, A. C. Bentos, M. L. Baessos, A. N. Medinas UEM, Maringá, Brazil

Neste trabalho, investigamos a influência da composição da matriz vítreia na formação de diferentes estados de valência do terra-rara europeu (Eu), quando incorporado no vidro aluminosilicato de cálcio. As amostras com diferentes composições foram preparadas em forno a vácuo, aumentando a quantidade de sílica, entre 7 e 65% em peso, e mantendo a proporção CaO/Al₂O₃. A concentração de dopante (Eu₂O₃) foi mantida fixa em 2,5% (em peso) para todas as amostras. Para caracterização das amostras e determinação dos estados de valência do Eu, foram utilizadas as técnicas de XANES (Absorção de raios-X próximo da borda), espectroscopia de transmissão óptica, espectroscopia fotoacústica, ressonância paramagnética eletrônica e espectroscopia de luminescência. Os resultados mostram o aumento da quantidade de Eu divalente e consequente redução do Eu trivalente com o aumento da quantidade de sílica. Este comportamento foi relacionado à redução no número de oxigênios não ligados, devido ao aumento da concentração de sílica, o qual comporta-se como um formador de rede. Além da mudança na valência do íon, os resultados obtidos sugerem que o Eu ocupa pelo menos dois sítios diferentes, cuja ocupação depende da composição da matriz, para menores concentrações de sílica o Eu divalente ocupa predominantemente sítios com alta simetria e forte interação com o campo cristalino. Tanto a mudança de valência quanto a interação com o campo cristalino, provocam alterações significativas nas propriedades luminescentes, permitindo obter amostras com emissão em praticamente todo o espectro de luz visível, com máximo de intensidade desde o vermelho-alaranjado até o azul, dependendo da composição da matriz.

Ensino de Física**O uso da História em Quadrinhos como fator de motivação, participação e contextualização em aulas de Física para o ensino médio**

C. Aguiar, E. Suckow, P. Oliveira
UTFPR, Curitiba, Brazil

Este trabalho foi realizado pelo grupo de Processos e Materiais Educativos do PIBID de Física de nossa instituição, financiado pela CAPES. Pelo acompanhamento de turmas de Física do ensino médio, verificou-se que os alunos cada vez mais preferem aulas diferenciadas das tradicionais e que permita maior participação destes e contextualização dos assuntos abordados em aula. Alguns autores apontam como fator principal para essa participação mais assídua dos alunos nas aulas de Física a inserção de atividades mais lúdicas e que aproximem o

cotidiano do aluno com o que é estudado, sendo esse o objetivo do nosso estudo. A pesquisa foi realizada em um colégio da região de Curitiba, em uma turma de terceiro ano, e teve como principal foco a inserção das histórias em quadrinhos no ensino de Física. Foram realizadas observações das aulas do professor supervisor e posteriormente foi realizada uma aula de apresentação da atividade onde foi proposto que os alunos, divididos em grupos, fizessem uma história em quadrinhos (HQ) com o assunto estudado. Os alunos deveriam criar histórias e apresentar os conceitos físicos encontrados nessas histórias. Essa intervenção foi gravada e, posteriormente, foi realizada uma votação, pelos próprios alunos da turma, através das redes sociais para a escolha da melhor história. Além da votação, cada história foi analisada no quesito conteúdo. Posteriormente foi aplicado um questionário com questões discursivas para coletar informações sobre as opiniões dos alunos sobre a atividade e verificar se haviam ficado dúvidas sobre o conteúdo da disciplina. O resultado foi muito positivo no sentido de que os alunos compreenderam melhor o conteúdo quando envolvidos no processo de aprendizagem, fato este verificado não somente pelas respostas do questionário, mas pelo desempenho deles na prova que foi aplicada pelo supervisor após a realização da atividade.

O PÊNDULO SIMPLES COMO AGENTE INTEGRADOR UTILIZANDO A HISTÓRIA DA CIÊNCIA

D. de A. F. Kugler¹, G. M. Campanini¹, A. L. de Lara¹

¹ UTFPR, Curitiba, Brasil

A aplicação da história da ciência no ensino de física vem sendo discutida em diversos trabalhos na literatura, apontando-a como alternativa para problemas como falta de contextualização e oportunizar discussões com o objetivo de superar obstáculos epistemológicos. Assim, o grupo de História da Ciência, do PIBID de física da nossa instituição, financiado pela CAPES, elaborou uma atividade investigativa utilizando o experimento do pêndulo simples como agente integrador. A atividade foi aplicada em duas turmas de terceiro ano do ensino médio, e durante um mês foi trabalhado o conceito de movimento oscilatório em três intervenções. A primeira conteve uma introdução utilizando um texto produzido pelos pibidianos com relatos do uso desse experimento em vários contextos históricos, como a determinação da formaachatada da Terra, que incluiu visitas ao litoral nordeste brasileiro. A seguir, foram propostas três questões relacionadas ao tema e a possibilidade de determinar aceleração da gravidade por meio da queda livre. Na segunda intervenção aplicou-se a atividade prática do pêndulo simples para os alunos, no qual eles puderam explorar o experimento com o uso de um roteiro aberto. No último encontro, os dados adquiridos anteriormente foram analisados graficamente, aplicando o ajuste de reta pelo método da mão-livre. Usando conceitos básicos de geometria analítica, obteve-se um novo valor para a aceleração da gravidade. Todo material produzido pelos alunos foi recolhido, incluindo as questões iniciais, os dados experimentais e os gráficos ajustados. Também foi solicitado um parágrafo contendo feedback das atividades desenvolvidas. Percebeu-se que os alunos apresentaram dificuldades para relacionar o desenho tradicional desse experimento com situações reais. Além disso, apareceram obstáculos com a linguagem matemática, que culminaram em valores da aceleração distantes do valor base. Esse trabalho mostrou-se de grande valia, por explorar um conceito básico, mas que pode assumir grande importância se for relacionado a metodologias alternativas de ensino.

A utilização de super-heróis como recurso pedagógico no ensino de Física.

F. A. Fernandes¹, S. B. Soltau²

¹ Colégio CRA, Alfenas, Brazil. ² UNIFAL-MG, Alfenas, Brazil.

O desinteresse dos alunos do ensino médio influencia diretamente a prática docente. Utilizar referências aos super-heróis pode motivar os alunos ao estudo e tornar mais atrativa a aprendizagem de física nos espaços formais de ensino. Uma intervenção baseada nos conteúdos de física da grade curricular do ensino médio empregando os super-heróis como recurso e fundamentada na Teoria de Aprendizagem Significativa de Ausubel, demonstrou sua eficácia em alcançar a motivação e atratividade propostas. Para minimizar as deficiências decorrentes da utilização de um método de pesquisa único, optou-se por analisar os resultados obtidos a partir de uma triangulação metodológica composta por: mapas conceituais, questionário e observação em sala de aula. Os resultados das três análises efetuadas durante a pesquisa ressaltaram mudanças notáveis tanto no conhecimento expresso nos mapas conceituais desenhados pelos participantes, quanto nas respostas dadas aos questionários e, particularmente no comportamento dos alunos durante as intervenções que romperam a apatia e desinteresse

para se envolverem de forma ativa em debates. Com base nos resultados é possível concluir que os personagens dos super-heróis são um recurso didático-pedagógico adequado para motivar e incentivar a aprendizagem de conteúdos da física.

FÍSICA: DA UNIVERSIDADE À COMUNIDADE

L. A. B. BERNARDES, A. J. CAMARGO, S. L. R. DA SILVA, L. A. PEREIRA, P. C. FACIN
UEPG, Ponta Grossa, Brasil

O projeto de extensão Física - da Universidade À Comunidade, desde sua primeira execução em 1999, tem como objetivo estabelecer uma ligação direta entre a comunidade e o Departamento de Física da UEPG. As atividades oferecidas por este projeto são: cursos de nivelamento em Matemática básica e cursos sobre temas que complementam a formação dos acadêmicos dos cursos de Física e áreas afins; cursos, oficinas e palestras para professores do Ensino Fundamental e Médio (EFM); monitorias para alunos do EFM; montagem de laboratórios de Física em escolas da rede pública; divulgação dos cursos de Física da UEPG nas escolas; realização de experimentos de Física em lugares públicos. As metodologias utilizadas são: aulas expositivas, contando com a monitoria de acadêmicos; oficinas de aulas experimentais sobre temas de Física aplicada ao cotidiano; oficinas sobre temas relacionados com Física que sejam apresentados no noticiário de jornais; preparação e apresentação de experimentos de Física, com participação dos acadêmicos, para apresentação em lugares públicos. Alguns dos principais resultados alcançados são: o projeto já atingiu mais de cento e cinquenta mil pessoas em várias cidades do Paraná; fortalecimento da ligação entre o DEFIS-UEPG e os professores e alunos do EFM dos Campos Gerais; atualização de professores do EFM na Área de Ensino de Física; melhoria dos vínculos entre a UEPG e o governo do estado do Paraná através da ativa participação no projeto Paraná em Ação; curso de extensão Equações Diferenciais Aplicadas à Física, o qual resultou em um livro de mesmo nome, editado pela Editora UEPG, desde 1999, com grande sucesso; exibição de séries científicas; curso sobre fundamentos de física moderna; e oficinas sobre a inter-relação entre a ciência e arte

Educação em Física e Educação para o Trânsito: uma redação possível na busca da formação para a cidadania

H. Battazza, L. Londro
UNIFAL, Alfenas, Brazil

Atualmente somos informados pela mídia sobre acidentes de trânsito. Uma maneira de contribuirmos para alterar os altos índices de acidentes é por meio da Educação para o Trânsito, amparada pelo Código de Trânsito Brasileiro. Com o objetivo de inserirmos a Educação para o Trânsito em aulas de Física, elaboramos um Episódio de Ensino que relaciona os conteúdos presentes no tópico de Movimento Circular Uniforme (MCU) com a Física da Bicicleta. Este assunto foi escolhido pelo fato de muitos alunos utilizarem a bicicleta como meio de transporte. Na elaboração do episódio, procuramos ir além do ensino dos conceitos físicos relativos ao movimento de uma bicicleta, mas adentrar na educação para o trânsito por meio do desenvolvimento de procedimentos e formação de atitudes. O episódio foi elaborado na perspectiva de Três Momentos Pedagógicos possuindo um conjunto de 10 aulas. Inserimos nele textos de divulgação científica, vídeos e construção de placas objetivando desenvolver conteúdos de natureza procedural e atitudinal. O episódio foi implementado em uma turma de ensino médio de uma escola mineira. Por meio da análise de produções textuais dos alunos, observamos alguns aspectos positivos como: a) compreensão dos conceitos pertencentes ao MCU como, por exemplo, período, frequência, velocidade angular, aceleração centrípeta, equilíbrio e momento angular; b) identificação das principais peças que constituem uma bicicleta e seus equipamentos de segurança obrigatório; c) descrição do movimento do disco ou polia em rotação uniforme e do acoplamento de polias e rodas dentadas; d) reconhecimento da diferença entre coroa e catraca; e) reconhecimento dos locais de circulação de bicicletas (bicicletário, ciclovia, etc); f) conscientização da necessidade da manutenção da bicicleta e dos equipamentos obrigatórios de segurança para garantir a segurança no trânsito. Pensamos que o episódio constitui-se como uma possibilidade viável para inserir a educação para o trânsito em aulas de física.

**NOVAS LINGUAGENS NA PRÁTICA PEDAGÓGICA DO ENSINO DA FÍSICA ESCOLAR:
NOS PARADIDÁTICOS.**

T.Rodrigues
PUCPR, Curitiba, Brazil

A linguagem é o meio utilizado para nos comunicar, tanto com a fala ou por escrito transmitimos nossas ideias e sentimentos. Para Bakhtin (2003), a linguagem científica surge do convívio cultural, e como tal, é relativamente mais desenvolvido e organizado. O que ele chama de gêneros discursivos secundários, pois no processo de sua formação são introduzidos e reelaborados vários gêneros simples. No ensino de Física Escolar, a linguagem utilizada deveria ser lúdica e chegar próximo à realidade do educando para um melhor entendimento de seus conceitos ou modelos físicos. Para Moreira (2005) na aprendizagem significativa, os novos conceitos estudados se ligam cognitivamente a outros conceitos pré-estabelecidos. Sendo assim, o ensino e entendido como processo constante em construção e reconstrução da aprendizagem. Para Pozo (2009), a aprendizagem de ciências deve ocorrer na relação de comparação e diferenciação de modelos, e não da aquisição de saberes prontos e acabados. Este trabalho tem como objetivo realizar o levantamento de novas linguagens no ensino de Física Escolar, a partir da análise de textos paradidáticos, a fim de instituir novas práticas pedagógicas. Foram realizadas leituras, fichamentos e análises de paradidáticos a partir do referencial teórico. As obras apresentam-se como meio de aguçar e estimular a aprendizagem dos estudantes, para juntamente com o livro didático, o estudo aprendizagem dos conteúdos faça mais sentido. O desconhecimento sobre a importância da leitura, na instrumentação para o ensino, é um entrave no desenvolvimento do estudante, pois ele não é motivado a ler e nem a escrever. Cabe então ao professor mostrar essa importância ao educando, pois cada vez mais estes apresentam problemas na organização e na escrita, bem como a abstração dos fenômenos físicos.

Espaços não formais: Oficina de Astronomia para alunos superdotados

A. Honorato, M. Wippel da Silva, R. Feld Santos, A.E. de Almeida Pinto, M.A Florczak
UTFPR, Curitiba, Brasil

Este projeto, desenvolvido no âmbito do PIBID de Física de nossa instituição, com financiamento da CAPES, teve como objetivos proporcionar o contato de estudantes do ensino médio com tópicos de Astronomia que não são rotineiramente abordados em sala e avaliar o retorno dessa atividade por meio de um questionário, respondido pelos participantes, retirado das referencias lidas. A análise do questionário mostrou que o maior atrativo da Astronomia para os estudantes tende a área observacional, espaços não formais e a história dessa ciência. Com enfoque nos espaços não formais, foi realizada uma oficina de Astronomia com estudantes de altas habilidades de uma escola pública de Curitiba. No primeiro encontro, intitulado "O que é Astronomia?", os estudantes embarcaram na história da Astronomia e se discutiu sobre o trabalho dos astrônomos, os equipamentos observacionais e as escalas e dimensões astronômicas. No segundo encontro, "O Sistema Solar", discutiu-se a origem do Sistema Solar e sua composição, além de se discutir a definição de planeta e planeta anão. No terceiro encontro, "Planetas", foi discutido detalhadamente cada planeta e no quarto encontro, "Cometas, Asteróides, Meteoros e Meteoritos", foi discutida a natureza desses pequenos corpos do Sistema Solar e foram abordados temas atuais, como o meteoro que atingiu uma cidade russa em março desse ano. Durante as atividades, foram utilizados os softwares Starry Night e Stellarium. Durante as aulas os alunos interagiram significativamente com os professores e as perguntas não foram escassas. Ao final de cada atividade, os estudantes responderam um questionário com questões fechadas e abertas sobre o assunto trabalhado. Analisando esses questionários, percebemos que a absorção do conteúdo por parte dos estudantes foi positiva e que espacos não formais são uma ferramenta de grande importância, especialmente para temas que não fazem parte do currículo, como a Astronomia.

Ensino de Física, Desenvolvimento Tecnológico e História da Humanidade: Uma abordagem CTSA no Ensino Médio.

M.L.C.Linhares, L. E. Maria, L.Bueno, A. E. A. Pinto, J. A. P. Alves
UTFPR, Curitiba, Brasil

A partir do que apresentam documentos oficiais em Educação, como os Parâmetros Curriculares Nacionais Mais, e parte da literatura atual sobre ensino de Física, torna-se imprescindível que haja contextualização entre

aspectos que relacionem, entre outras coisas, história e tecnologia nesta subárea do ensino. Isto se deve ao fato de que o ensino de Física precisa ser tratado também como um conjunto de competências específicas que possibilitem ao aluno perceber e lidar com relações entre fenômenos naturais, desenvolvimento tecnológico e a história da humanidade, pois inúmeras contribuições culturais, econômicas, sociais etc. não podem mais ficar à margem da ciência ensinada-aprendida na escola, posto que o ensino tradicional divide o conhecimento em disciplinas. Assim, durante a formação do professor de Física é necessário que o processo de aproximação teórica e prática entre esta ciência e outras áreas de conhecimento seja potencializado. Diante desta preocupação, o grupo de Ciência, Tecnologia, Sociedade e Ambiente (CTSA), do PIBID de Física de nossa instituição se propôs a identificar, com base inicial em questionários, se estudantes de Física do Ensino Médio apresentam concepções embasadas sobre determinadas relações entre CTSA com o viés da história da humanidade. Após a análise das respostas os resultados apontam que esses estudantes percebem: o caráter criador da tecnologia e sua capacidade em resolver problemas, por um lado, e impactante no ambiente, por outro; relações conflitantes das sociedades históricas e contemporâneas; relações de implicação direta entre ciência e tecnologia, bem como visões complementares a respeito do papel que o desenvolvimento tecnológico tem sobre a sociedade. A partir desses resultados o grupo tem como proposta realizar intervenções nas aulas do supervisor de Física do ensino medio objetivando aproximar discussões que contemplem a relação entre Física como construção humana e a influência dela na história da humanidade.

A Evolução de um Manual Didático de Física: um estudo avaliativo

A. C. Mello, N. M. D. Garcia
UTFPR, Curitiba, Brazil

Os livros didáticos desempenham um papel fundamental no ensino de Física nas escolas brasileiras. Seus autores procuram produzí-los de forma que se adaptem e se adequem à realidade de cada época e contexto, para que sejam adotados por professores e utilizados pelos alunos. Este trabalho procurou analisar os livros didáticos produzidos pelos professores Beatriz Alvarenga e Antonio Máximo, adotados no Brasil há quase cinco décadas. Estando presentes em diversas escolas do país, o mesmo foi publicado por quatro editoras diferentes e traduzido para o espanhol. Para este estudo foi utilizado um instrumento de análise de livros didáticos elaborado por Trebien e Garcia (2012), que contempla eixos gerais referentes às características textuais, editoriais, interdisciplinaridade, contextualização, fundamentação conceitual, experimentação, elementos de história da ciência e sugestão de uso de TICS. Observou-se neste trabalho que o livro didático de Física dos autores mencionados apresentou poucas modificações ao longo destas quase cinco décadas, principalmente no aspecto estrutural e textual do livro, sendo evidenciadas mudanças significativas no aspecto gráfico dos mesmos. Também foi analisado o manual do professor correspondente a cada edição, principalmente no que concerne às orientações pedagógicas sugeridas, propostas de atividades e métodos de avaliação, ficando evidenciado algumas divergências entre o proposto pelos manuais do professor e o próprio livro.

Utilização do software Tracker para enriquecer aulas de Física do 1º ano do Ensino Médio

F. A. Oliveira
UTFPR, Curitiba, Brazil

Nas escolas da rede pública, em especial no Paraná, o laboratório didático de ciências é praticamente inexistente. Com o intuito de oferecer uma pequena compensação dessa falta, e superar as situações de aulas quase que exclusivamente teóricas este trabalho mostra uma atividade baseada em videoanálise para o desenvolvimento de atividades experimentais. Por ter baixo custo, qualidade, flexibilidade de uso e facilitando a realização de experimentos significativos nas aulas de Física, o Tracker pode ser uma ferramenta que supre em partes a falta do laboratório. O programa faz análise de vídeos quadro a quadro oferecendo a possibilidade de acompanhar a evolução de grandezas físicas em tempo real. O trabalho foi realizado em colégio da periferia de Curitiba com alunos em possibilidade de risco social. Primeiramente aconteceu a elaboração de um roteiro de relatório a ser escrito pelos alunos comparando dois experimentos realizados sobre queda livre. O primeiro consistia em largar um objeto de duas alturas diferentes, tentar marcar o tempo de queda acionando e parando manualmente um cronômetro, julgando se o procedimento é confiável para encontrar o valor da aceleração da gravidade. Posteriormente os alunos realizaram o mesmo experimento, mas filmando a queda, inserindo no programa Tracker, marcando pontos, coletando dados que posteriormente seriam analisados utilizando uma planilha eletrônica.

Após a coleta e análise dos dados, os alunos puderam verificar se a aceleração da gravidade na Terra realmente é $9,8\text{m/s}^2$, sendo aceito um erro máximo de até 10% para cima ou para baixo. O uso de Tecnologias de Informação e Comunicação no ensino de Física aprimora a qualidade das aulas, desperta a criatividade e curiosidade dos alunos, além de remeter a um conhecimento menos fragmentado, contextualizado e a uma visão mais ampla e referenciada da ciência.

O ENSINO DE FÍSICA PARA ALUNOS DA ZONA RURAL

L. G. Pascoaloto, S. B. Soltau
UNIFAL-MG, Alfenas/MG, Brazil

As dificuldades em implementar educação na região rural brasileira tem sido discutidas há décadas. Mesmo uma breve revisão bibliográfica a respeito do tema mostra abordagens tão distintas quanto a falta de transporte para alunos, e a preocupação com a formação dos educadores que atuam na região. Mais raras, porém, são as produções que tratam especificamente da aprendizagem e ensino de física para alunos que residem e estudam na região rural ou que moram na zona rural e estudam na cidade. Visando contribuir para preencher esta lacuna, propõe-se uma alternativa didático-pedagógica para uso em aulas de física, propiciando maior proximidade entre os conteúdos estudados na escola e as vivências cotidianas, facilitando a aprendizagem e ampliando o interesse pela disciplina. Por meio de uma aula expositiva de cunho experimental, busca-se romper com o modelo de aula baseada somente em equações e conceitos abstratos, e passa-se a tratar a ciência e a tecnologia como atividades humanas, com seus aspectos práticos e sociais, com o intuito de resolver problemas concretos, alcançando o mundo vivenciado pelos alunos. Práticas experimentais são um recurso indispensável no ensino de física quando bem articuladas com a teoria. Assim, utiliza-se como recurso didático protótipos de máquinas rudimentares, tais como o monjolo, comumente encontradas na região rural, para abordar conteúdos de física. No presente relato, desta-se uma aula experimental destinada aos alunos de primeiro ano do ensino médio, de uma escola pública situada no município de Alfenas/MG, com alunos residentes na zona rural. Os resultados preliminares mostram boa aceitação por parte dos alunos da estratégia didática adotada. Em especial, nota-se maior participação e ativo interesse dos alunos durante as intervenções que envolveram experimentos, o que sugere serem as máquinas rudimentares um profícuo recurso didático-pedagógico para a motivação e o incentivo à aprendizagem de conteúdos de física.

BLOG OBJETOS DE APRENDIZAGEM, RECURSOS DIGITAIS E VIRTUAIS PARA O ENSINO DE CIÊNCIAS DA NATUREZA.

S.L.R.da Silva; J. da S. Gaudêncio, P. S. G. Biégas
UEPG, Ponta Grossa, PR, Brazil

O projeto Objetos de Aprendizagem, Recursos Digitais e Virtuais para o Ensino de Ciências da Natureza, desenvolvido pelo DEFIS-UEPG no programa Universidade Sem Fronteiras da SETI-PR, destina-se à promoção da articulação entre as diversas áreas de investigação, como a formação de professores, linguagem e letramento científico, divulgação e comunicação em Ciências, questões metodológicas ou políticas públicas. Outra vertente do trabalho é a sedimentação da Ciência como agente de socialização por seu papel educativo no mundo contemporâneo, uma vez que os recursos tecnológicos disponíveis são responsáveis pela produção de uma série de valores e informações que ajudam os indivíduos a organizar suas vidas e suas idéias, além de auxiliar na formação de opinião sobre as coisas nos ajudando a organizar formas de compreender e se adaptar ao mundo. Uma das ações do projeto envolve a construção de um blog para a disseminação de recursos digitais e virtuais bem como de atividades didáticas que envolvem o seu emprego. O blog funciona como um referatório, um site na web que não faz o armazenamento dos recursos propriamente ditos, mas sim, indica a quem tem interesse onde estão disponibilizados esses recursos. O Blog está hospedado no endereço <http://usf-uepg-objetosdeaprendizagem.blogspot.com.br/> e tem por foco objetos de aprendizagem e recursos digitais e virtuais para o ensino de ciências da natureza. O público alvo do produto são os alunos e professores de ciências da natureza (física, química, biologia e geociências), porém apresenta ferramentas que podem ser utilizadas pelas diferentes áreas de conhecimento. São feitas postagens regulares que apresentam links de sites científicos, programas e aplicativos educacionais. São postadas também, recomendações bibliográficas e notícias da área de ensino, tanto nacionais quanto internacionais.

ATIVIDADES EXPERIMENTAIS SOBRE UNIDADES E MEDIDAS DE GRANDEZAS APLICADAS AO ENSINO DE FÍSICA

A. L. O. Santos¹, H. M. Carriel¹, L. T. Nascimento¹, M. O. A. Silva¹, L. M. H. Leonardi¹, J. Rosa¹

¹ IFPR, Paranaguá, Brazil

² CEPS, Paranaguá, Brazil

Neste trabalho apresentamos um relato de experiência das atividades, voltadas ao ensino de física, desenvolvidas pelos bolsistas do Programa Institucional de Bolsa de Iniciação a Docência (PIBID) do Curso de Licenciatura em Física do Instituto Federal do Paraná (IFPR) - Campus Paranaguá, com os alunos do ensino médio do Colegio Estadual Porto Seguro. Sob a orientação dos professores envolvidos no projeto, os licenciandos ministraram oficinas direcionadas ao estudo de medidas e unidades de grandezas físicas, onde foram propostas atividades experimentais com a utilização de materiais de baixo custo, e tendo como objetivo mostrar aos estudantes do ensino médio a necessidade e importância de se estabelecer um padrão de unidades de medidas. Durante as oficinas os alunos realizaram algumas montagens experimentais, como por exemplo: construção de uma ampulheta com garrafas PET e areia, a fim de realizar atividades envolvendo a medição de tempo; montagem de uma balança de comparação, cuja função foi comparar uma massa padrão com outros objetos. Em todas as atividades foi discutido a questão do erro no processo de medição e também foram propostas questões sobre conversões de unidades. Ao final das oficinas, observou-se que os alunos não apresentaram muitas dificuldades com o processo de medição em si, no entanto, a maior dificuldade foi com relação aos cálculos e utilização de regras para efetuar as conversões das unidades. Desse modo, a equipe do PIBID constatou que para futuras oficinas será necessário readequar as atividades, buscando um modo mais cauteloso para abordar os cálculos e técnicas de conversões de unidades. Nesse sentido, deseja-se contribuir com o ensino de física na escola, e pretende-se mostrar aos estudantes a importância do estudo da física e o quanto isso nos permite compreender os fenômenos da natureza e as tecnologias que fazem parte dos produtos que utilizamos diariamente.

NOVAS LINGUAGENS NA PRÁTICA PEDAGÓGICA DO ENSINO DA FÍSICA ESCOLAR: NOS SIMULADORES

E. Scafí

PUCPR, Curitiba, Brazil

Este estudo consiste em tratar do ensino de Física Escolar a partir da linguagem de simuladores. Para Bakhtin (2003), a linguagem científica surge do convívio cultural, e como tal, é relativamente mais desenvolvido e organizado. O que ele chama de gêneros discursivos secundários, pois no processo de sua formação são introduzidos e reelaborados vários gêneros simples. A princípio, deve-se visualizar que esse trabalho tem por objetivo, tornar mais lúdica a contextualização, ambientação de conteúdos de ensino da Ciência Física. A Física Escolar tem por objetivo estudar os fenômenos naturais e suas tecnologias. Considera-se que haverá uma grande junção de seus saberes com outras áreas do conhecimento, mediante a estética da linguagem. Portanto, a partir do proposto, do uso de simuladores em sala de aula, busca-se uma aprendizagem mais significativa. (MOREIRA, 2005). A metodologia utilizada foi baseada na pesquisa da Web, por meio de simuladores, de acesso livre, e relacionado aos conteúdos da educação básica. Para Pozo (2009), a aprendizagem de ciências deve ocorrer na relação de comparação e diferenciação de modelos, e não da aquisição de saberes prontos e acabados. Deste modo, a implantação da abordagem proposta, almeja-se que o estudante associe os fenômenos físicos, com situações do seu cotidiano e, principalmente, com o aprender a apreender ciências.

Interdisciplinaridade na Prática: Desenvolvimento de uma Ilha de Racionalidade

Josiane Carvalho da Silva, Thalita Rodrigues Ribeiro, Ligia Esteves Maria, Angela Emilia de Almeida Pinto, Noemi Sutil

UTFPR, Curitiba, Brazil

O trabalho desenvolvido pelo grupo de Interdisciplinaridade do Programa Institucional de Bolsa de Iniciação a Docência (PIBID) de nossa instituição, financiado pela Capes, procurou levantar características e pressupostos associados ao desenvolvimento de uma Ilha de Racionalidade interdisciplinar, em uma oficina sobre fotografia e câmera pinhole, com o objetivo de identificar e analisar indícios de aprendizagem de conhecimentos científicos e relações entre áreas de conhecimento. A pesquisa foi realizada com alunos do 9º ano do Ensino Fundamental

e 1º ano do Ensino Médio, de uma escola pública da região central de Curitiba. A pesquisa foi dividida em cinco encontros. O primeiro foi uma conversa com os alunos sobre o que eles esperavam da oficina e seus interesses em Física, no segundo encontro os alunos construiram a camera pinhole, no terceiro e quarto encontro eles fotografaram e revelaram as fotos feitas com a câmera, e no quinto encontro foram discutidos conceitos de Óptica, focados para a câmera pinhole. Buscando valorizar o diálogo e o trabalho em equipe, os alunos puderam participar de todo o processo desde a produção da câmera pinhole até suas técnicas de revelação. Os dados são constituídos por questionários, respondidos a cada encontro, e mapas conceituais elaborados pelos estudantes. Esses dados foram analisados envolvendo análise de conteúdo e de representações. Entre os resultados encontrados, podem ser destacados: a expectativa de aulas diferenciadas e interesse associado à fotografia que possibilitaram ações de envolvimento e estabelecimento de contexto para aprendizagem; apontamentos de possibilidades de aprendizagem de conceitos físicos com o estabelecimento de relações com áreas como Química, Arte e História.

O PIBID E O TRABALHO DESENVOLVIDO PELOS LICENCIANDOS EM FÍSICA DO IFPR NO LITORAL DO PARANÁ

K. V. F. Dias da Silva¹, F. M. Plinta¹, L. M. H. Leonardi^{1,2}, J. Rosa¹

¹ IFPR, Paranaguá, Brazil

² CEPS, Paranaguá, Brazil

Neste trabalho apresentamos um relato das ações desenvolvidas pelos licenciandos em Física do Instituto Federal do Paraná (IFPR) - Campus Paranaguá, no Programa Institucional de Bolsa de Iniciação à Docência (PIBID), em parceria com o Colegio Estadual Porto Seguro. O objetivo do PIBID consiste em promover a inserção dos futuros professores no contexto das escolas públicas para que relacionem a teoria com a prática desde o início da graduação, através do desenvolvimento de atividades voltadas ao ensino sob orientação de um docente da licenciatura e de um professor da escola. Durante o período de realização do projeto, os licenciandos desenvolveram diversas atividades, como por exemplo: relatório da estrutura e gestão escolar com base na análise de documentos e observações da realidade; participação em reuniões e conselhos de classe; oficinas; mostra de experimentos de física e gincanas de foguetes de garrafa PET. Além disso, os bolsistas juntamente com os professores, discutiram, planejaram e ministraram aulas de física para os alunos do ensino médio, propondo atividades práticas com experimentos de baixo custo, a fim de contextualizar os conteúdos abordados em aulas anteriores. Na etapa final de execução do projeto, licenciandos e professores concluíram que os resultados conquistados foram positivos, considerando tanto o ponto de vista da escola quanto da instituição de ensino superior. Com base no relato de alunos, professores e gestores, foi possível perceber a aprovação e satisfação com o trabalho realizado pelos licenciandos. Os envolvidos com o PIBID acreditam que as atividades desenvolvidas neste tipo de projeto contribuem significativamente com a qualificação da formação dos futuros professores e também com a melhoria da educação básica, além de fortalecer a relação da instituição de ensino superior com as escolas públicas da região na qual está inserida.

Medindo o planeta Terra: um experimento interdisciplinar

J. F. Silva, S. B. Soltau

UNIFAL-MG, Alfenas, Brasil

Utilizando as comunidades de jogos on-line e as redes sociais da internet, refizemos a medida da circunferência da Terra resgatando o método empregado pelo grego Eratóstenes mobilizando diferentes disciplinas, tais como Física, Matemática, Geografia e História; propiciando a prática interdisciplinar. Alunos situados em duas cidades distintas mediram a sombra de varetas com comprimento conhecido, no mesmo dia e hora. Tais cidades, que possuem longitudes aproximadas, mas latitudes bastante distintas foram localizadas com a ajuda do software Google Earth. Efetuadas as medições calculamos a circunferência do planeta. Os resultados para o ensino das disciplinas envolvidas foram uma maior participação dos alunos e a oportunidade de compreenderem as correlações entre as diversas áreas do conhecimento envolvidas no projeto, situando a proposta no âmbito da pedagogia de projetos.

ENSINO DE FÍSICA MODERNA: UMA PROPOSTA METODOLÓGICA PARA O ENSINO MÉDIO INTEGRANDO DIFERENTES ÁREAS DO SABERJ.F.T.Vissoto¹, C.D.Canestraro²¹UFPR, Curitiba, Brazil²PUCPR, Curitiba, Brazil

O constante avanço da tecnologia que se faz presente na sociedade principalmente a partir do final do século XIX e início do século XX traz questionamentos, discussões e propostas pelos profissionais do ensino de Ciências, principalmente do ensino de Física as matrizes curriculares do Ensino Médio (EM). Entende-se que há uma necessidade impreterável da inserção dos conteúdos de Física Moderna e Contemporânea (FMC) na formação básica do aluno para que este possa se contextualizar no mundo tecnológico atual, participar da atual sociedade e exercer seu papel de cidadão. Por meio de análises e pesquisas em instituição de ensino pública constatamos que na maioria das vezes os educandos estão cheios de informações e, em especial na área da Ciência, mas não sabem fundamentar os princípios e conceitos envolvidos no assunto. Com isso demonstramos que o ensino da maneira como está ocorrendo hoje já não atende mais as necessidades de um aprendizado significativo. Necessitamos de novos meios e métodos de ensino. Neste trabalho, buscamos entender o que ocorre nas escolas e por que a FMC não é geralmente um conteúdo trabalhado no EM. Depois de fazer esta análise, desenvolvemos uma proposta de ensino que envolve diferentes áreas do saber dentro de um único tema: Radiologia. Dividimos os conteúdos em módulos a serem trabalhados pelas disciplinas, contendo objetivos, metodologia e procedimentos de avaliação. Buscando uma aprendizagem que vai "além dos muros da escola", visamos a formação de futuros cidadãos que consigam filtrar informações, analisá-las, compreendê-las e fazer relações destas com o meio em que vivem.

Como os alunos do Ensino Médio obtém informações sobre Ciência

A. L. M. Zanelatto, F. M. Santos, M. R. Lima, I. Kovalski, A. E. A. Pinto

UTFPR, Curitiba, Brazil

Pesquisas sobre a percepção de ciência e tecnologia são realizadas em âmbito nacional e mais recentemente em escalas regionais e também no ambiente escolar. Nessas pesquisas, o MCT e outros pesquisadores buscam reportar as percepções de ciência e os meios de informação científica e tecnológica da população. Nossa objetivo com esse estudo e investigar as mesmas relações, com uma ênfase nas fontes de pesquisa através do meio de comunicação predominante na população escolar, a Internet. A pesquisa do PIBID, financiada pela CAPES, foi realizada com alunos do primeiro ano do Ensino Médio de um colégio estadual situado no centro da cidade de Curitiba, Paraná. Através da aplicação de um questionário nos moldes do MCT, adaptado em sua quantidade de perguntas para o ambiente e para a finalidade da pesquisa, pudemos constatar que os estudantes pesquisados fazem uso primariamente da Internet como fonte de informação, seja científica ou não. Em continuidade com a proposta de pesquisa, desenvolvemos atividades de exposição científica incluindo uma visita a um dos laboratórios da nossa IES. Nessa visita foi levantada a questão do acidente com o Césio-137 na cidade de Goiânia, onde os estudantes demonstraram interesse sobre o acontecimento. Constatando esse interesse, uma das atividades desenvolvidas envolvia a proposta de pesquisa na Internet sobre o acidente. Essa atividade incluiu um questionário onde os alunos reportavam sobre qualquer pesquisa feita previamente sobre o assunto, onde constatamos que após a visita poucos pesquisaram, ainda que tenham demonstrado interesse durante a visita ao laboratório. Questionamos também a maneira como encontrariam informações na internet. A maioria dos respondentes utiliza uma ferramenta de busca como forma primária de organizar diversas fontes de pesquisa, e uma parte dos alunos utiliza especificamente ferramentas de busca de vídeos para informar-se. A grande maioria utiliza as informações de uma enciclopédia on-line.

SESSÃO DE PÔSTERES 3

Física Geral

Model for the resistance force acting on circular bodies in the imminence of rolling

A. L. O. Bilobran, R. M. Angelo
UFPR, Curitiba, Brazil

The laws of friction are reasonably well understood for the case of blocks in contact with rough plane surfaces. However, as far as bodies with circular sections are concerned, the physics of friction becomes more involving and it is not possible to adopt a simple conceptual framework to explain all phenomena. In particular, there is no approach so far to the problem of the resistance force that opposes to circular bodies that remain at rest while acted upon by small forces. Here we fill this gap by introducing a mechanical model based on both the elasticity theory and Hertz contact mechanics. Our approach furnishes a quantitative expression for the critical force beyond which rest can no longer be maintained. Besides confirming the expected proportionality of the resistance force with the load, our result contains no free parameters and is expressed solely in terms of physical properties of the problem, such as the pressure of the body per unit of superficial area, a relation between the Young modulus of the surface and its Poisson ratio, and the symmetry of the contact.

Partícula clássica na dinâmica de Nosé-Hoover

Graziele Bortolini, Edgard P. M. Amorim
UDESC, Joinville, Brazil

Neste trabalho, estudamos o movimento de uma partícula clássica sujeita a diferentes potenciais (harmônico, Lennard-Jones, Morse e Ratchet) na dinâmica de Nosé-Hoover [1, 2]. As equações de movimento foram integradas numericamente via algoritmo de Verlet. Observamos trajetórias regulares e caóticas no espaço de fase dependendo das condições iniciais [3].

- [1] S. Nosé, *J. Chem. Phys.* **81**, 511 (1984).
- [2] W.G.Hoover, *Phys. Rev. A* **31**, 1695 (1985).
- [3] H.A. Posch, W. G. Hoover e F. J. Vesely, *Phys. Rev. A* **33**, 4253 (1986).

Three level system in the integrable Maxwell Bloch lattices

A. S. M de Castro¹, A. Lima-Santos²

¹UEPG, Ponta Grossa, Brazil

²UFSCar, São Carlos, Brazil

In this work we are considering algebraic and dynamical properties of classical and quantum integrable models in optical phenomena. The so called Reduced Maxwell-Bloch models (RMB) can be applied to describe a wide class of nonlinear coherent phenomena near the resonance in polarizable medium. According Bogoliubov et al. [PRA, 52-1487(1995)], there exist an exactly solvable lattice version of the RMB based on the classical r -matrix and a quantum group structure correspondent to the $su(2)$ q -deformed Lie-Poisson algebra which describes the polarization phenomena due coherent light field interacting with a two level system. In this sense we address the problem of generalization to N -level system based on high spin vertex model solution of the Yang-Baxter equations for $U_q[su(2)]$ quantum group. For this purpose we take the Zamolodchikov-Fateev and the Izergin-Korepin three-state vertex models associated to $A_1^{(1)}$ and $A_2^{(2)}$ Lie algebras, respectively. The former model is the well-known $s = 1$ representation of the $U_q[sl(2)]$. Our main objective is to apply these models to construct the corresponding nonlinear dynamical equations (nonlinear equations and its Hamiltonians) in order to obtain a coherent light field interacting with a three level system or that could point out toward some classes of integrable systems of the RMB type.

Mapa Quântico para Sistemas QuicadosMarcelo Silva Custódio¹, Walter Strunz², Marcus Werner Beims¹¹UFPR, Curitiba, Brasil²Technische Universität Dresden, Dresden, Germany

Neste trabalho obtivemos um mapa quântico para o oscilador harmônico quicado que representa os valores médios das observáveis posição e momento, em cada quique. Com isso esperamos descrever sistemas com osciladores harmônicos quânticos quicados. Assim como no sistema clássico quicado, a dinâmica do mapa é descrita por uma elipse no espaço de fase. Também derivamos um mapa relacionado à largura do pacote de onda onde cada interada representa um quique. Com base na análise da dinâmica de tais mapas esperamos descrever interações mais gerais sistemas quânticos quicados acoplados a banhos térmicos.

Método numérico alternativo para problemas de autovalores

C. A. Duarte

DFIS, UFPR, Curitiba, Brazil

No presente trabalho apresenta-se um novo método alternativo para a solução de alguns casos de problemas de autovalores com equações diferenciais ordinárias. Especificamente, estuda-se o problema de Sturm-Liouville para o conjunto particular de soluções $y(x) \in C$ que convergem para zero no infinito ($\lim_{x \rightarrow \pm\infty} y(x) = 0$). O estudo leva a uma equação secular expressa algebraicamente em termos de uma fração continuada (FC) infinita, a qual é função de uma variável real λ , cuja solução dá os autovalores do problema. Uma peculiaridade dessa FC que a distingue de qualquer outra FC encontrada na literatura é o fato de que a sua dependência com respeito à variável em questão se dá através de contribuições infinitesimais em cada um dos seus quocientes parciais. A extensão do problema para o caso de diferenças finitas é apresentada tomando-se como exemplo a equação de Schroedinger unidimensional independente do tempo, cujos autovalores são determinados numericamente para um caso particular do oscilador harmônico quântico. Pretende-se, no futuro, estender a essência do método para problemas em duas e três dimensões, em que eventualmente pode ser significativo sob o aspecto computacional em relação a outros métodos já existentes.

Método de Monte Carlo aplicado a uma rede fractal Vicsek tridimensionalFARIAS¹, T.S., SCHMIDT¹, M., ZIMMER¹, F.M., MAZIERO², J.¹UFSM, Santa Maria, Brasil²UNIPAMPA, Bagé, Brasil

A natureza magnética da matéria pode ser explicada usando modelos matemáticos que incluem a interação entre os momentos magnéticos intrínsecos (spins) de um sistema. O ferromagnetismo ocorre quando é energeticamente favorável que os spins de uma certa rede alinhem-se em um mesmo sentido. Por outro lado, o paramagnetismo é caracterizado pela desordem na configuração dos spins, que surge como consequência das flutuações térmicas. O modelo de Ising visa explicar, de maneira simplificada, como ocorrem algumas fases magnéticas, considerando a possibilidade dos spins assumirem dois valores: -1 ou +1. A temperatura de um material influencia seu comportamento magnético, sendo que a transição entre as fases magnéticas ocorre, para redes com dimensão maior que um, em uma temperatura crítica T_c . Nem sempre é possível encontrar a T_c para qualquer estrutura de rede de forma analítica. Por isso buscam-se métodos alternativos para obter os resultados desejados. O método de Monte Carlo é um método estocástico muito utilizado em simulações computacionais. Com o objetivo de aproximar resultados para os casos bidimensionais, estudamos uma rede com dimensionalidade não inteira, considerada, portanto, uma estrutura fractal. A rede simulada foi o fractal Vicsek com três coordenadas espaciais e dimensão $D=1,77$. O sistema de spins foi simulado usando o método de Monte Carlo, através do algoritmo clusters de Wolff implementado na linguagem Fortran 90. Obtivemos resultados para magnetização, suscetibilidade magnética, energia interna e calor específico. Os resultados preliminares indicam uma transição de fase entre $T=0,6$ K e $T=0,8$ K. Observamos que o aumento do número de spins da rede melhora quantitativamente a aproximação. Comparado com trabalhos anteriores, que consideram redes fractais com dimensionalidades inferiores, o aumento da dimensionalidade fractal aumenta a T_c , demonstrando haver uma forte correlação entre a dimensionalidade do sistema físico e a T_c .

Sistema Embarcado para Aquisição e Processamento de Dados de Interrogadores Ópticos Detecção de Picos de Redes de Bragg

F. J. A. Baptista, F. C. Janzen, C. Martelli, J. R. Galvao
UTFPR, Ponta Grossa, Brazil

Sensores baseados em fibra óptica têm se mostrado uma ótima alternativa para o monitoramento de diversos parâmetros físicos, tanto em aplicações na indústria como na pesquisa. Comparados aos sensores convencionais, sensores a fibra óptica apresentam: imunidade à interferência eletromagnética, peso reduzido, alta sensibilidade, inércia química e a possibilidade de monitoração remota. Sensores a fibra óptica podem ser utilizados para o monitoramento de deformação, pressão, aceleração, vibração e temperatura. Em todos os casos, a variação da grandeza física monitorada está relacionada à variação do comprimento de onda de Bragg. Um dos tipos de sensor a fibra óptica é aquele baseado nas propriedades das redes de Bragg (FGB – Fiber Bragg Grating). A FGB é uma microestrutura, com dimensões típicas na ordem de 1cm gravada no núcleo da fibra. Para aquisição do sinal dos sensores FGB são usados interrogadores ópticos que são responsáveis pela transdução do sinal óptico em sinal elétrico e também pela transmissão dos dados para uma unidade de processamento. Na unidade de processamento, o espectro é tratado e a variação no comprimento de onda de Bragg é detectada. Para um sistema autônomo, que permita que o sensoriamento e os resultados possam ser obtidos na área onde se deseja monitorar, a escolha de um microcomputador geralmente não é a melhor opção. Assim, faz-se necessário a implementação de um software de monitoramento em um sistema embarcado. Este trabalho mostra os resultados parciais obtidos pelo software implementado em um sistema que utiliza um microcontrolador ARM com núcleo M4 para a monitoração de redes de Bragg.

Bifurcation structures and transient chaos in a four-dimensional Chua model

A. Hoff, D. T. da Silva, C. Manchein, H. A. Albuquerque
UDESC, Joinville, Brazil

A four-dimensional four-parameter Chua model with cubic nonlinearity is studied applying numerical continuation and numerical solutions methods. Regarding numerical solution method, its dynamics is characterized on Lyapunov and isoperiodic diagrams and regarding numerical continuation method, the bifurcation curves are obtained. Combining both methods the bifurcation structures of the model were obtained with the possibility to describe the *shrimp-shaped* domains (SSD) and their endoskeletons. In this work we show that the endoskeleton of a SSD is formed by four main bifurcation curves: two saddle-node curves with one cusp point and two intersected period-doubling curves. These four curves delimit the lowest-period of the structure. We study the effect of a parameter that controls the dimension of the system leading the model to present transient chaos with its corresponding basin of attraction being riddled.

Propriedades do Mapa Padrão na transição do estado conservativo para o dissipativo.

C. A. C. Jousseph^{1,2}, M. W. Beims¹

¹UFPR, Curitiba, Brazil

²UTFPR, Medianeira, Brazil

Uma forma de descrever fenômenos da natureza se dá por meio de modelos matemáticos. Grande parte destes fenômenos podem ser descritos por equações diferenciais ordinárias não lineares que, devido a dificuldade de encontrar suas respectivas soluções analíticas, pode-se transformar estas equações em mapas, possibilitando o estudo das principais características do fenômeno estudado sem que seja preciso encontrar tais soluções. O método transforma um modelo contínuo para discreto e, com o uso de técnicas computacionais, o sistema evolui na forma de iterações utilizando-se de suas soluções numéricas como dados de entrada na nova iteração. Estas iterações significam as passagens temporais na evolução. Um mapa muito utilizado na literatura é o chamado Mapa Padrão que descreve um oscilador quicado, ou seja, um oscilador que recebe um pulso periódico de amplitude controlada durante o movimento. Este trabalho estuda o Mapa Padrão na transição do estado conservativo para dissipativo com a introdução de um termo capaz de provocar perda de energia conforme ocorrem as iterações. O comportamento do Exponente de Lyapunov, tempo de convergência e região de convergência da dinâmica nas Seções de Poincaré é observado a partir de diferentes condições iniciais e ajustes de alguns parâmetros de controle da dinâmica.

Formação de ecótonos em sistemas com 3 competidores

K. Kramer, M.G.E. da Luz
UFPR, Curitiba, Brasil

Ecótonos são regiões de transição entre dois ecossistemas diferentes. Nessas regiões encontramos uma variedade enorme de espécies, inclusive em alguns ecótonos, a variedade de espécies é maior no ecótono do que nos ecossistemas vizinhos. Devido a isso, a formação e sobrevivência dessas regiões é muito importante. Em nosso trabalho, estudaremos como ocorre a formação de ecótonos e quais são as melhores condições para que esses ecótonos sobrevivam durante bastante tempo. Utilizamos um modelo baseado em autômatos celulares, com regras simples de atualização. Os autômatos celulares são um modelo em que dividimos um sistema em uma grade de células ou elementos. Essas células recebem um estado, que define as características da célula. Para evoluírem no tempo, essas células interagem com sua vizinhança seguindo regras simples de atualização. Em nosso modelo, temos três estados possíveis para cada célula. Os estados são: +1, -1 e 0. A regra utilizada diz que uma célula mudará de estado somente se a soma dos estados dos seus 8 vizinhos adjacentes seja maior que sua inércia. A inércia é o equivalente à uma resistência à mudança de estado. Com essa regra de atualização, fazemos com que apenas os estados +1 e -1 tenham força na competição dinâmica, ou seja, consigam aumentar sua densidade, mudando outras células para seu estado. E o estado zero é um estado neutro, que não tem força na competição dinâmica, ou seja, ele não consegue conquistar outras células, permanecendo, no máximo no local onde se encontrava inicialmente. A partir desse modelo, conseguimos fazer com que o estado zero sobreviva nas regiões de fronteira entre os estados +1 e -1, indicando a formação de ecótonos, mas essa sobrevivência se dá apenas em algumas condições específicas.

Properties of phase space of sticky islands

T. Kruger, P. Galuzio, S. Lopes
UFPR, Curitiba, Brazil

In this work we investigate how properties of the phase space can be related to the phenomenon of stickiness. In particular we show that the stickiness of a particular resonance island of the phase space is strongly related to the presence of hyperbolic channels that occur in the neighbourhood of the island. We show that inside these channels an unstable variable make possible to the trajectory to be ejected of the stickiness region. The stickiness of the channel is related to the time the trajectory stays near the island (neighbourhood of the island) before being ejected from the stickiness area. Using the standard map dynamics, we perform an analysis for various K values (the nonlinear parameter).

Diagrama de fases do modelo de Anderson periódico

D. Mello, B. H. Bernhard
UDESC, Joinville, Brazil

O Modelo de Anderson periódico é utilizado na descrição de sistemas de férmons pesados. O modelo considera um orbital f , com energia $E_f (<0)$, em cada sítio da rede, sujeito a uma correlação coulombiana local U , conectado à banda de condução por uma hibridização efetiva V . Empregamos uma abordagem progressiva pelo método da equação de movimento das funções de Green, considerando desacoplamentos em diferentes níveis, em conexão com abordagens anteriores utilizadas na literatura [1,2]. Obtemos os diagramas de fases correspondentes à temperatura nula, incluindo as fases ferromagnética (FM), antiferromagnética (AF) e Kondo (K). As magnetizações m_f , dos elétrons f , e m_c , dos elétrons de condução, são calculadas como parâmetros autoconsistentes. O potencial químico μ é determinado pela condição $n_f + n_c = n$, onde n_f e n_c são as concentrações eletrônicas dos elétrons f e c . No caso simétrico do modelo, $2E_f + U = 0$, e para $n=2$, temos um isolante de Kondo, com $\mu = 0$. Para outros valores de n ou dos parâmetros do modelo, pode ocorrer uma transição de valência, quando a transferência de carga $n_f - n_c$ deve ser calculada também de maneira autoconsistente. Estudamos a evolução das fases magnéticas com a temperatura, pressão e dopagem. São apresentados alguns resultados de densidades de estados e calor específico.

Physical Approach for Vascular Endothelial Growth Modeling.M. Soares¹, A. Diehl¹, R. Travasso²¹UFPel, Pelotas, Brazil²Universidade de Coimbra, Coimbra, Portugal

Angiogenesis is an important biological phenomena responsible for many pathologies and has been an intensive target of research in the last years. Despite of this, the knowledge about tumor induced angiogenesis still is a challenging problem with relevant consequences for diagnosis and treatment of cancer. In this current work we used a multi-scale phase-field model, originally proposed by Travasso et al (2011), in order to understand the mechanical and biological processes related to endothelial growth. The model focuses in one important protein: Vascular Endothelial Growth Factor (VEGF). The VEGF has the task of activating endothelial tip cells (ETC), sprouting new vascularization and working to regulate ETCs migration/proliferation. Therefore, VEGF is the principal motor force of angiogenesis and your study provides a first promising approach about endothelial vessel growth. These aspects were taken into consideration and were introduced in a mathematical model, implemented with a new parallel computational method. The familiar form of these equations allows us to use a simple method of integration through finite differences. Previous results have indicated that this is a good model to describe angiogenesis, predicting endothelial morphology, branch density and caliber of newly formed vascular networks. We compare our results with previous experimental and theoretical approaches.

Método de criptografia baseado em sistemas caóticos espacialmente estendidosR. M. Szmoski¹, S. E. de S. Pinto²¹UTFPR, Ponta Grossa, Brasil²UEPG, Ponta Grossa, Brasil

Propomos e investigamos um método de criptografia de dados baseado em réplicas de redes sincronizadas cujos os elementos são não-síncronos. Este método explora a caoticidade da dinâmica dos elementos dentro da rede e a sincronização entre as réplicas de redes para transmitir dados de modo seguro. Ele também compartilha similaridades com um método denominado computação de reservatório, o qual é associado ao modo pelo qual a informação é processada e transmitida no cérebro. Tanto em um como no outro não há um esquema de codificação de caracteres pré-definido a partir do qual a mensagem é criptografada, mas este é estabelecido durante a própria comunicação por um processo de aprendizagem. Além da sincronização, utilizamos a entropia de transferência que, em um sentido mais amplo, mede a influência da dinâmica de um sistema sobre o outro. Empregamos esta quantidade para verificar a correlação entre o sinal e o estado da rede a cada instante a fim de descodificar corretamente os dados criptografados. Analisamos o comportamento da razão sinal ruído em termos dos parâmetros do sistema bem como a interferência de um intruso astuto. Nossos resultados mostram que o método é eficiente e, ao mesmo tempo, seguro contra intrusos.

Unveiling and exemplifying the unitary equivalence of discrete time quantum walk modelsB. F. Venancio¹, F. M. Andrade², M. G. E. Luz¹¹UFPR, Curitiba, Brazil²UEPG, Ponta Grossa, Brazil

The two major discrete time formulations for quantum walks, coined and scattering, are unitarily equivalent for arbitrary position-dependent transition amplitudes and any topology (Andrade *et al.*, 2009 Phys. Rev. **80** 052301). Although the proof explicitly describes the mapping obtention, its high technicality may hinder relevant physical aspects involved in the equivalence. Discussing concrete examples - the most general constructions for the line, square and honey-comb lattices - here we unveil the similarities and differences of these two versions of quantum walks. We moreover show how to derive the dynamics of one from the other by means of proper projections. We perform calculations for different probability amplitudes such as, Hadamard, Grover, discrete Fourier transform and the uncommon in the area (but interesting) discrete Hartley transform, comparing the evolutions. Our study illustrates the modelsínterplay, an important issue for implementations and applications of such systems.

Motifs em Redes LiteráriasM.A.S.Viana¹, S.E.S.Pinto^{1,2}, R.F.Pereira³¹UEPG, Ponta Grossa, Brazil²ICSMB, Aberdeen, Scotland³UTFPR, Ponta Grossa, Brazil

Esta pesquisa, com base na teoria das redes complexas, tem por objetivo localizar em uma sequência de caracteres, sequência essa gerada por obras poéticas, sonetos de autores famosos, as estruturas de motifs significativos presentes dentro de cada rede gerada por uma obra específica. Como medida padrão na identificação desses motifs usamos a Centralidade de Intermediação, quanto mais alta essa medida, mais importante determinado nó é dentro de uma rede, nó esse que é chamado de string, visto que o mesmo é composto por pequenas sequências de caracteres, que na realidade são as sílabas poéticas de cada soneto, encontradas pela escansão dos mesmos. Após a identificação dos motifs, podemos então gerar uma rede de motifs significativos, e não motifs recorrentes, que são responsáveis pela passagem de informação dentro da rede. Na sequência buscamos uma possível identidade de cada autor por meio do tratado de simbólica, que traz informações sobre a sonoridade dentro de obras poéticas e de como cada autor faz uso disso para expressar suas ideias. Analisamos essas sílabas poéticas relevantes, e os motifs que possuem essas sílabas em sua estrutura, podendo assim, encontrar um possível padrão que defina cada autor. Concluindo podemos dizer que o uso da teoria de redes complexas, aplicada a uma análise literária, é um estudo relevante assim como quando essa teoria é aplicada as áreas biológicas e sociológicas.

O efeito da fragmentação na diminuição das taxas de encontro na busca aleatóriaM. E. Wosniack¹, M. C. Santos¹, E. P. Raposo², G. M. Viswanathan^{3,4}, M. G. E. da Luz¹.¹UFPR, Curitiba, Brazil²UFPE, Recife, Brazil³UFRN, Natal, Brazil⁴UFAL, Maceio, Brazil

Diversos estudos apontam que o processo de fragmentação do espaço diminui o número de espécies animais e vegetais da região afetada. Entretanto, os mecanismos exatos que originam este efeito negativo da fragmentação de habitats permanecem pouco compreendidos na Ecologia. De modo a abordar este problema usando o formalismo de busca aleatória, estudamos como a fragmentação do espaço influencia nas taxas de encontro de alvos quando os demais parâmetros permanecem fixos. Na modelagem do problema, utilizamos simulações computacionais de buscadores super-difusivos que apresentaram uma diminuição na eficiência de busca e nas taxas de encontro em resposta à fragmentação sucessiva dos alvos. Este efeito foi observado em situações onde a densidade global de alvos foi mantida constante, ou seja, a fragmentação do espaço é um mecanismo de diminuição de taxas de encontro. Na motivação biológica do problema, as taxas de encontro podem representar a localização de fontes de alimento, e a diminuição destas pode justificar a perda da biodiversidade em áreas fragmentadas.

Física Atômica e Molecular**Algoritmo Genético acoplado a um índice topológico para eliminação de redundâncias e aceleração do processo de busca de mínimos em aglomerados moleculares**

R.N.L.Baldez, A. A. Schmidt, P. C. Piquini

UFSM, Santa Maria, Brasil

O estudo de aglomerados atômicos ou nanoclusters tem sido impulsionado pelo grande potencial de aplicação em áreas como eletrônica, catálise e armazenagem de hidrogênio, por exemplo. Além disso, estes aglomerados podem ser vistos como os constituintes de blocos de construção para novos materiais. Contudo, a determinação da geometria de equilíbrio dos aglomerados é um desafio teórico formidável, constituindo-se em uma busca sobre uma superfície de energia potencial multidimensional com inúmeros mínimos locais. Dentre os diversos métodos desenvolvidos com a ideia de tornar possível a descoberta do mínimo global, faremos uso do método do Algoritmo Genético (AG). Neste método, inicia-se a busca por uma população de indivíduos (clusters), os quais possuem uma distribuição atômica aleatória. No AG a população evolui através da aplicação de operadores genéticos e novos indivíduos são gerados utilizando o critério de sobrevivência dos mais adaptados. Neste

tipo de metodologia há uma tendência à homogeneização da população, ou seja, após um certo número de gerações, toda a população tenderá a um mesmo indivíduo, eliminando assim, a variabilidade genética. Com a intenção de garantir a variabilidade genética, indispensável para uma busca eficiente via AG, construímos um AG acoplado a um índice que diferencia os diversos indivíduos da população por seu índice topológico. A ideia é que este índice topológico permita eliminar estruturas topologicamente redundantes, reduzindo os cálculos desnecessários e garantindo a variabilidade genética da população. Esta abordagem foi testada através da busca das estruturas de equilíbrio de aglomerados de Ar com 13, 55 e 147 átomos, utilizando a expressão analítica da energia potencial de Lennard-Jones. Nossos testes mostram que a abordagem proposta permite a obtenção do aglomerado de mínima energia em um número menor de passos e com uma taxa de sucesso superior ao mesmo AG que não faz o uso do índice topológico como critério de seleção de indivíduos da população.

Colisões de elétrons de baixa energia com piridina

Alessandra de Souza Barbosa, Diego Farago Pastega, Márcio Henrique Franco Bettega
Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná

Neste trabalho apresentaremos seções de choque calculadas para o espalhamento elástico de elétrons de baixa energia por piridina. Foi empregado o método multicanal de Schwinger [Phys. Rev. A **24**, 2473 (1981); Phys. Rev. A **30**, 1734 (1984)], implementado com pseudopotenciais [Phys. Rev. A **47**, 1111 (1993)] de Bachelet, Hamann e Schlüter [Phys. Rev. B **26**, 4199 (1982)]. Apresentaremos resultados nas aproximações estático-troca e estático-troca mais polarização para energias até 12 eV. Obtivemos para essa molécula três ressonâncias de forma da natureza π^* cujas posições calculadas serão comparadas com os resultados experimentais de Nenner e Schulz [J. Chem. Phys. **62**, 1747 (1975)] e de Modelli e Burrow [J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **32**, 263 (1983)]. A piridina é obtida a partir do benzeno, substituindo um grupo CH por um nitrogênio, mudando a simetria da molécula de D_{6h} para C_{2v} . No benzeno o orbital de mais baixa energia é degenerado e essa degenerescência é removida na piridina. Devido a contribuição do nitrogênio, que é mais eletronegativo, no primeiro orbital, este fica em menor energia que o do benzeno, enquanto que o segundo fica em aproximadamente mesma energia. Para comparar o efeito causado pela substituição de um ou mais CH do benzeno por um N, nós compararemos nossas seções de choque com resultados calculados para o benzeno [J. Chem. Phys. **112**, 8806 (2000)] e experimental para o benzeno [J. Phys. B **34**, 1019 (2001)], para a pirimidina [Phys. Rev. A **84**, 062702 (2011)] e para a pirazina [J. Chem. Phys. **137**, 204307 (2012)]. Os autores agradecem o suporte financeiro do CNPq, CAPES e Finep (CT-Infra), e computacional do Prof. Carlos de Carvalho do LFTC-DFis-UFPR e LCPAD-UFPR e do CENAPAD-SP.

Espalhamento elástico de elétrons por 1,4-dioxano

Alessandra de Souza Barbosa, Marcio Henrique Franco Bettega
Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná

Neste trabalho apresentaremos seções de choque calculadas para o espalhamento elástico de elétrons de baixa energia por 1,4-dioxano ($C_4H_8O_2$). Trata-se de um éter cíclico, que pode ser visto como derivado do benzeno. A molécula 1,4-dioxano pertence ao grupo de simetria C_{2h} , e assim como o benzeno não possui momento de dipolo. As seções de choque foram obtidas empregando o método multicanal de Schwinger [Phys. Rev. A **24**, 2473 (1981); Phys. Rev. A **30**, 1734 (1984)], implementado com pseudopotenciais [Phys. Rev. A **47**, 1111 (1993)] de Bachelet, Hamann e Schlüter [Phys. Rev. B **26**, 4199 (1982)], nas aproximações estático-troca e estático-troca mais polarização para energias até 30 eV. Os nossos resultados calculados serão comparados aos dados teóricos e experimentais de Palihawadana e co-autores [J. Chem. Phys. **139**, 014308 (2013)]. Em geral, há bom acordo entre experimento e teoria. Os autores agradecem o suporte financeiro do CNPq, CAPES e Finep (CT-Infra), e computacional do Prof. Carlos de Carvalho no LFTC-DFis-UFPR e LCPAD-UFPR e do CENAPAD-SP.

Espalhamento Elástico de Elétrons por Moléculas de CF_3Cl , CF_2Cl_2 e CFCl_3

T. C. Freitas, A. R. Lopes e M. H. F. Bettega
UFPR, Curitiba, Brasil

Moléculas de clorofluorcarbonos (CFC's) foram estudadas em vários aspectos devido ao seu papel de poluente químico do meio ambiente, em especial, devido ao seu potencial destrutivo da camada de ozônio. A redução do uso dos CFC's devido a convenções internacionais que visam a proteção da camada de ozônio tornou a motivação anterior menos importante. Mas, esses sistemas apresentam interesse do ponto de vista de física e química básicas, em particular, do estudo dos processos de colisão elétron-molécula. Almeja-se estudar o efeito das substituições de átomos de flúor e de cloro no espalhamento de elétrons pela série de moléculas CF_3Cl , CF_2Cl_2 e CFCl_3 . A estrutura eletrônica do alvo molecular é tratada dentro da aproximação de Hartree-Fock-Roothaan. Para os cálculos de espalhamento é empregado o método Schrödinger Multicanal [Takatsuka e McKoy, Phys. Rev. A **24**, 2473 (1981) e Phys. Rev. A **30**, 1734 (1984)] com Pseudopotenciais [Bettega *et al.*, Phys. Rev. A **47**, 1111 (1993)] de Bachelet, Haman e Schlüter nas aproximações estático-troca e estático-troca mais polarização para energias do elétron incidente de 0,1 eV até 30 eV. São calculadas seções de choque diferenciais, integrais e de transferência de momento. Os resultados dos nossos cálculos são comparados com resultados teóricos e experimentais disponíveis na literatura [Hoshino *et al.*, J. Chem. Phys. **138**, 214305 (2013)]. Os autores agradecem ao Prof. Carlos M. de Carvalho pelo suporte computacional no LFCT-DFis-UFPR e no LCPAD-UFPR e, também, as agências CNPq e FINEP (Projeto CT-Infra).

Anomalias Dinâmicas e Termodinâmicas em um Modelo de Dímeros

C. Gavazzoni, M.C. Barbosa, P.A. Netz
UFRGS, Porto Alegre, Brazil

Usando dinâmica molecular estudamos o papel da anisotropia na região de separação de fases sólido-fluido e no comportamento anômalo em um sistema composto por 250 partículas diméricas interagindo através de um potencial de caroço duro atenuado. Esse estudo nos levou a um resultado inesperado: A introdução de uma anisotropia muito pequena, determinada pela distância entre as partículas que compõem o dímero, leva a um aumento das regiões de anomalias e de fase sólida no diagrama de fases pressão temperatura quando comparado com o modelo monomérico. No entanto, quando aumentamos a anisotropia essas regiões encolhem. Propomos que esse efeito acontece devido ao desacoplamento das energias cinéticas translacional e não-translacional. Com a finalidade de confirmar tal hipótese, definimos ferramentas capazes de medir o papel dos graus de liberdade nesse efeito. Nossos resultados mostram que os diferentes graus de liberdade desempenham um papel fundamental no deslocamento das anomalias no diagrama de fases P vs T.

Método Teórico Computacional para o Estudo de Transferência Eletrônica e de Energia em Sistemas Moleculares

D. A. Hoff, L. G. C. Rego, R da Silva
UFSC, Florianópolis, Brazil.

Processos de transferência de carga são fundamentais para vários processos em Física, Química e Biologia, além de serem de extrema importância para o desenvolvimento de dispositivos de conversão de energia. Apesar de sua relevância, não há métodos teóricos que descrevam a nível molecular o processo de transferência e separação de carga de maneira realista. Neste trabalho, desenvolvemos um método que descreve as dinâmicas quântica (eletrônica) e clássica (nuclear) acopladas para o estudo de processos de transferência de carga e energia em sistemas moleculares e supramoleculares.

Waterlike anomalies of a core-softened fluid under confinement

L. B. Krott, M. C. Barbosa
UFRGS, Porto Alegre, Brazil.

Water is one the most mysterious liquids. In addition to the well known density anomaly it has other 68 anomalous behaviors. The large increase of the response functions as the temperature is decreased let to the hypothesis of the existence of a liquid-liquid critical point. Due to the homogeneous nucleation this coexistence region is not observed experimentally. However, confining water is believe to be a good strategy to avoid the homogeneous nucleation. Considering that, raises the question: does confined water exhibit the same thermodynamic and dynamic properties observed in bulk water? In order to answer to this question we employed molecular dynamic simulations to study a core-softened potential of two length scales confined between hydrophobic plates. The two length scales model in the bulk presents some properties observed in water, like thermodynamic, dynamic and structural anomalous behavior, the vapor-liquid critical point (VCLP) and the hypothetical liquid-liquid critical point (LLCP). In this work we explore the pressure-temperature phase diagram of the model confined between two hydrophobic parallel plates. The molecular dynamics was done with 529 particles at NVT constant ensemble, where the Nosé-Hoover thermostat was used to keep fixed the temperature. The plates are formed by spherical particles in a square lattice and they are separated by a distance $d = 4.2$, that results in particles structured in two or three layers, depending on the temperature and density considered. Trying to understand the changes in the properties of the system, we found that the LLCP and the waterlike anomalies are shifted to lower temperatures and higher pressures in relation to bulk, while the VLCP is shifted to lower temperatures and lower pressures. The solid-fluid transition will occur at different temperatures, depending on the intensity of the hydrophobicity of the plates.

Espalhamento de pósitrons por moléculas de $\text{CH}_x\text{F}_{4-x}$ ($x=0, 1, 2, 3, 4$)

E. Lange, M. H. F. Bettega, S. d'A. Sanchez
UFPR, Curitiba, Brazil

O estudo da interação de pósitrons com a matéria tem despertado grande interesse tecnológico, como na caracterização de superfícies. Na medicina, com a tomografia de emissão de pósitrons, e em ciência básica. Entretanto, o entendimento completo de muitos fenômenos envolvidos nessa interação ainda precisam de estudos mais detalhados. Neste trabalho apresentamos as seções de choque de espalhamento elástico de pósitrons por moléculas de (CH_4) , (CH_3F) , (CH_2F_2) , (CHF_3) , e (CF_4) , para energia até 10 eV. Utilizamos o método multicanal de Schwinger para cálculo da amplitude de espalhamento e, nos casos em que se fazia necessário, foi utilizado o procedimento de *Born closure* para a inclusão dos efeitos de momento de dipolo permanente. O objetivo foi analisar a influência do processo de fluorinação na seção de choque, comparando os efeitos do tamanho da molécula, do momento de dipolo e de outras interações, como a presença de um estado virtual no processo de colisão. Inicialmente, fizemos uma comparação entre as seções de choque de espalhamento de pósitrons por CH_4 e CF_4 . Vimos que, em baixas energias, a seção de choque integral do CH_4 é muito maior que a do CF_4 , devido à presença de um estado virtual. Também observamos que, na comparação das outras três moléculas, que possuem momento de dipolo permanente, o valor absoluto do momento de dipolo é mais relevante que a geometria ou a quantidade de átomos de flúor na molécula. Através desse estudo, pudemos perceber que, em baixas energias, há também uma relação dos fenômenos decorrentes da colisão com o parâmetro de aniquilação medido experimentalmente.

Electron collisions with 1-butene and 2-methylpropene molecules

A. R. Lopes, T. C. Freitas, M. H. F. Bettega
UFPR, Curitiba, Brasil

We report integral, differential and momentum transfer cross sections for elastic scattering of low-energy electrons by several isomers of the C_4H_8 molecules, such as 1-butene and 2-methylpropene molecules. To calculate the cross sections, we use the Schwinger multichannel method [Phys. Rev. A 24, 2473 (1981) e 30, 1734 (1984)] with pseudopotentials [Phys. Rev. A 47, 1111 (1993)] applied in the static exchange plus polarization level of approximation for incident energies up to 15 eV. Although these two C_4H_8 isomers have different geometric structures, our results also show that for these systems, the integral cross sections are very similar in shape

and magnitude. Similarities are also found in the momentum transfer and in the differential cross sections of these isomers. We compare our results from integral cross sections with the total cross sections measured by Mozejko et al. [J. Phys B: At. Mol. Opt. Phys. **45**, 145203 (2012)]. These isomers have two shape resonances, around 2.3 eV and 8.0 eV. The authors acknowledge the computational support from Prof. Carlos Carvalho, and MHFB acknowledge financial support from CNPq.

Espalhamento de elétrons por moléculas de CCl_4 , SiF_4 e GeF_4

Giseli M. Moreira, Alessandra S. Barbosa, Márcio H. F. Bettega

Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná

O espalhamento de elétrons por moléculas tem alta aplicação na área da tecnologia, pois são de grande importância na descrição de plasmas de processamento (meios gasosos onde por meio da aplicação de campos externos contínuos ou alternados são mantidas correntes elétricas). A simulação do ambiente onde ocorre a descarga depende de vários dados de entrada, como por exemplo seções de choque de espalhamento. Nesse trabalho apresentamos os resultados calculados para as seções de choque elásticas integrais, de transferência de momento e diferenciais para o espalhamento de elétrons por moléculas de tetracloreto de carbono (CCl_4), tetrafluoreto de silício (SiF_4) e tetrafluoreto de germânio (GeF_4), para energias de até 50 eV. Utilizamos o Método Multicanal de Schwinger (SMC) implementado com pseudopotenciais para o cálculo das seções de choque. Os resultados dos cálculos obtidos para o CCl_4 foram comparados com os resultados experimentais de P. Limao-Vieira *et al.* [J. Chem. Phys. **135**, 234309 (2011)], e os cálculos para o SiF_4 e GeF_4 com os resultados experimentais de H. Kato *et. al.* [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **45** (2012), J. Chem. Phys. **136**, 134313 (2012)]. Para as três moléculas (que pertencem ao grupo T_d mas foram tratadas dentro do grupo C_{2v}) foram calculadas as seções de choque para as simetrias A1, A2, B1, B2, onde foram observadas as ressonâncias de forma que serão discutidas dentro do grupo C_{2v} . Agradecemos ao apoio do CNPq e ao suporte computacional do Prof. Carlos de Carvalho do DFis-UFPR.

Aprisionamento de elétrons em bases do DNA

F. B . Nunes¹, M. T. do N. Varella², D. F. Pastega¹, T. C. de Freitas¹, M. H. F. Bettega¹, S. d'A. Sanchez¹

¹Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná

²Instituto de Física, Universidade de São Paulo

Sabe-se que elétrons de baixa energia (EBEs) são as espécies secundárias mais abundantes provenientes da interação entre a radiação ionizante e o corpo humano [1]. Esses EBES podem ficar temporariamente aprisionados nas bases do DNA (adenina – A, timina – T, citosina – C e guanina – G), num processo conhecido como ressonância, que pode levar a quebra da simples e dupla fita do DNA [2]. Portanto, é importante conhecer as energias de aprisionamento dos elétrons (EAEs) a essas bases, que podem ser relacionadas às posições das ressonâncias. Nesse trabalho, foram feitos cálculos das EAEs das bases isoladas do DNA, bem como na presença de seus respectivos pares (AT e CG). O estudo foi feito otimizando as geometrias das moléculas utilizando o programa computacional GAMESS [3], na aproximação se segunda ordem de Møller-Plesset (MP2) e o conjunto de base 6-31G(d). Foi então aplicada uma lei semi-empírica de escala [4], que relaciona as energias dos orbitais virtuais às posições das ressonâncias, a fim de se obter os valores de EAEs para cada sistema como uma aproximação para o processo de espalhamento. Além disso, são apresentadas seções de choque para as bases C e G isoladas, bem como para o par CG, resultado de um estudo do processo de espalhamento, utilizando a versão paralelizada [5] do Método Multicanal de Schwinger implementada com pseudopotenciais [6]. Agradecimentos: Fundação Araucária, CNPq, UFPR-TN, FAPESP e prof. Carlos de Carvalho.

- [1] V. Cobut et al., Radiat Phys. Chem. 51, 229 (1998)
- [2] B. Boudaïffa et al., Science 287, 1658 (2000).
- [3] M. W. Schmidt et al., J. Comput. Chem. 14, 1347 (1993).
- [4] S. W. Staley et al., J. Phys. Chem. 98, 116 (1994).
- [5] J. S. dos Santos et al., J. Chem. Phys. 136, 084307 (2012).
- [6] M. H. F. Bettega et al., Phys. Rev. A 47, 1111 (1993).

Identificação de Povidona em comprimidos de Paracetamol por Espectroscopia Fotoacústica

R. L. S. Piazzetta¹, A. Somer¹, J. G. Camilotti¹, A. Gonçalves¹, C. Bonardi¹, G. K. Cruz¹, F. L. Beltrame¹, A. N. Medina², F. Sato², N. G. C. Astrath², A. Novatski¹

¹UEPG, Ponta Grossa

²UEM, Maringá

Neste trabalho, o método de separação de fase do espectro fotoacústico (PRPA method) foi aplicado para identificar e quantificar polivinilpirrolidona, também conhecido como povidona (PVP), presente em uma mistura em pó com paracetamol (PC). Foram estudadas misturas físicas de PVP em PC variando a concentração de PVP de 0 a 30% em massa. Analisando o sinal fotoacústico foi possível identificar duas bandas largas para amostras de PVP (puro), centradas em 1170 e 1440nm e, também, duas bandas largas para amostras de PC (puro) centradas em 1180 e 1370nm. Para amostras misturadas ocorre um deslocamento do centro das bandas atribuídas ao PC devido à adição de PVP. Quando o método de separação de fase é aplicado, minimizando o pico principal do PC (1370 nm) em amostras da mistura, é observado um comportamento linear entre a área do pico de 1440nm em função da concentração de PVP. Sabe-se que por espectroscopia NIR esses compostos apresentam bandas muito largas, dificultando assim, separar o excipiente do paracetamol. Com a utilização do método de separação de fase do espectro fotoacústico foi possível identificar picos distintos de absorção para misturas de PVP e PC em pó. Esta é uma ferramenta vantajosa para analisar a quantidade de PVP misturada ao paracetamol.

Sistemas quânticos unidimensionais: laboratórios para o desenvolvimento da Teoria do Funcional da Densidade

M. B. P. Querne, D. Vieira
UDESC, Joinville, Brazil.

A Teoria do Funcional da Densidade (DFT) se tornou uma das principais ferramentas modernas para o cálculo da estrutura eletrônica da matéria. Formalmente exata a partir dos teoremas originais, o sucesso de aplicações DFT depende de aproximações precisas para o funcional de troca e correlação (XC), em conjunto com estratégias de implementação computacionalmente viáveis. Nesse contexto, propomos aqui a utilização de sistemas quânticos unidimensionais (1D) como laboratórios teóricos, mais simples de se implementar e que ainda podem fornecer importantes pistas para uma descrição mais precisa de sistemas tridimensionais. Especificamente, aplicamos uma aproximação local da densidade dependente de spin (LSDA) a modelos de átomos unidimensionais. Como essa LSDA é incorreta para sistemas monoeletrônicos, ou seja, sofre de um erro de auto-interação, incluímos a correção de auto-interação ADSIC, mantida como um funcional explícito da densidade via ideia de densidade orbital média. Consideramos átomos neutros com $1 \leq Z \leq 4$ e seus íons positivos, determinando os valores de energias totais, potenciais de ionização, distribuições de densidade e potenciais XC, em todos os casos, comparados com valores exatos. Encontramos que a abordagem ADSIC tende a reduzir fortemente os erros apresentados pela LSDA, sobretudo em se tratando dos potenciais de ionização obtidos via autovalores Kohn-Sham mais altamente ocupados (ε_{HO}). Por fim, sabendo que o funcional ADSIC é inconsistente em tamanho, expomos perspectivas para um trabalho futuro direcionado a moléculas unidimensionais.

Física da Matéria Condensada**A model for charge transport in a nano-porous network**

G. A. Emidio , J. A. O. Freire
UFPR, Curitiba, Brazil

Our work is motivated by the Grätzel cell, a type of Solar cell that contains a layer consisting of nanoparticles of the semiconductor TiO₂ sensitized by organic dye molecules (usually a Ruthenium complex). These dye molecules, when illuminated, inject electrons in the TiO₂ nanoparticles that cross the porous layer to be collected at the cell anode. The experiments show that the diffusibility of electrons increases with concentration (more precisely with the illumination intensity). We created a model based on a master equation to test the hypothesis that this increase is caused by the filling of non-percolative paths. Our model uses a nonlinear master equation

that contains a jump rate between sites that depends on the populations of sites. The results for a simple one-dimensional chain reveal that the nonlinearity alone already produces an increase of the carrier diffusibility with concentration. We also studied a onedimensional chain with small branches in the main chain to simulate non-percolative paths connected to a main percolative path.

O Papel da Desordem Energética na Dissociação de Portadores de Carga

J. A. Govatski
UFPR, Curitiba, Brazil

Os processos de dissociação e recombinação de pares elétron-buraco em um meio desordenado tem despertado muito interesse devido a sua importância tecnológica, uma vez que determina no funcionamento de muitos dispositivos baseados em semicondutores orgânicos como, por exemplo, células solares e diodos emissores de luz orgânicos (OLEDs). Utilizando simulações computacionais de Monte Carlo, nesse trabalho nós revisatamos o problema da dissociação de pares elétron-buraco em meios energeticamente desordenados, investigando principalmente o papel da desordem energética neste processo. O transporte no sólido orgânico é modelado através do “hopping” (saltos) do portador de carga em um conjunto de sítios localizados com energias distribuídas obedecendo a uma distribuição gaussiana. Nesse modelo o desvio padrão σ da distribuição gaussiana de energias é uma medida para do grau da desordem do sistema (Phys. Stat. Solid. (b) 175, 15 (1993)). Os resultados de nossas simulações apontam que a probabilidade de dissociação diminui com o aumento de σ , para o caso de campos elétricos muito intensos. Este resultado já foi abordado na literatura e é confirmado em casos em 1D, 2D e 3D. Para o caso 1D pudemos comparar os resultados das simulações com um modelo analítico existente na literatura. Para justificar este resultado, fazemos uma análise das energias características do sistema, e verificamos a influência da desordem energética sobre a dinâmica dos portadores de carga e as probabilidades de salto entre sítios.

Polarização Intramolecular e Separação de Carga em Estruturas Fotossintéticas Artificiais

B. C. Hames, K. T. Mazon, L. G. C. Rego
UFSC, Florianópolis, Brazil.

O interesse por fontes de energia renováveis tem crescido continuamente e, por conta disso, inúmeros estudos vem sendo realizados para compreender e adaptar os mecanismos da fotossíntese natural. Alguns sistemas supramoleculares artificiais já são capazes de desempenhar parte desse processo. Tais sistemas são compostos basicamente por uma estrutura captadora de fôtons (antena), que converte a energia luminosa em excitações eletrônicas, as quais se propagam através de cadeias moleculares até um centro de reação, onde são dissociados para produzir estados de carga separada, com longo tempo de vida. A energia conferida ao elétron pelo processo de fotoabsorção se transforma em energia eletroquímica no centro de reação e pode ser utilizada para produzir eletricidade, no caso de células fotovoltaicas, ou combustíveis em células fotoeletroquímicas. Neste trabalho modelamos um desses sistemas supramoleculares e realizamos simulações da dinâmica dos estados eletrônicos fotoexcitados com o objetivo explicar os fenômenos observados experimentalmente. Essas simulações tem como base a Teoria de Huckel Estendida com a adição de um termo de polarização intramolecular ao hamiltoniano efetivo. Concluimos que o efeito de polarização intramolecular é o responsável pela separação de carga nessa estrutura molecular fotossintética.

Estudo de Irreversibilidades Magnéticas no Supercondutor Granular $\text{YBa}_2\text{Cu}_{2.985}\text{Fe}_{0.015}\text{O}_{7-\delta}$

L. S. Berchon¹, M. L. Hneda¹, J. L. Pimentel Jr.², P. Pureur¹

¹UFRGS, Porto Alegre, Brazil

²UFRGS, Rio Grande, Brazil

Neste trabalho apresentamos um estudo experimental da magnetoresistividade e da linha de irreversibilidades magnética do supercondutor granular de alta temperatura crítica $\text{YBa}_2\text{Cu}_{2.985}\text{Fe}_{0.015}\text{O}_{7-\delta}$. As medidas de transporte foram realizadas com campo magnético aplicado variando entre 1 Oe e 200 Oe . As medidas de

resistividade nas proximidades da transição normal-supercondutora mostram que tal processo ocorre em duas etapas. Inicialmente observa-se que, à medida que a temperatura decresce, a supercondutividade se estabelece no interior dos grãos da amostra. Posteriormente, em temperaturas próximas ao estado de resistência nula, a supercondutividade ocorre via ativação das ligações fracas entre os grãos. A transição resistiva é fortemente afetada e dependente da intensidade do campo magnético aplicado. A linha de irreversibilidades magnética é obtida por meio das medidas de transporte elétrico *ZFC* e *FCW*. Observamos que a linha de irreversibilidades magnética, na região de campos magnéticos aqui estudados, apresenta um comportamento do tipo Almeida-Touless. A interpretação física da linha de irreversibilidade magnética é discutida com base no modelo de vidro supercondutor. Tal modelo parte do princípio da existência de um arranjo desordenado de grãos supercondutores fraca mente acoplados via efeitos de proximidade ou efeito Josephson.

Uso de geometrias PM3 na determinacao da estrutura eletrônica DFT e TD-DFT de derivados de PPV contendo grupos nitrila (CN)

A. Camilo-Jr, J.R. Garcia, F.S. dos Santos, K.C.C.W. dos S. Klider, D.L. Bertuzzi
UEPG, Ponta Grossa, Brasil

Métodos DFT e TD-DFT são reconhecidos por fornecerem boas estimativas das propriedades eletrônicas de polímeros condutores, tais como posição do HOMO, LUMO, gap e espectro de absorção, entre outras, mas apresentam um elevado custo computacional para determinação da geometria de estruturas com dezenas de átomos. Uma alternativa implica no conhecimento prévio da geometria das estruturas de interesse, por exemplo, dados experimentais ou obtidas por outra metodologia teórica de custo computacional menor. Neste trabalho analisamos o uso de geometrias fornecidas pelo método semi-empírico PM3, reconhecido como o mais preciso na reprodução da estrutura geométrica do PPV, para a determinação da estrutura eletrônica do PPV e de uma série de ciano derivados do PPV. Estudamos o efeito da posição e da quantidade de grupos CN em oligômeros, variando o tamanho da estrutura de 2 a 9 anéis benzenicos. Os resultados obtidos são comparados com resultados experimentais disponíveis.

Identificação das fases Rutílio e Anatásio em filmes de TiO₂ por Espectroscopia Raman

J. L. Gomes Jr., A. Novatski, A. Somer, A. Gonçalves, F. Camilotti, G. F. Costa, A. Assmann, G. B. Souza, O. M. Cintho, C. Bonardi, G.K. Cruz
UEPG, Ponta Grossa, Brasil

Titânio puro comercial (Ti), Titânio grau 2 (TiG2) e a liga Ti6Al4V (titânio grau 5 - TIG5) são utilizados para diferentes tipos de implante devido a sua excelente biocompatibilidade a longo prazo. Isto se deve a camada de óxidos de titânio na superfície do metal que podem ser apresentadas em duas fases: o rutílio e o anatásio. Neste trabalho foram preparados dois conjuntos de amostras com os materiais Ti, TiG2 e TiG5 para dois diferentes tratamentos térmicos: um em 600°C e outro a 700°C por 12, 24, 36, 48 e 60 horas. Para o tratamento em 700°C as amostras apresentaram uma coloração azul escuro típica para este tipo de tratamento. Por Espectroscopia Raman foi possível constatar uma ocorrência preferencial na formação de rutílio na superfície das amostras, pois forma observados os principais modos ativos em 144, 448 e 610 cm⁻¹. Já no tratamento em 600°C, as amostras apresentaram uma coloração amarela e foram observados os modos vibracionais em 144, 196, 399, 447, 514, 613 e 630 cm⁻¹ indicando que em 600°C ocorre a formação de TiO₂ tanto na forma rutílio quanto na anatásio.

CARACTERIZAÇÃO DAS PROPRIEDADES MECÂNICAS E ESTRUTURAIS DO AÇO SUPERAUSTENÍTICO ASTM A 744GR. CN3MN EM RELAÇÃO AOS AÇOS MICROLIGADOS (Nb-Mo) E AISI 304.

F.C. Nascimento, W.R. Oliveira, J. Kublitski
UEPG, Ponta Grossa, Brazil

As propriedades mecânicas dos aços sofrem variações em função de diversos fatores, como: composição química, tratamento térmico, etc. Os aços superausteníticos são conhecidos pela grande resistência à corrosão. Este

trabalho teve como objetivo caracterizar a dureza Vickers do aço superaustenítico ASTM A 744GR. CN3MN com diferentes tratamentos térmicos analisando, por meio da DRX, a influência da microestrutura nas propriedades mecânicas. Realizou-se a comparação com o aço microligado em função da sua composição química, bem como, ao aço AISI 304. Foram realizadas medidas de dureza em todas as amostras para investigar as mudanças ocorridas pós-tratamentos térmicos e, no caso do aço microligado, as mudanças em função da sua composição química. Observou-se que o aço superaustenítico tratado a 1200°C, apresentou dureza de $2,80 \pm 0,05$ GPa, enquanto que o aço tratado a 1240°C, apresentou dureza de $1,95 \pm 0,05$ GPa. A amostra solubilizada a 1240°C, apresentou as fases sigma (σ), possíveis carbonetos $M_{23}C_6$ e fase chi (χ) na matriz austenítica conforme identificado por DRX, no entanto a amostra solubilizada a 1200°C apresentou (na maior parte) uma matriz austenítica. Os resultados dos estudos a respeito dos parâmetros de rede obtidos por DRX estão em processo de análise. No aço microligado percebeu-se que a porcentagem de carbono na liga está diretamente relacionada à dureza desse material, embora a adição de elementos de liga, como o Nb e o Mo também afete em menor grau a dureza do mesmo. O aço superaustenítico tratado a 1200°C, apresentou dureza similar ao aço comercial e ao aço microligado. É possível perceber, portanto, que a adição de elementos de liga nos aços microligados não modificou as propriedades mecânicas de maneira significativa. Já no aço superaustenítico, percebe-se que a presença da fase sigma (σ) afeta as propriedades mecânicas do material, como dureza.

Protocols for morphological control of magnetite nanoparticles and image processing for recognize its shapes

V. M. Lenart¹, S. L. Gomez¹, M. P. Calatayud², G. F. Goya²

¹UEPG, Ponta Grossa, Brazil

²UNIZAR/INA, Zaragoza, Spain.

The size is surely a key factor in the application of particles, especially in biomedicine. Recent studies indicate that the shape can also dictates the behavior of nanomaterials in bio-nano interface, e.g., by directly influencing the uptake by the cells. Magnetite nanoparticles are used in magnetic hyperthermia treatments, and are more efficient when they have this ability. There are several ways to synthesize this material, but the thermal decomposition stands out for the quality of the samples. However, the control of nanoparticle's shape is not well documented yet. Besides that, procedures to analyze the shape of the nanoparticles seems to be a point overlooked in many works. Therefore, we propose a basic setup of reagents, capable of varying size and shape, as well as a protocol for analysing the shape. The synthesis of nanoparticles was performed with the thermal decomposition of Fe(acac)₃ in organic medium, in the presence of surfactants oleic acid and oleylamine. The shape was measured by TEM and its quantification was obtained using image processing with the skimage package of the Python language. The variation of the amount of oleylamine in the reaction, between 0-16 mmol, resulted in particles of 7-170 nm respectively. Together with the size, the number of vertices also increased, ranging from spherical, cubic, and truncated octahedral. This behavior was expected due to the ratio precursor/surfactant and also because oleic acid with carboxylic group has a selective binding onto differing energy crystal facets, and oleylamine with a -NH₂ group has a weak and isotropic biding onto the surface of particles. We also found the same type of linear dependence between the size and the ratio precursor/surfactant, already documented, but at a greater range. The shape analysis algorithm has also proven to be usable even in noisy images.

Gaussian and critical fluctuations in the electrical conductivity of $Y_{0.99}Ca_{0.01}Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ and $YBa_{1.98}Sr_{0.02}Cu_3O_{7-\delta}$ single crystals

L. F. Lopes¹, V. N. Vieira¹, F. T. Dias¹, D. L. da Silva¹, P. Pureur², J. Schaf²

¹ UFPel, Pelotas, Brazil

² UFRGS, Porto Alegre, Brazil.

We have studied by electrical magnetoconductivity measurements the influence of the hole doping and ion site disorder, introduced by Ca or Sr chemical doping, on the superconducting paring transition of the $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ superconductor. The measurements were performed in a $Y_{0.99}Ca_{0.01}Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ and a $YBa_{1.98}Sr_{0.02}Cu_3O_{7-\delta}$ single crystals to magnetic fields up to 50 kOe applied perpendicular to the superconducting Cu₂ – O atomic planes. The ac magnetoresistance measurements were performed by a PPMS when low J was applied parallel to the ab crystallographic plane of the single crystals. During the electrical measurements the temperature

was swept (down) very slowly (0.05 K/min). The resistive data points, $\rho(T)$ are spaced closely enough in order to allow a precise numerical calculation of the temperature derivative of the resistivity, $d\rho/dT$. We separate the contributions of thermal fluctuations to the measured conductivity applying a method based on the Kouvel-Fischer analysis of critical phenomena. The first round in-plane electrical conductivity results show the systematic occurrence of Gaussian and tree-dimensional XY (3D-XY) fluctuation regimes, as the temperature is decreasing toward to the T_c of our samples. The partial experimental results show that the chemical substitutions of the 1% of the Y for Ca and the Ba for Sr does not hardly affect the stability of the Gaussian and 3D-XY fluctuation regimes in the magnetoconductivity of the $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ superconductor to $H \leq 1kOe$.

Condutividade térmica do bulk e de nanofios de Silício usando o método de Müller-Plathe

G. A. S. Lorenset, L. B. da Silva

UFSM, Santa Maria, Brasil

O estudo das propriedades de transporte térmico dos materiais é um tema de grande interesse em razão da sua importância no desenvolvimento de tecnologias ligadas à eletrônica. Com o avanço da miniaturização, entender as características térmicas de materiais nanoestruturados, como aqueles baseados no Silício (Si), é de grande importância. Neste trabalho apresentamos um estudo de dinâmica molecular da condutividade térmica κ de bulk e nanofios de Si. Utilizamos o programa LAMMPS para implementar o método de Müller-Plathe para determinar o coeficiente κ de fios com sessões $2.17 \times 2.17 \text{ \AA}^2$, $2.71 \times 2.71 \text{ \AA}^2$ e $3.26 \times 3.26 \text{ \AA}^2$ à temperatura de 500 K. As interações Si-Si são descritas pelo potencial de Stillinger-Weber. Mostramos que a condutividade dos fios depende da sessão, variando de 3 a 5 W/mK, mostrando uma redução de aproximadamente 90% em relação ao bulk, de modo que estes fios apresentam-se como estruturas promissoras para aplicações em isolamento térmico.

The influence of the intra-chain charge transfer on the performance of organic photovoltaic devices using fluorene-oligothiophene copolymers as active layer

C.F.N. Marchiori¹, A. G. Macedo², I.R. Grova¹, M. Koehler¹, L.S. Roman¹, L. Akcelrud¹

¹Universidade Federal do Paraná, Curitiba, Brazil

²Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Curitiba, Brazil

Copolymer based in fluorene and thiophene moieties have been studied as candidates for active layer in organic photovoltaic devices. Study using a bilayer of fluorene-bithiophene copolymer and C₆₀ showed a power conversion efficiency of 2.8% when annealed, indicating that the morphology plays a crucial feature on the PCE. In order to study organic PV cells having polymer with odd or even number of oligothiophenes units as active layer, we used Poly(9,9-n-dihexyl-2,7-fluorene-alt-2,5-thiophene) (denoted as L23), Poly(9,9-n-dihexyl-2,7-fluorene-alt-2,5-bithiophene) (denoted as L43) and Poly(9,9-n-dihexyl-2,7-fluorene-alt-2,5-terthiophene) (denoted as L45) in bilayer structures using C₆₀ as acceptor. Our results indicate that there is a dependence of the $\pi - \pi$ stacking aggregation with the polymer conformation. This intermolecular association, improved by thermal annealing, leads to a better organized morphology for the polymer with an even number of thiophene rings. The favorable morphology enhances then the performance of the devices using this polymer in the active layer. We also investigate the influence of the intra-chain charge transfer (CT) on the performance of the material. We found that this CT decreases the electronic density in the thiophene rings inhibiting the formation of charge transfer states between the copolymer and the fullerene reducing the loss mechanism of efficiency

Produção de nanopartículas metálicas por ablação a laser para aplicações em inativação fotodinâmica na odontologia

T. W. Martins, C. C. Nass Sebrão, V. S. de Oliveira, I. L. Graff, P. H. C. França, V. P. Ditzel Westphalen, A. G. Bezerra Jr

¹UFPR, Curitiba, Brasil

²UTFPR, Curitiba, Brasil

³PUC-PR, Curitiba, Brasil

⁴Univille, Joinville, Brasil

Atualmente, nanopartículas (NPs) tem sido bastante utilizadas como agentes fotossensibilizadores e de apoio para tratamentos fotodinâmicos que empregam fontes de luz de comprimento de onda específico. A este respeito, encontra-se uma modalidade conhecida como Inativação Fotodinâmica (photodynamic inactivation - PDI) que apresenta caráter bactericida, por inibir o crescimento e desenvolvimento de microorganismos. Na odontologia, embora processos químicos e mecânicos removam grande parte dos microorganismos, bactérias residuais são rapidamente detectáveis na maioria dos dentes no momento de um tratamento invasivo. Por este motivo, PDI pode ser uma importante ferramenta, especialmente em tratamentos endodônticos, para prevenir e eliminar infecções. Neste trabalho, descrevemos a produção de NPs de ouro por meio da técnica de ablação a laser (Pulsed Laser Ablation in Liquid - PLAL) em três solventes, geralmente empregados em procedimentos de endodontia, que apresentam tensões superficiais distintas: água, tergilol e propilenoglicol. Os coloides resultantes foram caracterizados com as técnicas de espalhamento dinâmico de luz (DLS) e de espectroscopia UV-Vis. Nosso objetivo foi investigar o efeito da presença das NPs na fotoativação da bactéria *Enterococcus Faecalis*, a mais resistente na área da endodontia. Para isso, as NPs foram combinadas com azul de metileno, um composto muito utilizado em PDI, e esta solução foi aplicada em culturas de bactérias in vitro para, posteriormente, ser aplicada em dentes *ex vivo*. Nossos resultados indicam que a técnica de ablação a laser permite a produção de NPs esféricas e de dimensões bastante reduzidas (<2nm) que poderiam ser empregadas como agentes sinergéticos, a fim de melhorar o efeito fotoativador dos microorganismos. Mais experimentos estão sendo realizados no sentido de produzir NPs de outros materiais, tais como prata e cobre, para realizar diferentes combinações de NPs, fontes de luz e fotossensibilizadores, visando a aperfeiçoar processos de PDI na odontologia.

Análise de dureza Vickers e difração de raio-x de pedras semipreciosas

L.F.Y.Moletta , F.C.N. Borges

UEPG, Ponta Grossa, Paraná

A dureza é a resistência que um material oferece à aplicação de uma força em sua superfície. Nos minerais o ensaio utilizado para identificar a dureza é o de risco-tribologia. Para comparação da dureza de diferentes minerais é utilizada a escala Mohs, uma escala relativa na qual as intermitências não obedecem à proporcionalidade dos números. Assim é difícil compará-la numericamente com outros materiais. Para estudar a dureza selecionamos três pedras semipreciosas: SiO₂ - hexagonal (conhecida como ágata), SiO₂ - monoclinica (conhecida como ônix) e FeS₂ - cúbica (conhecida como piritita). Estas foram selecionadas aleatoriamente, dando prioridade apenas a sua simetria superficial e composição química. As amostras passaram por testes de dureza Vickers com variação de carga, o valor analisado corresponde à média estatística do conjunto de indentações em cada amostra. Observamos que para a amostra SiO₂ - hexagonal foi obtido a dureza de 10,7±0,9 GPa. Para o mineral SiO₂ - monoclinico com a mesma carga foi obtido o valor de 9,5±0,4 GPa. E no mineral FeS₂ - cúbica foi encontrado um valor de dureza bem elevado de 24,2±4,8 GPa. Paralelamente aos ensaios de dureza foram realizadas análises de microscopia ótica visando analisar a morfologia de superfície e possíveis imperfeições nas indentações. As amostras também foram submetidas à difração de raio-X para identificação da composição química e associação com o valor da dureza, comparando-os com Fichas JCPDS. Os valores de dureza encontrados foram intercalados na escala Mohs, fazendo uma relação de dureza Vickers e Mohs.

Morphology study of organic solar cells built with fullerene and PSiF-DBTN. E. Monteiro¹, A. G. Macedo², C. F. N. Marchiori¹, L. S. Roman¹¹Universidade Federal do Paraná, Departamento de Física, PR, Brazil²Universidade Tecnológica Federal do Paraná, PR, Brazil

In the run to reach viable energy sources alternative cheap and with a low environmental impact we investigate materials that can profit a 120000 TW source, the sun. Polymer solar cells (PSC) are cheap and have a relativity facility in large-scale production. Chemical functionalization can significantly change the polymer optical and electrical propriety by changing its electronic structure due to the insertion. That leads to changes in the morphology, and so, a detailed study on this issue is needed. To achieve the morphology we need to reorganize the active layer heating and by controlling its thickness in the deposition. This study preset the response of a device with poly[(2,7-diocylsilafluorene)-2,7-diyl-alt-(4,7-bis(2-thienyl)-2,1,3-benzothiadiazole)-5,50-diyl]) (PSiF-DBT) as donor and fullerene as acceptor materials. Recent studies show that the PSiF-DBT is a promisor material as PSC once present interest power conversion efficiency (PCE) as well its fill factor. Firstly we have determined the best temperature to annealing in respect to the PCE. Then we determine the best thickness by adjusting the concentration of PSiF-DBT in dichlorobenzene with the spin-coating technique. The incident photon conversion power (IPCE), PCE and J_xV curves were taken as well as the profilometry and atomic force microscopy (AFM) for the thickness and surface morphology respectively.

Produção de quantum dots de ZnS via ablação a laser em meio líquido

R. Moos, V. S. de Oliveira, A. G. Bezerra Jr, W. H. Schreiner

UFPR, Curitiba, Brazil

Neste trabalho apresentamos resultados referentes à produção de quantum dots de Sulfeto de Zinco (ZnS) a partir da técnica de ablação a laser. Quantum dots podem ser entendidos como nanopartículas com tamanho reduzido e controlado de materiais semicondutores que, sob determinada excitação, apresentem fluorescência. Esta propriedade é importante para diversas aplicações em fotônica, tais como displays e células solares, e biomedicina, especialmente bioensaios. Utilizamos uma técnica modificada de LASiS (Laser Ablation Synthesis in Solution), na qual partimos de uma solução diluída em álcool isopropílico do material comercial em pó que é irradiada pelo laser. O laser utilizado é um Nd:YAG, QS (5ns), operando em seu quarto harmônico (266nm) a taxa de 10Hz e energias de dezenas de mJ. A luz é focalizada em um recipiente contendo 10 ml da solução. A energia do laser de irradiação é absorvida pelas partículas do pó diluído de tal forma a provocar explosões coulombianas que, por sua vez, implicam em redução de tamanho e produção de nanopartículas com dimensões variadas, incluindo diversas inferiores a 10nm. Assim, podem ser observados efeitos de confinamento quântico, característicos de quantum dots. Nossos resultados preliminares indicam que, por meio da técnica de LASiS, é possível obter quantum dots, os quais apresentam fluorescência na região do visível quando excitados por luz ultravioleta. Os coloides produzidos são estáveis por diversas horas, sem a necessidade de adição de nenhum tipo de estabilizante. Experimentos adicionais estão em andamento para estabelecer metodologias de controle de tamanho dos quantum dots e para elaborar modelos físicos para explicar os diversos comprimentos de onda presentes na luminescência observada.

Dualidades entre teorias na rede: os modelos Z_n

A. F. Morais, P. Teotonio-Sobrinho

USP, São Paulo, Brazil

Em 1920, Wilhelm Lenz propôs um modelo simples para tentar explicar o fenômeno da magnetização em sólidos. Nesse modelo, chamado hoje em dia de modelo de Ising, ele propôs que o arranjo microscópico dos spins dos átomos do material daria origem a um efeito macroscópico que é o aparecimento de um momento magnético não nulo para o sólido. Para um arranjo unidimensional de átomos, o modelo foi resolvido por Ernst Ising, até então aluno de Lenz, em 1925. A solução para o problema bidimensional foi encontrada apenas em 1944 por Lars Onsager, mas para arranjos tridimensionais ainda é um tema de pesquisa. Certas características desse modelo puderam, porém, ser obtidas antes da sua solução exata. Foi este o caso para o modelo bidimensional, para o qual Kramers e Wannier mostraram, em 1941, ser possível relacionar a função de partição original com aquela na

rede dual, definido, assim, uma dualidade entre esses modelos. Desse modo, eles puderam obter uma expressão para a temperatura crítica, na qual o sistema passa a apresentar magnetização. No trabalho a ser apresentado, mostraremos, em linguagem atual, uma generalização do estudo de dualidades, obtendo a temperatura crítica de alguns modelos bidimensionais. Esperamos, desse modo, ressaltar as potencialidades presentes no estudo de dualidades e também a utilidade e facilidade introduzida pelo método matemático utilizado.

Quantum mechanical modeling of excited electronic states and their relationship to cathodoluminescence of BaZrO₃

M. L. Moreira¹, R. U. Fassbender¹, T. Lilge¹, J. Andres², E Longo³

¹INCTMN, Physical and Mathematics Institute (IFM), Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, RS, Brazil

²Departament de Química, Física i Analítica Universitat Jaume I, Spain

³INCTMN, Department of Physical Chemistry, Chemistry Institute, Unesp

First-principles calculations set the comprehension over performance of novel cathodoluminescence (CL) properties of BaZrO₃ prepared through microwave-assisted hydrothermal. Ground (singlet, s*) and excited (singlet s** and triplet t**) electronic states were built from zirconium placement of 0.2 Å in 001 direction. Each ground and excited states were characterized by the correlation of their corresponding geometry with electronic structures and Raman vibrational frequencies which were also identified experimentally. A kind of optical polarization switching was identified by the redistribution of 4d_{z2} and 4d_{xz} (Zr) orbitals and 2p_z O orbital. As a consequence, asymmetric bending and stretching modes theoretically obtained reveal a direct dependence with their polyhedral intracluster and/or extracluster ZrO₆ distortions with electronic structure. Then, CL of the s-synthesized BaZrO₃ can be interpreted as a result of stable triplet excited states, which are able to trap electrons, delaying the emission process due to spin multiplicity changes.

Produção e caracterização de ligas Fe-Ni-Co-Ti-Mo: composição de aço maraging

Glécilla C. S. Nunes, Valdecir Biondo, Paulo W. C. Sarvezuk, Andrea Paesano Jr.

UEM, Maringá, Brazil

Os aços martensíticos são ligas do ferro-níquel com ausência de carbono e têm metais tais como cobalto, molibdênio, titânio e alumínio. Essas ligas são chamadas de aços de força ultra-alta, o que significa características superiores da dureza e de capacidade de soldadura. Tipicamente, estas ligas são usadas em aplicações aeroespaciais, em maquinarias e mais recentemente em centrifugas de enriquecimento de Urânia. Neste trabalho estudamos aço maraging 350 que é um aço com 18% de níquel, 12% de cobalto e baixa concentração de molibdênio e titânio 4,9% e 1,35% respectivamente, as propriedades do material obtido dependem de suas condições de preparação tais como: atmosfera, temperatura e tempo dos tratamento térmicos a que o aço é submetido. As amostras aqui apresentadas foram fundidas em forno de arco voltaico e envelhecidas em diferentes temperaturas durante o período de seis horas. As ligas preparadas foram caracterizadas por difração de raios X e Espectroscopia Mössbauer, os picos encontrados e indexados correspondem aos índices de Bragg da fase cubica de ligas de Fe-Ni, fase característica aços maraging na fase martensita. Os parâmetros hiperfinos de Espectroscopia Mössbauer são coerentes com o comportamento magnético reportado na literatura para o aço maraging. Comportamento magnético é melhor estudado em medidas de magnetização em função do campo aplicado.

Caracterizações estrutural e magnética de filmes finos de FeGa crescidos sobre substratos de ZnSe/GaAs(001).

R. C. Oliveira, J. Varalda, D. H. Mosca

UFPR, Curitiba, Brasil

As ligas de FeGa massivas apresentam magnetostrição, fenômeno que está associado ao ordenamento dos átomos de Ga, distorção tetragonal da estrutura cristalina, alto grau de textura (preferencialmente [001]) e constantes elásticas fortemente dependentes da quantidade de Ga na liga. O controle destes parâmetros é uma

condição necessária para a obtenção de nanoestruturas de FeGa magnetostrictivas. No trabalho desenvolvido aqui, estudamos o efeito da temperatura do substrato e recozimentos nas propriedades dos filmes de FeGa para uma proporção constante de Fe e Ga. Os filmes de FeGa(36nm)/ZnSe/GaAs(001) foram crescidos pela técnica de epitaxia por jatos moleculares com temperaturas do substrato $T_s = 180\text{ }^{\circ}\text{C}$ sem recozimento e com recozimento por uma hora em $320\text{ }^{\circ}\text{C}$, e filmes com $T_s = 320\text{ }^{\circ}\text{C}$. Estudamos a estrutura dos filmes por medidas de difração de raios-x. Essas medidas permitiram determinar os parâmetros de rede na direção [001] das amostras, que são entre 1,7% e 3,8% maiores que o do ferro puro ($a = 0,286\text{ nm}$). Foram observados textura [001] e distorção tetragonal em função das temperaturas de crescimento e de recozimento. Este fenômeno é explicado pela variação da constante elástica do Fe com a adição de Ga. As propriedades magnéticas foram estudadas por medidas de magnetização em função do campo magnético em 300 K e 10 K. A partir dos ciclos de histerese foram obtidas as constantes anisotrópicas K para amostras com 14% e 29% de Ga. Com 14% de Ga, foi encontrado um K 7% maior do que o do Fe puro ($4,5 \times 10^{83}\text{ J/m}^3$), enquanto que para estequiometria de Ga igual a 29% os filmes são isotrópicos. Em conclusão, as propriedades observadas indicam que as amostras de FeGa possuem as características de um material magnetostrictivo mesmo quando crescidas na forma de filmes finos.

Síntese e caracterização do supercondutor $\text{Y}_3\text{Ba}_5\text{Cu}_8\text{O}_{18}$

C. P. de Oliveira¹, F. T. Dias¹, V. N. Vieira¹, D. L. da Silva¹, P. Pureur², J. Schaf²

¹UFPEL, Pelotas, Brasil

²UFRGS, Porto Alegre, Brasil

O objetivo deste trabalho é sintetizar e caracterizar amostras policristalinas sinterizadas do supercondutor $\text{Y}_3\text{Ba}_5\text{Cu}_8\text{O}_{18}$ (Y358), recentemente reportado na literatura. As amostras foram preparadas no Laboratório de Materiais Supercondutores, instalado no Departamento de Física da Universidade Federal de Pelotas. Para a síntese foi utilizada a técnica de reação de estado sólido, e a caracterização foi obtida através de medidas de transporte eletrônico e de momento magnético. Para a preparação das amostras de Y358 sinterizadas foram utilizados precursores químicos de alta pureza (99,999%) de Y_2O_3 , BaCO_3 e CuO . Estes compostos passaram pelas etapas de secagem, pesagem, maceração e calcinação a uma temperatura de 930 K, com posterior prensagem e sinterização. Toda a etapa de sinterização foi realizada em fluxo de oxigênio. Após a sinterização as amostras foram submetidas a medidas de transporte e momento magnético no Laboratório de Magnetismo e Supercondutividade do Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, as quais comprovaram o caráter supercondutor das amostras bem como uma temperatura crítica próxima à 95 K. Os resultados obtidos evidenciaram o caráter granular das nossas amostras, com o alargamento da transição supercondutora devido à aplicação de campo magnético. Com as medidas de momento magnético foi determinada a linha de irreversibilidade magnética. O fato de se tratar de um material recente e com poucos resultados na literatura contribui como motivação na busca pelo entendimento de suas propriedades básicas. Este trabalho se encontra em andamento.

Molhabilidade de filmes de carbono amorfo hidrogenado: Modificação induzida por UV

M.J. Particheli¹, J.M. Pureza¹, R.A.S. Zanon¹, J.F. Fragalli¹, M.M. Lacerda², K.C.G. Höfelmann¹

¹UDESC, Joinville, Brasil

²UFRJ, Xerém, Brasil

Neste trabalho, estudou-se a influência da radiação ultravioleta (UV) na molhabilidade de filmes finos de carbono amorfo hidrogenado (a-C:H). Os filmes foram crescidos sobre substratos de aço pela técnica de deposição PECVD (Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition). As deposições foram feitas mantendo fixos os parâmetros temperatura (ambiente), tensão (800V) e tempo de deposição (1 hora), variou-se a pressão de deposição de 0,1Torr, 0,5Torr, 1,0Torr, 1,5Torr e 2,0Torr. O gás precursor utilizado foi o acetileno. Para caracterização dos filmes foram feitas medidas de Ângulo de Contato com a água, Espectroscopia Raman e Microscopia Confocal. A partir destas análises estudou-se o estado de molhabilidade e a composição química e estrutural dos filmes. Para as pressões de 0,1Torr e 0,5Torr, os filmes estão no estado hidrofílico. Já para as pressões de 1,0Torr, 1,5Torr e 2,0Torr o estado de molhabilidade é o hidrofóbico. Deu-se continuidade nas análises fazendo à exposição dos filmes a radiação ultravioleta com uma fonte de 365nm de comprimento de onda e mediu-se o ângulo de contato para exposições de 5 min, 10 min e 15 min. A incidência de UV modificou o estado de molhabilidade dos filmes depositados a 1,0Torr, 1,5Torr e 2,0Torr tornando-os hidrofílicos, além disso, utilizando espectroscopia antes e

após a exposição, observou-se que houve uma inversão na proeminência dos picos das bandas D e G do carbono, indicando que os filmes tornaram-se mais grafíticos.

Estudo da Transição de Fase de Primeira Ordem no NiTi utilizando técnicas Fototérmicas

R. R. Pezarini, H. S. Bernabe, F. Sato, L.C. Malacarne, N. G. C. Astrath, J. H. Rohling, A. N. Medina
UEM, Maringá, Brazil

Neste trabalho utilizamos as técnicas de Espelho Térmico (ET), Calorimetria de Relaxação Térmica e Deflexão Fototérmica (DF) para detecção e caracterização da transição de fase da liga NiTi, comumente chamado de Nitinol. As fases martensita (B19) em temperatura ambiente e austenita (B2) em alta temperatura foram confirmadas através da difratometria de raios-X (DRX). Determinamos as temperaturas características da transição martensita-austenita utilizando técnicas convencionais como: DSC e dilatometria, e confrontamos com as obtidas pelas técnicas fototérmicas. O comportamento, tanto do parâmetro 952;ET quanto da difusividade térmica, obtidos a partir do ET, mostram significativas alterações na região de transição de fase, permitindo a determinação de suas temperaturas características. Embora, esses parâmetros apresentem boa concordância com o esperado pela comparação com os resultados obtidos através das técnicas convencionais, quantitativamente os valores obtidos, principalmente para a condutividade térmica, mostram discrepâncias bastante significativas, sugerindo a necessidade de se considerar o tamanho finito da amostra, bem como possíveis efeitos da anisotropia dos parâmetros térmicos e mecânicos no modelo para descrever o comportamento da deformação superficial induzido pelo aquecimento localizado do feixe de excitação. Por fim, o comportamento da difusividade térmica durante a transição de fase, obtidos pelo ET, foi confirmado utilizando a técnica de Deflexão Fototérmica modificada. Até onde sabemos, esta é a primeira vez que estas técnicas são empregadas para o estudo de materiais metálicos em função da temperatura, em particular para a determinação de transições de fase de primeira ordem.

Caracterização espectroscópica do sistema TeO₂-Li₂O-BaO

R. L. S. Piazzetta, A. Assmann, A. Gonçalves, G. K. Cruz, F. C. Serbena, A. Novatski
UEPG, Ponta Grossa, Brasil

No presente trabalho, foram investigadas propriedades ópticas e estruturais de vidros teluretos na composição 80%TeO₂-(20-x)%Li₂O-x%BaO (para x = 0, 5, 10, 15 e 20%mol) utilizando as técnicas de UV-VIS e espectroscopia Raman. Através dos resultados de UV-VIS calculou-se o band gap das amostras utilizando a Regra de Urbach, foi mostrado também que ocorre uma diminuição gradual do band gap à medida que Li₂O é substituído por BaO e que, neste caso, há um deslocamento para o vermelho (red-shift). Por espectroscopia Raman é possível evidenciar a mudança estrutural principalmente pelos modos vibracionais localizados em 780 cm⁻¹ (vibrações de pirâmides trigonais de TeO₄) e 730 cm⁻¹ (vibrações dos poliedros de TeO₃ com oxigênios não ligados - NBO) que diminuem suas intensidades à medida que a concentração de BaO aumenta. Cálculos de basicidade óptica, efetuados conforme Duff e colaboradores, mostraram que a substituição de Li₂O por BaO proporciona maior basicidade e, assim, uma eletronegatividade óptica menor, facilitando o movimento de um elétron da banda de valência para a de condução. Tal fato é sustentado pelos resultados de UV-VIS com o decréscimo no band gap. Esse comportamento da basicidade também pode ser explicado considerando que a troca de Li₂O por BaO resulta num aumento na polarizabilidade dos íons de oxigênio, aumentando, assim, a quantidade de NBO, o que é confirmado pelos resultados de espectroscopia Raman. Esse aumento observado na polarizabilidade destaca que o material é propício para aplicações em óptica não-linear.

SESSÃO DE PÔSTERES 4

Áreas Clássicas de Fenomenologia e Outras Aplicações

Effect of the sintering temperature in the properties of the biocomposite Niobium Pentoxide-Hydroxyapatite

T. G. M. Bonadio, J. A. da Cruz, W. M. Lima, A. N. Medina, M. L. Baesso, W. R. Weinand
UEM, Maringá, Brazil

This work shows the effect of sintering temperature in physical, mechanical and structural properties in the composite Nb₂O₅-natural hydroxyapatite. Hydroxyapatite [Ca₁₀(PO₄)₆(OH)₂] is the main biocompatible ceramics because of its significant chemical and physical similarly to the mineral constituents of human bones and teeth. Niobium is abundant in Brazil and niobium pentoxide Nb₂O₅ is simple to obtain, moreover, this oxide is non-toxic and high resistant to corrosion. The composite with these materials showed good biocompatibility properties when tested in vitro and in vivo. It was prepared by high-energy milling of the hydroxyapatite (HA) and Nb₂O₅ (1:1 vol%) and sintering in air atmosphere in nine different temperatures between 900 and 1200°C. DTA and TG evaluation show several transitions in the composite and the anticipation of the melting point differently that occurs in HA or Nb₂O₅ alone. After the heat treatment, the changes in the material structure were evaluated by XRD, and Raman spectroscopy. Above 1000°C, both HA and Nb₂O₅ were totally transformed in new crystalline phases that are PNb₉O₂₅, CaNb₂O₅ and Ca₃(PO₄)₂. The last of them increase de reabsorption of the material. Physical properties as Vickers Hardness and apparent density show interesting behavior near the melting point attributed to the decomposition of the materials.

UTILIZAÇÃO DA ESPECTROSCOPIA FOTOACÚSTICA PARA A DETERMINAÇÃO DA TAXA DE DIFUSÃO DE FOTOSSENSIBILIZADORES NA DENTINA

L. Castro, J. Nagata, F. Sato, R. Terada, M. Fujimaki, M. Baesso
UEM, Maringá, Brasil

O objetivo deste trabalho foi utilizar a Espectroscopia Fotoacústica para avaliar a taxa de difusão do agente fotosensibilizador eritrosina na dentina humana. O corante eritrosina é utilizado principalmente como corante para alimentos, em tintas de impressão, como corante biológico e na produção de produtos corantes da placa bacteriana em dentes. Para a avaliação da profundidade de penetração utilizamos nessa pesquisa a concentração de 57×10^{-4} mol.L⁻¹, preparada em água destilada. Os experimentos foram realizados com a Espectroscopia Fotoacústica na região espectral do ultravioleta-visível. Uma característica da técnica é o fato de que ao invés de medir a radiação transmitida ou refletida pela amostra, com ela mede-se a fração da energia luminosa que é absorvida e transformada em calor. Ou seja, amostras opacas que espalham luz e na forma semisólida podem ser estudadas com esta técnica, além de ser um método não destrutivo. Os resultados mostraram que a profundidade de penetração foi até aproximadamente 850μm, com atenuação da quantidade total para 5% na região de 283μm a partir da superfície onde a substância foi aplicada. Isto indica que a eritrosina apresenta características de permeação que podem ser utilizadas na terapia fotodinâmica (PDT) para a descontaminação da dentina cariada, num processo coadjuvante no tratamento da cárie dentária.

Radiant heat exchange mediated by gaseous atmosphere

C. A. Duarte
UFPR, Curitiba, Brasil

As is well known, the heat exchange between bodies at different temperatures enclosed at vacuum without thermal contact can be described by the Stefan-Boltzmann law of radiation, where each body receives a fraction of radiant heat from the others depending on their distances and individual temperatures, geometrical shapes, emissivities and absorptivities. However, when these bodies are surrounded by a gaseous atmosphere conductive and convective phenomena enter on the scenario, leading to a complex mechanism of heat exchange which left to the concept of *entransy* [1]. Here we study an experimental realization of such situation for two bodies employing a kind of vacuum gauge, on a range of surrounding air pressure between 26 to 1035mbar, and analyze

the heat exchange on the framework of Stefan-Boltzmann law. It is verified empirically that the ratio between the thermal power irradiated by the bodies is independent on their individual heat radiances, and depends only on the surrounding gas pressure [2].

- [1] X. Cheng, X. Liang, Intern. J. Heat Mass Transfer, **54** (2011) 269
 - [2] C. A. Duarte, J Therm Anal Calorim **107** (2012) 425
-

A thermocouple vacuum gauge for low vacuum measurement

C. A. Duarte

DFIS, UFPR, Curitiba, Brasil

Many pressure gauges operate with reference to the thermal properties of the residual gas in the vacuum system. For example, the Pirani gauges [1] measure accurately from 6×10^{-3} to 10^2 mbar, using the variation of electrical resistance of a filament immersed in the vacuum. Voeges apparatus [2] consisted of an electrically heated filament to the middle of which a thermocouple was soldered. Steckelmacher [3] presented an alternative, using natural and forced convection, making possible the measurement for pressure ranges up to $10^1 - 10^2$ mbar. These gauges are based on the loss of heat from a hot filament to the surrounding gas, which depends on the gas heat conductivity and convective effects. We stress a third important term independent of the gas, associated to the radiant heat by the Stefan-Boltzmann law [4]. In the present work, the filament is separated from the thermocouple on Voeges device. In this configuration, the dynamics of heat exchange between the hot filament and the thermocouple is modified, since there is no direct transfer of heat from filament to thermocouple, and the radiant transmission is dominant. It is shown that it is possible to achieve pressure measurements up to at least 800 mbar. The construction of a thermocouple vacuum gauge for the range of pressures from 200 to 800 mbar is reported [5].

- [1] A. Roth, Vacuum Technology (North-Holland, 1982); A. Ellet, R. M. Zabel, PRB **37** (1931) 1102; R. R. Sellenger, Vacuum, **18** (1968) 645
 - [2] W. Voege, Physik Zeit., **7** (1906) 498
 - [3] W. Steckelmacher, Vacuum, **23** (1973) 307
 - [4] C. A. Duarte, J. Therm. Anal. Calorim. **107** (2012) 425
 - [5] C. A. Duarte, Vacuum, **85** (2011) 972
-

Nonlinear optical properties of the E7 thermotropic liquid crystal at the N-I phase transition

V. M. Lenart¹, I. H. Bechtold², R. F. Turchiello³, A. M. Figueiredo Neto⁴ and S. L. Gomez¹

¹UEPG, Ponta Grossa, Brazil

²UFSC, Florianopolis, Brazil

³UTFPR, Ponta Grossa, Brazil

⁴USP, São Paulo, Brazil

The Nematic-Isotropic (N-I) phase transition, which are among the most investigated phenomena in liquid crystals, still pose some interesting problems. According to the Landau-de Gennes theory, symmetry requirements of the nematic quadrupolar interactions lead to a first-order phase transition, with a jump of the nematic order parameter at the transition temperature. This jump, however, is in general quite small. Measurements of enthalpy and volume changes at the transition, as compared with experimental results at melting, fully support this scenario of a weak first-order phase transition, with strong fluctuations, which may leads to an effective tricritical behavior. In this presentation we study the nonlinear optical response of the E7 thermotropic liquid crystal at the N-I phase transition by the Z-scan technique. We will show that the nonlinear optical birefringence of the E7 thermotropic liquid crystal mixture in the neighborhood of the nematic-isotropic transition presents a divergence, which can be associated with an effective critical exponent $\beta = 0.28 \pm 0.03$, and which is thus compatible with the hypothesis of a virtual tricritical point. On the other hand, the nonlinear optical absorption vanishes in the isotropic phase, is negative for the extraordinary beam and positive for an ordinary beam. The parameter SNL, whose definition in terms of the nonlinear absorption coefficient follows the definition of the optical-order parameter in terms of the linear dichroic ratio, behaves like an order parameter with critical exponent $\beta = 0.22 \pm 0.05$, also in good agreement with the tricritical hypothesis for the nematic-isotropic transition.

Study of optical properties of gold agglomerates in liquid crystal system

V. M. Lenart, S. L. Gomez

UEPG, Ponta Grossa, Brazil

The properties of a colloid are determined by the size, shape and size distribution of the particles. Gold nanoparticles are widely studied for the facility in producing different kind of particles and the interesting optical properties that can be used in biomedical and technological applications. However, the stability of a colloid can vary with time or dispersing medium. This creates, among other things, the formation of clusters. These new superstructures have new physical properties which are not well documented. Systems composed by micelles are widely used as a first order approximation for biological applications. In such a sense, we studied the linear and nonlinear optical properties of liquid crystalline composites doped with spherical nanoparticles of gold as a function of the concentration. To measure these parameters, in addition to the usual techniques of characterization, we used the UV-Vis spectroscopy combined with discrete dipole approximation (DDA) to explain the observed absorption bands, and Z-scan technique. STEM-HAADF images confirm the presence of clusters of gold nanoparticles in liquid crystal medium. The simulation by DDA in similar structures result in a spectrum with the same characteristics of the experimental one, which is a red shift of spectrum of an isolated particle, the broadening and the appearance of new absorption bands. This can be caused by electronic confinement due to sharing of electrons in these structures. In this new configuration, the electrons can be thermally excited. This results in the change of the thermal properties which are observed by Z-scan technique. Accordingly, we point out that the optical and thermal properties of the colloidal aggregates in liquid crystal differ from a pure colloidal system, but even on a smaller scale, some of the unique properties of colloids are retained, so some of the applications could be improved according to the these facts.

Scaling law and anti-persistent motion of annihilating defects in a lyotropic liquid crystal

R. R. Guimarães^{1,2,3}, H. V. Ribeiro^{1,2}, H. Mukai^{1,3}, P. R. G. Fernandes^{1,3}, R. T. de Souza⁴, E. K. Lenzi,^{1,2}, R. S. Mendes^{1,2}

¹UEM, Maringá, Brazil

²INCT-SC, Rio de Janeiro, Brazil

³INCT-FCx, São Paulo, Brazil

⁴UTFPR, Pato Branco, Brazil

Topological defects can emerge in any system that presents some kind of ordering. Its ubiquity in nature has been the subject of several studies, from early Universe to condensed matter. In this work, we investigated the annihilation dynamics of defects and antidefects in a lyotropic nematic liquid crystal (ternary mixture of potassium laurate, decanol and deionized-distilled water) using the polarized optical light microscopy technique for the experimental measures and statistical physics techniques for the data analysis. We analyzed *Schlieren* textures with topological defects produced due to a symmetry breaking in the transition of the isotropic to nematic calamitic phase after a temperature quench. As result, we obtained for the distance D between two annihilating defects (defect-antidefect pair), as a function of time t remaining for the annihilation, the scaling law $D \propto t^\alpha$, with $\alpha = 0.390$ and standard deviation $\sigma = 0.085$. This scaling law is in good quantitative agreement with previous investigations on the subject. We further present statistically significant evidence that the relative velocity between defect pairs is Gaussian distributed, anti-persistent and long-range correlated, by using detrended fluctuation analysis. In addition, we show that simulations of the Lebowohl-Lasher model reproduce quite well our experimental findings related to the anti-persistent behaviour of defects in annihilation. Our findings go in the direction to extend experimental results related to dynamics of defects in liquid crystals since only thermotropic and polymeric ones had been investigated.

Técnica de espelho térmico utilizando excitação pulsada em materiais com baixa absorção óptica

G. V. B. Lukasievicz¹, N. G. C. Astrath¹, L. S. Herculano¹, V. S. Zanuto¹, S. E. Bialkowski², L. C. Malacarne¹

¹UEM, Maringá, Brazil

²USU, Logan, USA

Um modelo teórico da técnica de espelho térmico resolvido no tempo utilizando excitação pulsada foi desenvolvido para caracterização de materiais com baixa absorção óptica. Soluções analíticas para a temperatura e para

a deformação termoelástica foram obtidas para três pulsos com perfil diferentes (gaussiano, retangular e delta de Dirac). As soluções analíticas foram comparadas com os resultados obtidos utilizando Método dos Elementos Finitos (MEF). Um software que utiliza MEF fornece soluções numéricas para a equação de difusão de calor e para a equação termoelástica com condições de contorno realistas impostas pela geometria experimental. Os resultados encontrados por meio de MEF apresentaram ótima concordância com as soluções analíticas. Medidas de espelho térmico foram realizados em vidros ópticos e os resultados foram ajustados com o modelo teórico. Os parâmetros ajustados estão em boa concordância com os resultados encontrados na literatura para a absorção óptica, difusividade térmica e coeficiente de expansão térmica dos materiais testados. A modelo teórico combinado com os resultados experimentais mostrou-se útil para a determinação quantitativa das propriedades físicas de materiais homogêneos com baixa absorção óptica.

A general model for laser-induced wavefront distortion in optical materials

L. C. Malacarne, N. G. C. Astrath
UEM, Maringá, Brazil

Laser induced wavefront distortion in optical components may affect performance and stability of optical systems, such as high-power lasers, and is also the base of several photothermal techniques. This distortion is a result of complex photoelastic effects that characterize the degradation and the propagation of the beam. A simple analytical solution is obtained only for low absorbing materials, with the assumption that the stresses obey either thin-disk or long-rod type distributions. In this work, we developed a generalized theoretical model for the optical path change that is related to the temperature profile in a relatively simple manner for all classes of absorbing optical materials. The modeling is based on the solution of the thermoelastic equation and provides time-dependent expressions for the temperature, surface displacement, and stresses. This generalized model could have a significant impact on designing laser systems and has direct application in photothermal techniques, which correlate optical path change to thermal, optical, and mechanical properties of solid materials

Study of the thermal diffusivity for biocompatible precursors for various concentrations of niobium pentoxide mixed with hydroxyapatite

V. V. G. Mariucci, J. A. da Cruz, T. G. M. Bonadio, A. N. Medina, M. L. Baesso, A. C. Bento
Universidade Estadual de Maringá

In this work the effective thermal diffusivity of powder samples is measured trough a photoacoustic technique based on the detection of the rear signal, where the thermal excitation was caused by a modulated laser beam. The proposed technique has a big potential in the study of the thermal properties for any kind of powder. Due to the employed methodology it is possible characterize other types of samples, like, liquids, resins, and gaseous materials. To perform this experiment, a model based in a 3 layered system was developed for the experimental situation. Two powder samples recently in focus due to their biocompatible and bioactivity properties were chosen, being one, the hydroxyapatite HAp [$\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$] and the other, the niobium pentoxide [Nb_2O_5]. Measurements of X-ray diffraction (XRD) and scanning electron microscopy (SEM) images were also made in order to determinate the precise percentage of the compounds on the mixtures, where the adopted method for mixtures obeyed the general formula $[(1-x)(\text{HAp})+(x)(\text{Nb}_2\text{O}_5)]$ with $0.0 \leq x \leq 1.0$. According to the experimental results, the effective thermal diffusivity oscillates around 6.5×10^{-6} and tends to a value around $0.70 \times 10^{-6} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ for mixtures of HAp containing above 70 % of niobium pentoxide. The XRD results revealed that the spectrum of such percentage tends more to the pure niobium pentoxide than to the HAp spectra, and the SEM micrographs showed a coating formed by the smaller particles of HAp over the bigger particles of niobium pentoxide.

Photosensitizer and light diffusion through dentin in photodynamic therapy

A. C. Nogueira, A. X. Graciano, J. Y. Nagata, M. Fujimaki, R. S. S. Terada, A. C. Bento, N. G. C. Astrath, M. L. Baesso
UEM, Maringá, Brazil

Photodynamic therapy has been considered a potential antimicrobial modality against oral infections, including dental caries. A model to estimate the penetration of both photosensitizers and light through human dentin, a factor of interest in photodynamic therapy, is proposed. The photoacoustic spectroscopy technique was used to evaluate in vitro dentin permeability of three different photosensitizers. Using the dentin optical absorption and scattering coefficients, it was possible to propose a semi-quantitative model predicting both photosensitizer and light doses within dentin. The graphic illustrations obtained provided guidelines that may be useful in photodynamic therapy protocols used as antimicrobial tools in caries lesions

Thermal Wave Interferometry Applied To The Study Of Thermal Effusivity of Thermal Grease Via Sensitivity Thicknesses And Excitation Source Monochromatics And Polychromatic

A. M. Picolloto, V. A. Mariucci, A. N. Medina, M. L. Baesso, A. C. Bento
UEM, Maringá, Brazil

The Thermal Wave Interferometry (TWI) is a nondestructive technique, which is based on the thermal wave generation inside sample by modulated radiation incidence. One of the biggest advantages of TWI is your sensitivity for determination of thermophysical properties like, thermal diffusivity, (α), thermal effusivity, (e), thermal conductivity, (K), and volumetric heat capacity, (ρc_p) by varying the layer thickness. Thermophysical properties of thermal grease were obtained using three different excitation sources, two monochromatic argon laser with emission at 514nm, diode laser at 532nm and a xenon arc lamp with white light. For each of the measurements, the thermal grease was deposited on two substrates, stainless steel and glass soda lime, varying their thicknesses in ranges from (20-278) nm for stainless steel and from (38-343) nm for glass soda lime. The aim of this study was the determination of the thermal effusivity for thermal grease as to the same time check the TWI sensitivity for different light sources, and for different samples thickness. The values moduled to the thermal grease were: $e = 0.43 \pm 0.03 \text{ Ws}^{0.5}/\text{cm}^2\text{K}$, $\alpha = 7.6 \pm 0.4 \times 10^3 \text{ cm}^2/\text{s}$, $K = 38 \pm 4 \text{ mW/cmK}$ and $\rho c_p = 4.9 \pm 0.4 \text{ J/cm}^3\text{K}$. In general the results showed no significant variation for different excitation sources as well as substrates, ensuring the viability in the TWI for monochromatic and polychromatic sources.

Considerações sobre o timbre do violino

B. S. R. Santos, T. C. Freitas
UFPR, Curitiba, Brazil

Apresenta-se neste trabalho a reunião de informações acerca da acústica dos instrumentos musicais, em especial do violino. Tais informações possuem como fonte, de forma geral, pesquisas realizadas por físicos, matemáticos, construtores de instrumentos musicais, dentre outros estudiosos e curiosos (por exemplo: Martin Schleske, CASJ Vol.4, No. 5 (Series II), May 2002). O direcionamento deste trabalho dentro do ambiente da UFPR ocorre associado ao Curso de Luteria, onde estão em início as pesquisas da instituição com relação a este assunto. Como apoio ao desenvolvimento de pesquisas começa a surgir o ambiente do laboratório de acústica. Neste local são realizados experimentos, inclusive com base no material teórico pesquisado, mas também nos trabalhos de autoria, criados dentro da instituição. Utiliza-se, portanto, o questionamento como uma função da existência do curso. Como apoio teórico, assim como na orientação dos experimentos, são tomadas referências de explorações científicas realizadas no mundo todo e em diversas épocas. O número destas pessoas que destinam suas pesquisas ao estudo de instrumentos musicais é pequeno; mas limitado ainda quando se trata do estudo de especificidades do timbre e suas aplicações práticas. Em especial Hutchins, Schleske, Dünnwald, Jansson, Rossing, Moral e Meinel. Com ênfase nas descobertas sobre o timbre dos instrumentos musicais, busca-se descobrir formas de relacionar resultados sonoros com as propriedades físicas mensuráveis dos materiais utilizados na construção do violino. Assim, almeja-se associar alterações de timbre a ajustes realizados em partes do instrumento, desenvolvendo um caminho de descobertas para alterações práticas planejadas; combinando ainda a acústica, estrutura e estética.

Aplicação da técnica de lente térmica no estudo de soluções aquosas do corante Eosina Y em função da temperatura

L. S. Herculano, N. G. C. Astrath, L. C. Malacarne, V. S. Zanuto, G. V. B. Lukasievicz, O. A. Capeloto
Universidade Estadual de Maringá, Maringá, Brazil

Eosina Y é um corante pertencente à família dos corantes xantênicos, apresentando larga absorção de luz na região visível do espectro eletromagnético e alto rendimento quântico de fluorescência, sendo largamente empregado em técnicas de microscopia óptica e na detecção de submicrogramas de proteínas [1-2]. Recentemente, a eosina Y vem sendo aplicado como agente gerador de oxigênio singuleto em terapia fotodinâmica. A geração do oxigênio singuleto se dá através da interação da luz com o agente fotossensibilizador, podendo também, ocasionar a fotodegradação da eosina Y, diminuindo a eficiência de produção de oxigênio singuleto. Neste trabalho, utilizou-se a técnica de lente térmica para investigar, a dependência da eficiência quântica de fluorescência e da fotodegradação da eosina Y em função da temperatura e no regime de baixa absorção (43.0 nM). No experimento de lente térmica usual, a temperatura aumenta localmente na amostra, devido à absorção parcial de energia de um feixe de laser. A variação de temperatura induz um gradiente de índice de refração que é provado por um segundo feixe, cuja intensidade central é medida utilizando a aproximação de campo distante. Em amostras líquidas contendo substâncias fotossensíveis a energia absorvida pode induzir a fotodegradação mudando a concentração das espécies absorvedoras criando uma dependência temporal do coeficiente de absorção, ocasionando uma variação na amplitude do efeito de lente térmica. Usando um modelo teórico para a técnica de lente térmica na presença de fotodegradação, combinado com outras técnicas, obteve-se os valores da eficiência quântica de fluorescência e a dependência da difusão de massa em função da temperatura. Os resultados demonstram o potencial da técnica de lente térmica como uma técnica quantitativa para o estudo de compostos fotossensibilizadores em função de diferentes parâmetros externos [3].

[1] M. Charkraborty, A. K. Panda, Spectrochim. Acta, A, 81, 458-465 (2011).

[2] A. A. Waheed, P. D. Gupta, J. Biochem. Biophys. Methods, 42, 125-132 (2002).

[3] L. S. Herculano, L. C. Malacarne, V. S. Zanuto, G. V. B. Lukasievicz, O. A. Capeloto, N. G. C. Astrath, J. Phys. Chem. B, 117, 1932-1937 (2013).

Física das Partículas Elementares e Campos**Fotoprodução de quarks pesados em interações coerentes no LHC**

Y. L. Avila, V. P. Gonçalves, W. K. Saute

Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, RS, Brazil

Uma das questões de interesse em física hadrônica é a determinação da distribuição partônica dos hadrons, a qual possui uma grande incerteza associada ao conteúdo de glúons em partículas de altas energias (pequeno x). Neste regime, os hadrons são constituídos predominantemente por glúons. Um processo que permite estudar a distribuição partônica é o de fotoprodução de quarks pesados, cuja seção de choque é dependente da distribuição de glúons do hadron. As medidas do colisor elétron x próton (ep) HERA deste processo não possibilitaram a distinção entre as diversas parametrizações das distribuições partônicas. Futuras medidas deste processo em colisões ep somente serão possíveis com a implantação do colisor LHeC. Uma alternativa é utilizar o Grande Colisor de Hadrons (LHC) para o estudo de colisões fóton x hadron. Neste trabalho estudamos a produção de quarks pesados em interações coerentes no LHC, considerando diversas parametrizações existentes para as distribuições de glúons. Estimamos a seção de choque de fotoprodução dos quarks charm e bottom e as correspondentes distribuições de rapidez, considerando interações coerentes próton x próton para as energias do LHC. Nossos resultados demonstram que este processo pode ser utilizado para vincular o comportamento das distribuições partônicas para altas energias.

Um estudo sobre a existência de partículas supersimétricas de vida longa em raios cósmicos

V. M. Becker, L. F. Mackedanz
FURG, Rio Grande, Brazil

Um problema em aberto na física de partículas está relacionado aos modelos supersimétricos da teoria, que podem fornecer uma explicação para a matéria escura e a assimetria nas medições de fluxos de elétrons e pósitrons na atmosfera terrestre. Como as energias envolvidas nos processos são facilmente alcançadas em processos de raios cósmicos, verificar a existência destas partículas nos chuveiros de partículas decorrentes da interação dos raios cósmicos com a alta atmosfera terrestre é uma questão importante para verificar a correção destes modelos. Neste trabalho, utilizamos as simulações de chuveiros atmosféricos, através de códigos Monte Carlo, para verificar a possibilidade de criação de partículas supersimétricas estáveis, de vida longa ($\sim 10 - 15$ s), compatíveis com os modelos teóricos que estudamos, em especial o Modelo Padrão Supersimétrico Mínimo (MSSM). Ao implementar o código com as premissas deste modelo teórico, esperamos estimar a probabilidade de criação destas partículas e comparar com os dados de altíssima energia obtidos pelo Observatório Pierre Auger. As características das partículas assim detectadas servem para novos cálculos quanto aos problemas citados anteriormente. O trabalho ainda apresenta alguns resultados simples, basicamente considerando a calibragem do código para implementar as mudanças. No entanto, podemos sinalizar que o código escolhido tem se mostrado eficaz quanto às alterações para incluir os modelos supersimétricos. Nos próximos dois meses, estaremos trabalhando com o programa em seu estado mais próximo do final, o que nos permitirá gerar as comparações propostas neste trabalho. Podemos neste momento dizer que o código já nos permite selecionar eventos compatíveis com partículas supersimétricas, ainda que não tenhamos condição de inferir suas características. A determinação correta dos eventos envolvendo partículas supersimétricas nos permitirá definir os limites de aplicação dos modelos presentes na literatura, mas a maior importância deste trabalho está na sinalização das características destas partículas para comparação posterior com dados de matéria escura.

Would be the photon a composed particle? quantization of field fluxes in electromagnetic radiation

C. A. Duarte
DFIS, UFPR, Curitiba, Brasil

The classical and the quantum expressions for the energy of electromagnetic radiation (ER) are essentially very different in nature: the former arrives from classical electrodynamics and is expressed by the flux of energy of ER by unit time by an unit of area (normal to the direction of the wave propagation), which is known as the Poynting vector. On the other side, the quantum version is the expression postulated by Einstein based on his interpretation of the photoelectric effect, also sustained by Planck's theory for the black body radiation, and expresses that the electromagnetic radiation is quantized in units of $h\nu$, being h the Planck's constant and ν the frequency of the electromagnetic radiation. While the classical expression is related to a density, the quantum expression is related to the magnitude $\epsilon = h\nu$ which is considered as the energy of a single photon. Intrinsically, this impasse traduces that the classical expression is a continuous magnitude, while the quantum one leads to the conception of the energy of the ER as a discrete magnitude. The conciliation between both panoramas is made considering that a given (classical) energy flux is equal to the number of photons flowing per unit time per unit of area. In the present work, it is made a comparative analysis between the classical and the quantum expressions for the energy of ER. The comparison points to the possibility of the quantization of the magnetic and the electric field fluxes in the ER, leaving to consider the photon as composed by a pair of magnetic and electric flux quanta [1].

[1] accepted for publication in Rev. Bras. Ens. Fis.; available at <http://arxiv.org/abs/1305.3602>

Quantum Double Models From A Spacetime Perspective

M. J. B. Ferreira, P. Padmanabhan, P. Teotonio-Sobrinho
USP, São Paulo, Brazil

Quantum double Hamiltonians are derived from transfer matrices constructed using Kuperberg 3-manifold(2+1 D spacetime) invariants. The degrees of freedom, living on the links of the triangulated spacetime, belong to the involuntary Hopf algebra whose structure constants are used to construct the invariant. Such a construction

naturally leads to the star and plaquette operators of the quantum double Hamiltonians, of which the toric code is a special case when the Hopf algebra is $\mathbb{C}(\mathbb{Z}_2)$. This formulation is convenient to study the ground and excited states of these generalized quantum double models where they can naturally be interpreted as tensor network states. The degeneracy of the states are also computed using these topological invariants.

Implementação de Detector de Múons para Estudo da Incidencia de Partículas Enérgicas em Santa Maria - RS e Região

B. Konrad¹, E. Lüdke¹, A. G. R. Adornes¹, A. M. Vieira¹, C. O. Graça¹, R. B. Adornes²

¹UFSM, Santa Maria, Brazil

²IFF, Júlio de Castilhos, Brazil

Os mûons originados em chuveiros de partículas naturalmente fornecem uma interessante ferramenta de pesquisa, visto que em laboratório ainda não se conseguiu produzir eventos de tamanha energia como a que envolve sua ocorrência. Devido à notável importancia em astrofísica, física da matéria condensada e física de altas energias por suas características, o estudo dos mûons mostra-se promissor tanto em quesitos teóricos quanto experimentais. Para tal, encontra-se em desenvolvimento um projeto para a construção de um mini-telescópio de detecção de mûons que seja confiável, prático e viável economicamente. Este projeto contará com o desenvolvimento de tecnologias para a utilização de válvulas fotomultiplicadoras acopladas a cintiladores de iodeto de sódio, adaptações/instrumentação NIM adequada e uma placa computadorizada dotada de um microprocessador ARM (SoC Broadcom BCM2835 com microprocessador ARM1176JZF-700 MHz e memória vídeo VideoCore dedicada de 256 Mb) com memória anexa de 512 Mb e distribuição Linux rodando rotinas e sub-rotinas em linguagem Python e C++ para a coleta, refinamento e estudo de dados. Com vistas a obter informações sobre a incidencia de mûons em Santa Maria - RS e região para formular e avaliar modelos de ocorrência e correlações com tempestades solares e geomagnéticas através da implementação desde equipamento, estão sendo desenvolvidos os estudos iniciais em física moderna, instrumentação nuclear e para astrofísica de altas energias, desenvolvimento de rotinas, sub-rotinas e software e eletrônica aplicada.

CP Violated NN Interaction and Delta Ressonances

R. Lauxen, C. M. Maekawa

FURG, Rio Grande, Brazil

The QCD sector of Standard Model also has sources of CP violation. The lowest dimension lagrangian comes at dimension five and it is the QCD- \bar{b} (θ) term. The experimental bounds obtained in the measurements of EDM of particles have shown that the contribuition from QCD- \bar{b} (θ) term is very small. There are other sources at dimention six and they are EDM and Color EDM of quark, Color EDM of gluons and four quark operators. The measurements of EDM of particles are not enough to disentangle the contribuition that comes from several sources and measurements in a more complex system are required. For the case of nuclei CP-odd NN interactions comes into play. In the $SU(2)$ sector the CP-odd NN interaction was built up to next-to-leading order in the framework of Chiral Perturbation Theory and at this order only pion and nucleon degrees of freedom are needed. Althoug the quarks degrees of freedom seems to be not present in the studies of nuclear system, the nuclear interactions between nucleons can be related to underline principles of QCD. This is achieved by Chiral Perturbation Theory and a program in order to describe the nuclear forces in this framework has been performed. Chiral Pertubation Theory is based on the same principles of QCD and the pion plays the role of goldstone boson of the theory. In order to extend the study of CP violated NN interaction up to higher order, ressonances degrees of freedom like Delta has to be considered. In this work we show how to built a theory with π , N and Δ degrees of freedom.

Probing the Color Glass Condensate at forward rapidities and very low transverse momenta in pp collisions

M. L. L. da Silva, V. P. Gonçalves
UFPel, Pelotas, Brazil

The description of the hadron production at very forward rapidities and low transverse momentum is usually made using phenomenological models based on nonperturbative physics. However, at high energies and large rapidities the wave function of one of the projectiles is probed at very small Bjorken x , being characterized by a large number of gluons. In this kinematical regime, a new state of matter - the Color Glass Condensate (CGC) - is expected to be formed. One of the main characteristics of such system is the presence of a new dynamical momentum scale, the saturation scale Q_s , which can assume values very larger than the QCD confinement scale Λ_{QCD} and give the scale of the running coupling constant. In this paper we assume that in particular kinematical region probed by LHC forward (LHCf) experiment the saturation scale can be considered the hard momentum scale present in the process and calculate the forward neutral pion production at very low- p_T using a perturbative approach. We demonstrate that the CGC formalism is able to successfully describe the LHCf data, which can be considered as a compelling indication of the presence of non-linear QCD effects at LHC energies.

Produção de Charginos e Neutralinos Dentro do MSSM com Diferentes Cenários Snowmass Points And Slopes (SPS)

F. K. Nobrega, M. C. Rodriguez
FURG, Rio Grande, Brasil

Atualmente, os modelos supersimetricos tem sido a classe de modelo mais estudadas fenomenologicamente para suceder o modelo padrao, uma das razoes para isto e que elas resolvem varios problemas do MP, tais como: problema da hierarquia, unificacao das constantes de acoplamento e outros. Das classes de modelos supersimetricos, a mais estudada e a versao Minima chamada de Modelo Padrao Supersimetrico Minimo (MSSM). Neste modelo existem novas partículas preditas, sendo as mais leves os neutralinos e charginos. Por isso, neste trabalho analisamos a producao (com o programa freeware CalcHep) de charginos e neutralinos dentro do MSSM para colisões envolvendo Proton-Proton no contexto do Large Hadron Collider (LHC). Usamos este programa pois nos permite efetuar todas as contas a nível de árvore de maneira rápida e precisa. Apresentamos a seção de choque total de produção destas partículas versus suas massas, incluindo no mesmo gráfico os pontos que correspondem aos diferentes cenários (SPS). Utilizamos estes cenários pois é uma convenção para facilitar a comunicação entre teóricos e experimentais

Deformed Quantum Double Models from Deformed Spacetime Invariants

M. J. B. Ferreira, P. Padmanabhan, P. Teotonio-Sobrinho
IF-USP, São Paulo, Brazil

Kuperberg 3-manifold invariants are used to construct quantum double Hamiltonians based on the quantum doubles of \mathbb{Z}_2 , \mathbb{Z}_d and S_3 . The invariants capture the transfer matrix of these Hamiltonians by treating the 3-manifold as the time evolution of a 2D lattice on which the toric code lives. Deformations to these Hamiltonians are obtained by deforming the 3-manifold invariants. According to the type of deformation considered we obtain various models including the ones studied as perturbations to the quantum double models studied in the past. This procedure introduces a systematic approach to exploring deformations, including perturbations, in topologically ordered systems. These methods can be easily extended to models based on arbitrary finite groups and finite-dimensional involutory Hopf algebras. We also provide the tensor network representations of the ground states of these deformed models. This method helps us obtain exact expressions for the ground states as tensor network states.

Saturation effects in the Deeply Virtual Compton Scattering at High Energies

D. Spiering, V. P. Goncalves

Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, RS, Brazil

The understanding of the high energy (small x) regime of Quantum Chromodynamics (QCD) has been one of the main challenges of this theory, which has been intensely investigated through high energy collision experiments. This regime, where one expects to observe the non-linear behavior predicted by theoretical developments, has been explored in ep collisions at DESY-HERA and pp/dA collisions at BNL-RHIC and in $pp/pA/AA$ collisions at CERN-LHC. In particular, exclusive processes in deep inelastic scattering (DIS) have appeared as key reactions to trigger the generic mechanism of diffractive scattering. The diffractive vector meson production and deeply virtual Compton scattering (DVCS) have been extensively studied at HERA and provide a valuable probe of the QCD dynamics at high energies. In a general way, these processes are driven by the gluon content of target (proton or nuclei) which is strongly subject to parton saturation effects as well as considerable nuclear shadowing corrections when one considers scattering on nuclei. In particular, the cross section for exclusive processes in DIS are proportional to the square of scattering amplitude, which turn it strongly sensitive to the underlying QCD dynamics. In this contribution we compute the cross sections for the DVCS process relying on the color dipole approach and considering a phenomenological model for the dipole - target cross section. We show that this approach is able to describe the DESY-HERA data and that saturation physics is relevant for the exclusive observables in future electron-proton colliders.

Funções Espessura e Sobreposição Nuclear em Colisões Pb-Pb Ultrarelativísticas no LHC

A. Quadros, C. Mariotto

FURG, Rio Grande, Brazil

Colisões nucleares entre íons pesados de Chumbo (Pb) acelerados a velocidades relativísticas tem sido feitas com grande sucesso no Large Hadron Collider (2013) em Genebra, Suíça. Em particular, o experimento A Large Ion Collider Experiment (2013) é um detector de íons pesados no anel do LHC projetado para estudar a Física da matéria interagindo fortemente em densidades de energia extremas, onde uma fase da matéria chamada de Quark Gluon Plasma (QGP) é formada. Esse experimento de colisões Pb centrais e periféricas já está sendo realizado em 2013 no LHC. Neste trabalho estudaremos o comportamento da funções Espessura e Sobreposição Nuclear nas colisões Pb-Pb. Um completo conhecimento dessas funções nos permitirá compreender melhor a centralidade de colisões de íons pesados, e analisar influência desta no processo de produção do QGP.

Física da Matéria Condensada**Fluctuation-dissipation relation for kicked environments**S. A. Abdulack^{1,2}, W. Strunz², M. W. Beims^{1,3}¹Universidade Federal do Paraná, Curitiba, Brazil²Technische Universität Dresden, Dresden, Germany³Max Planck Institut for the Physics of Complex Systems, Dresden, Germany

It is well known that the generalized Langevin equation (GLE) can be explicitly derived from a Hamiltonian system-bath model. Such models consist of central system subject to a force derived from some potential, surrounded by N uncoupled harmonic oscillators which only interacts with the central system. Among many applications of this model, it allows a microscopic understanding of the origins of dissipation and fluctuations. The classical fluctuation-dissipation relation (FDR) which relates the memory kernel with dissipation, involving only the temperature of the bath, is satisfied. In the present work we propose a classical generalized Langevin like map to study the FDR originating from a kicked environment. We are able to derive explicit expressions for the discrete fluctuating force of the map and its correlation function. Remarkably, additional terms appear due to the kicked properties of the environment.

Metodologias para aquisição de Imagens da Matéria Orgânica do solo por AFM

R. Ales, S. da C. Saab, N. M. P. Dias
UEPG, Ponta Grossa, Brasil

O solo pode ser caracterizado em três fases: gasosa, líquida e sólida. A gasosa corresponde os gases presente na atmosfera, a líquida são as soluções presentes no solo e a sólida a fase mineral e orgânica. Esta última é constituída por matéria orgânica (MO) leve e humificada, a leve são as estruturas conhecidas e pouco estáveis e a humificada são estruturas mais complexas e estáveis. A MO humificada é constituída geralmente por ácido húmico (AH), ácido fulvico (AF) e humina (HU). Na área da Ciência do Solo um dos temas mais controverso é a procura de uma estrutura ou de modelos estruturais para as SH. Umas das técnicas para elucidar e caracterizar os modelos estruturais é a microscopia de força atômica (AFM). Este trabalho tem como objetivo propor procedimentos metodológicos confiáveis para obter imagens de AH de solo por AFM. O solo utilizado foi Latossolo Vermelho do IAPAR-PG, coletado na profundidade de 0-10 cm, onde foi realizado o fracionamento por solubilidade da matéria orgânica para obtenção do AH. Foram preparadas 3mg de AH em 80 ml de água mili-Q. Foram realizados dois procedimentos na preparação das amostras de AH, uma usando agitação mecânica para solubilizar o AH e outra utilizando ultrassom. Foi ajustado o pH da solução em 9. Após foi inserida a mica (como substrato) nas soluções de AH. O primeiro procedimento ficou em repouso 48 h (mica + solução) e o segundo por 2h. Foi utilizado o AFM, SPM-9600, para obter imagens, no modo não-contato. As amostras foram varridas com dimensão de 5x5 μ m e 1x1 μ m. As imagens foram analisadas e tratadas no SPM-9600 e Gwyddion 2.28. Os dois procedimentos, para o preparo das amostras são válidos para obtenção de imagens de AH através da AFM, no entanto com a utilização do ultrassom as amostras são realizadas em período menor.

Estudo das propriedades espectroscópicas de tecidos dentários sob diferentes condições de estocagem

D. D. Almagro, F. Sato, R. C. Pascotto
UEM, Maringá, Brazil

Foi realizado, no presente projeto, um estudo das características de tecidos dentários na região do infravermelho médio via espectroscopia Raman em diferentes soluções de estocagem. Fragmentos dentários compostos por esmalte e dentina foram condicionados em soluções de água, álcool à 100 %, paraformaldeído à 4%, glutaraldeído e água com antifúngico timol, os quais foram analisados 1, 3, 7, 14, 21 e 30 dias após a imersão nos meios. Foram utilizados 5 dentes hígidos fornecidos pelo Banco de Dentes da UEM, os quais foram fragmentados em 4 partes excluindo a raiz e a coroa. Cada solução continha um fragmento de cada dente resultando em 5 fragmentos dentários por solução. A espectroscopia Raman é uma técnica não invasiva aos tecidos dentários, e permite avaliar se a houve alteração estrutural nos tecidos, que são comumente estocados em meios de armazenamento para posterior emprego em pesquisas. Este trabalho vem em encontro a interesses de pesquisas que estão sendo desenvolvidas em nosso grupo (Grupo de Estudo de Fenômenos Fototérmicos) conjuntamente com o departamento de Odontologia da UEM, já que estes trabalhos utilizam fragmentos dentários que podem permanecer armazenados até a data prevista para utilização.

Caracterização de dispositivos fotovoltaicos orgânicos construídos com o co-polímero contendo unidades de fluoreno e 2,1,3-benzotiadiazol

M. J. Bassi¹, N. A. D. Yamamoto¹, J. R. Cordeiro², J. Gruber², L. S. Roman¹

¹Departamento de Física - Setor de Ciencias Exatas - Universidade Federal do Paraná, Curitiba, PR - Brazil

²Departamento de Química Fundamental - Instituto de química - Universidade de São Paulo, São Paulo, SP - Brazil

Com a possibilidade de baixo custo para produção em massa, eficiência energética competitiva e a capacidade de serem flexíveis, os dispositivos fotovoltaicos orgânicos são atualmente tema de interesse ativo. Para tanto é necessário estudar a função de cada material utilizado, em especial a camada ativa. Esse trabalho tem por finalidade estudar o co-polímero contendo unidades de fluoreno e 2,1,3-benzotiadiazol, fazendo estruturas monocamadas, para obter a mobilidade de portadores de carga, e em bicamada para a medida de eficiência quântica das celulas solares. Todos os dispositivos foram construidos com vidro, FTO (óxido de estanho dopado com fluor, do ingles tin oxide doped with fluorine), PEDOT:PSS (poli(3,4-etileno dioxitofeno)-poli(4-estireno

sulfonado)) como primeiro eletrodo. A estrutura de monocamada é constituída por uma camada de polímeros depositado por metodo de centrifugação e em seguida evaporado MoO₃ (Óxido de Molibdênio) como bloqueador de buracos. Já para a arquitetura de bicamada, a camada ativa é depositada pelo metodo de centrifugação e seguida por fulereno depositado por evaporação como aceitador de elétrons. Para estas estruturas é depositada uma camada de alumínio por evaporação como segundo eletrodo. A caracterização elétrica é feita através de medidas de densidade de corrente versus tensão aplicada sob iluminação e no escuro e de medidas da eficiência de conversão de energia luminosa em elétrica (IPCE - Incident Photon Converted in Electron Efficiency) por comprimento de onda. A eficiência quântica de conversão de potência é obtida usando um simulador solar de xenônio com filtro AM1.5 e intensidade de 100mW/cm².

Relação entre o campo elétrico ótico na interface polímero/fulereno e a eficiência de dispositivos fotovoltaicos de bicamada

L. Benatto, M. Koehler
UFPR, Curitiba, Brasil

Devido à necessidade cada vez maior de produção de energia elétrica, assim como a urgência de diminuir a utilização de fontes poluentes que liberam dióxido de carbono na atmosfera, fontes de energia renováveis estão sendo amplamente estudadas. As células solares que convertem energia solar em elétrica apresentam um grande potencial para suprir as necessidades de energia limpa em nosso planeta. Atualmente, para fabricação de células solares comerciais, são utilizados materiais inorgânicos como o silício, que pode apresentar uma boa taxa de conversão de energia chegando até 30%. Entretanto, o processo de extração do silício e de fabricação das células solares é complexo, o que torna o seu preço elevado. Materiais de origem orgânica, principalmente polímeros conjugados semicondutores, podem apresentar características eletrônicas parecidas com a do silício, proporcionando um barateamento considerável de uma célula fotovoltaica. Embora progressos significativos tenham sido feitos, a eficiência de conversão de potência da energia solar em elétrica obtida com materiais orgânicos dificilmente ultrapassa 7%. Baseado na teoria de que a configuração do campo elétrico ótico dentro de um dispositivo fotovoltaico multicamadas influí na geração e dissociação do par elétron-buraco (exciton), entre as camadas de polímero/fulereno, mapeamos a distribuição do quadrado do campo elétrico normalizado e, a partir daí, encontramos a eficiência de conversão de fóton incidente em corrente elétrica IPCE. Alterando as espessuras das camadas dos filmes finos do dispositivo, conseguimos obter um aumento considerável no IPCE.

Assinatura óptica da modulação de composição no desenvolvimento de amostras contendo pontos quânticos autoformados.

B. H. B. Santos¹, E. Ribeiro¹, K. D. Machado¹, J. R. R. Bortoleto², M. A. Cotta³

¹Universidade Federal do Paraná, Curitiba, Brazil

²Universidade Estadual Paulista, Sorocaba, Brazil

³Instituto de Física Gleb Wataghin; Universidade Estadual de Campinas, Campinas, Brazil

O estudo de Fotoluminescência (PL) na liga semicondutora InGaP mostrou dois picos de emissões distintos. Medidas em função da potência de excitação permitiu identificar um dos efeitos de desvio na aleatoriedade dessa liga: o ordenamento atômico [1]. Já o estudo em função da temperatura apresentou um comportamento não esperado para a energia de gap, que associamos ao outro efeito de desvio na aleatoriedade dessa liga: modulação de composição. A verificação óptica desses efeitos além de ser não destrutiva, não invasiva e de rápida realização, corrobora com outras técnicas de microscopia eletrônica (TED e TEM). Em especial, nosso levantamento sobre a modulação de composição foi comparado com modelos teóricos que descrevem cada qual de sua maneira, o comportamento do gap de energia em função da temperatura [2], resultando em correlações entre parâmetros de ajustes e uma assinatura óptica para este efeito. As amostras utilizadas são proveniente do crescimento epitaxial por feixe químico (CBE-Unicamp) onde a camada InGaP pode ser forçada, através de parâmetros de crescimento específicos, a exibir os já citados desvios na aleatoriedade na liga. Estudamos dois conjuntos de amostras: o primeiro nos foi cedido (Profa. Dra. Mônica A. Cotta) contendo diferentes graus de modulação de composição [3]; já o segundo foi realizado o crescimento propriamente dito a fim de construir amostras com vistas num possível empilhamento de pontos quânticos que aproveitem a modulação de composição para melhor se organizarem espacialmente [4].

[1] A. Zunger and S. Mahajan, Elsevier Science B. V., Chap. 19 (1994)

[2] R. Pässler, Phys. Status. Solidi. B 200, 155 (1997)

- [3] J. R. R. Bortoleto, Crescimento e caracterização estrutural de nanoestruturas semicondutoras baseadas na liga InP, Tese de Doutorado, Unicamp (2005)
[4] J. R. R. Bortoleto, J. G. Zelcovit, H. R. Gutiérrez, J. Bettini, and M. A. Cotta, Nanotechnology 19 (2008)
-

Comportamento magnético do supercondutor YBaCuO texturizado

T. Azevedo Braga, F. Teixeira Dias, D. Lagie da Silva, V. das Neves Vieira
UFPel, Pelotas, Brasil

Muitos processos e técnicas têm sido empregados para fabricação de materiais supercondutores de alta temperatura crítica, mas a texturização se destaca por ser eficaz no preparo de amostras para aplicações tecnológicas. O objetivo deste trabalho que é a investigação da temperatura de irreversibilidade magnética no supercondutor YBaCuO texturizado. A metodologia aplicada foi a análise das medidas de momento magnético ZFC e FC para a determinação da linha de irreversibilidade magnética, com o campo magnético aplicado paralelamente ao plano ab e ao longo do eixo c. O ajuste destas curvas foi realizado segundo modelos teóricos conhecidos na literatura. A análise e o consequente levantamento da linha de irreversibilidade magnética foram feitos com o auxílio do software QtiPlot, ambientado na plataforma Linux. Após a análise foi constatada uma forte anisotropia no comportamento magnético, fruto da texturização do material, que confere uma boa orientação cristalográfica. Este comportamento foi verificado pela variação de temperatura de 13,03 K em um campo de 5 T. O modelo que melhor se adequou aos resultados foi o Flux Creep Gigante. Com base neste modelo, podemos concluir que a amostra apresenta uma ausência de granularidade, o que é um comportamento típico de amostras texturizadas de boa qualidade. Os elevados valores de temperaturas de irreversibilidade magnética obtidos justificam o emprego de supercondutores texturizados em aplicações práticas como limitadores de corrente, cabos de transmissão de energia elétrica, bobinas supercondutoras, trens de levitação, etc.

Espectroscopia de Espelho Térmico com Excitação Pulsada

O. A. Capeloto, G. V. B. Lukasievicz, L. C. Malacarne, N. G. C. Astrath
UEM, Maringá, Brazil

A Espectroscopia de Espelho Térmico (ET) é uma técnica remota muito sensível para a determinação de propriedades termo-ópticas e mecânicas de materiais sólidos. O método analisa a deformação superficial de uma superfície sólida gerada pela absorção de um feixe laser. O experimento utiliza dois feixes laser; um de alta potência para excitar a amostra, gerando o efeito de ET, e um segundo laser de baixa potência para provar o efeito. A energia absorvida pela amostra durante a excitação é parcialmente ou totalmente convertida em calor induzindo expansão ou contração da superfície do material. O feixe de prova refletido na superfície do material sente essa deformação, que diverge ou converge o feixe com o tempo. A variação da intensidade do centro do feixe de prova no detector está ligada às propriedades térmicas, ópticas e mecânicas do material. Trabalhos mostram que a técnica é precisa para a realização de medidas em materiais desde transparentes até opacos. Neste trabalho foi desenvolvido a teoria necessária para a descrição do efeito quando um laser pulsado com pulsos na escala de nanosegundos gera o efeito em amostras com alto coeficiente de absorção óptica, ou materiais opacos. Medidas foram realizadas em amostras de diferentes tipos de materiais metálicos que possuem alto coeficiente de difusividade térmica, pois a utilização da excitação pulsada nestes materiais se torna importante devido o tempo de incidência do feixe ser muito curta. Os dados obtidos experimentalmente mostram resultados satisfatórios consistentes com o modelo teórico desenvolvido.

Método da Máxima Entropia aplicado a solução de problemas cristalográficos.

I. B. Catellani, L. F. Cotica, I. A. Santos, V. F. Freitas
UEM, Maringá, Brasil

O estudo das ligações químicas em materiais cristalinos é de grande importância por que estas, em geral, determinam as propriedades de um determinado material. Este estudo pode revelar a natureza qualitativa das ligações, bem como os valores numéricos das densidades eletrônicas presentes. Com o advento de métodos

versáteis como o Método da Máxima Entropia (MEM), o estudo das ligações químicas ganhou impulso devido a exatidão para se determinar a ligação efetiva entre átomos. O estudo preciso das ligações químicas é interessante, contudo as densidades eletrônicas ideais são inatingíveis por causa da impossibilidade das técnicas de difração (como, por exemplo, a difração de raios X) obter dados sem ruídos e com a medida da fase do feixe difratado. Para superar essas deficiências, Collins introduziu um processo iterativo baseado na maximização da entropia, que constrói a densidade eletrônica mesmo utilizando dados incompletos de difração de raios X disponíveis. A análise das densidades eletrônicas de materiais, proporciona uma base firme para a avaliação das propriedades dos materiais para a engenharia de novas combinações, a qual requer firme conhecimento das características intermoleculares. Neste trabalho, os detalhes estruturais foram elucidados a partir da técnica de refinamento estrutural de Rietveld aplicada a difração de raios X. A partir do refinamento estrutural, utilizou-se o MEM para o cálculo das densidades eletrônicas de materiais monoatômicos com alumínio (*Al*), manganês (*Mn*), níquel (*Ni*) e silício (*Si*) e materiais compostos como alumina (Al_2O_3), titanato de bário ($BaTiO_3$), Hematita (Fe_2O_3), cloreto de sódio ($NaCl$), sílica (SiO_2) e dióxido de titânio (TiO_2). O caráter iônico/covalente da ligação e da interação entre os átomos em cada material foi claramente revelado através dos mapas de densidade eletrônica.

Organic Field Effect Transistors (OFETs) with P3HT - poly(3hexylthiophene) and Zinc Oxide (ZnO) nanoparticles

C. De Col, W. S. Machado, I. A. Hummelgen
UFPR, Curitiba, Brazil

Organic field effect transistors (OFETs) have attracted attention due to their several technological applications. FETs also have been used as tools to study the charge transport in solid materials, since we can determine the mobility of charge carriers in these devices [1]. Using P3HT:ZnO P3HT:poly(3-hexylthiophene) composite as channel semiconductor improves the field effect mobility of the transistors when compared to those prepared with pure P3HT [2]. The devices were prepared using a glass substrate. Aluminum (*Al*) was deposited as the bottom gate electrode. As insulator, we used cross-linked polyvinyl alcohol (PVA)[3]. The PVA was deposited with the cross linking agent and the crosslinking was promoted by UV irradiation. P3HT: ZnO nanoparticles composite was deposited as channel material. To prepare the P3HT:ZnO composite, were added ZnO (average particle diameter of 50 nm) to the P3HT solution at the P3HT:ZnO weight ratios between 1:0.10 and 1:0.60. The Au was deposited as the top electrode to complete the fabrication of the device. Organic transistors operating at low voltages are highly desirable. In our devices the source-drain current is modulated by the gate potential enabling low operation voltages (V_D and $V_G \sim 3$ V) and output currents are in the nA range. The leakage current is significantly lower than the output current. The output curve shows saturated and linear characteristics for different gate-source voltage (V_{GS}). The transfer characteristics (IDS versus VGS) were measured in the saturation regime at $V_{DS} = -3$ V. The mobility values for these OFETs are in the range between $0.1\text{ cm}^2/\text{Vs}$ and $0.6\text{ cm}^2/\text{Vs}$, depending on P3HT:ZnO ratio.

- [1] Z. Bao, A. Dodabalapur, A. Lovinger, Appl. Phys. Lett., 69, 4108 (1996)
 - [2] W. S. Machado, Thesis, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, Brazil (2011)
 - [3] W. S. Machado, I. A. Hummelgen, IEEE Trans. Electron Dev. 59 (2012) 1529
-

Crescimento e caracterização de filmes finos da liga MnGa sobre substrato de Si(100) através da técnica de epitaxia por feixe molecular (MBE)

C. Cruz, I. T. Neckel, D. H. Mosca, W. H. Schreiner, J. Varalda
UFPR, Curitiba, Brasil

As ligas de Mn-Ga possuem propriedades interessantes do ponto de vista científico e tecnológico. Apresentam propriedades ferrimagnéticas e comportamento do tipo ligas Heusler, em temperaturas acima da ambiente, para a estequiometria da liga Mn_xGa - com $1 < x < 3$ - a qual possui estrutura tetragonal. Em especial, quando na forma de filmes finos, essa liga pode exibir forte anisotropia uniaxial, apresentando campos coercivos e magnetização remanente altos, inclusive na direção perpendicular ao plano dos filmes dependendo da relação de epitaxia sobre o substrato, tornando esse material interessante para dispositivos spintrônicos e de gravação magnética. Neste trabalho, amostras de filmes finos de MnGa foram crescidas sobre o substrato de Si(100) através da técnica de Epitaxia por Feixe Molecular (MBE). Todas as amostras foram crescidas em temperatura ambiente sobre

a camada de óxido nativa presente no substrato. As condições de crescimento foram as mesmas para todas as amostras, exceto a temperatura de recozimento, a qual variou entre 200 e 400 . A espessura nominal dos filmes é de 60 Å. Medidas de Espectroscopia de Fotoelétrons excitados por Raios X (XPS) indicaram a presença de Manganês e Gálio na superfície das amostras em diferentes proporções. Para o caso de recozimento em 400 foi detectada a presença de oxigênio. Experimentos de difração de raios-X mostraram que o composto Mn_2Ga está presente em todas as amostra com exceção da amostra recozida em 400 . Esta última apresentou picos relacionados aos compostos de MnO e MnSi em consonância com os resultados de XPS. Como resultado geral, os filmes possuem comportamento paramagnético. A amostra que foi recozida a 300 apresenta caráter ferromagnético, com campo coercivo igual a 17,84 kOe, magnetização de saturação igual à 20,24 emu/cm³ e 64 % de magnetização remanente em temperatura ambiente.

Agradecimentos: CNPQ, PPGFIS, Fundação Araucária e CAPES.

Simplified calculation of the DOS and the magnetoresistance in 2DES

C. A. Duarte

DFIS, UFPR, Curitiba, Brasil

When we apply an external magnetic field B to a two-dimensional electron/hole system (2DES/2DHS) a series of Landau levels (LL) of energy $E_N = (N + 1/2)\hbar\omega_c$ emerges (ω_c is the cyclotron frequency and N labels LL indexes). Mathematically, the density of states (DOS) in 2DES/2DHS is an infinite sum of peaks centered on each LL (neglecting spin) and a broadeness Γ_N (in short range scattering regime, all Γ_N are equal). In the self-consistent Born approximation these peaks are semi elliptic [1], which is considered unphysical due to the sharp cutoff the DOS at the edges of the ellipses so, Gaussian shape (or an intermediary shape between semi elliptic and Gaussian) has been used. To calculate the magnetoresistance we need to determine the Fermi level E_F solving an integral equation [1,2]. This demands the integration of each peak which in practice has not a definite integral. We simplify this enormously employing a Lorentzian DOS [2,3], since an infinite sum of Lorentzians is the digamma function $\psi^{(0)}(x)$ [4]. This gives a very compact expression which has definite integral. We can apply similar simplification to the longitudinal conductivity σ_{xx} and we can calculate the longitudinal magnetoresistance R_{xx} . Note that there are not equivalent compact equivalent for expressions involving either elliptic or Gaussian DOS. [1] T. Ando, A. B. Fowler, F. Stern, RMP **54** (1982) 437

[2] C. A. Duarte et al., PRB, **76** (2007) 075346

[3] C. A. Duarte, Comp. Phys Com., **183** (2012) 993

[4] G. Arfken, Mathem. Meth. for Phys., 3rd ed. (Academic Press, 1985); Michael Milgram, arXiv:math/0406338v2 [math.CA]

Fractional quantum Hall effect in second subband of a 2DES

C. A. Duarte¹, L. E. G. Armas², E. C. F. Silva², G. M. Gusev², A. K. Bakarov³, S. R. Wiedmann⁴, J.-C. Portal⁵

¹DFIS, UFPR, Curitiba, Brasil

²USP, S. Paulo, Brasil

³Inst. Semic. Phys., Novosibirsk, Russia

⁴HFML, Nijmegen, Netherlands

⁵GHMFL-CNRS, Grenoble; INSA, Toulouse; IUF, Toulouse - France

In the present work we report on the experimental electron sheet density n_s versus magnetic field B diagram for the magnetoresistance R_{xx} of a two dimensional electron system (2DES) with two occupied subbands. The studied systems were GaAs/AlGaAs triple quantum wells with double subband occupancy. For magnetic fields above 9 T, we found fractional quantum Hall levels centered around the filling factor $\nu = 3/2$ in both the two occupied electric subbands. In the regions of magnetic fields and electron sheet densities where the regime of the ineger quantum Hall effect is present, we clearly see the characteristic crossing of levels which shows series of parallelogramlike structures. This kind of crossing is also present in the regions where the fractional levels belonging to the two different subbands cross. We focuse specially on the fractional levels of the second subband, whose experimental values of the magnetic field B of their minima do not obey a periodicity law in $1/|B - B_c|$ where B_c is the critical field at the filling factor $\nu = 3/2$, and we explain this fact entirely in the framework of the composite fermions theory, by the construction of a simulated R_{xx} phase diagram. We use a simple theoretical model to give a possible explanation for the fact [1].

-
- [1] C. A. Duarte, L. E. G. Armas, E. C. F. Silva, G. M. Gusev, A. K. Bakarov, S. R. Wiedmann, J.-C. Portal, *Europhys. Lett.* textbf{94} (2011) 37010
-

Magnetoresistance in AlAs quantum wells under tilted magnetic field

C. A. Duarte¹, G. M. Gusev², A. K. Bakarov³, J.-C. Portal⁴

¹DFIS, UFPR, Curitiba, Brazil

²USP, S. Paulo, Brazil

³Inst. Semic. Phys., Novosibirsk, Russia

⁴GHMFL-CNRS, Grenoble; INSA, Toulouse; IUF, Toulouse - France

The conduction band in AlAs has two minima which originate from six equivalent valleys in the Brillouin zone close to the X points. Four of them are shifted up by quantum confinement. The remaining are populated when the structure is n-doped. Then, the Landau level (LL) diagram is four fold split, since each LL is spin splitted. It is well known that VS in semiconductors can be caused by other mechanisms, for example, strain. Strong magnetic fields perpendicular to a two dimensional electron gas (2DEG) confined in such materials structures are known to enhance VS, while in-plane fields do not have influence [1], which leads us to believe that this enhancement is associated to a property of the 2DEG, and so is associated with electron-electron interactions, what has been considered controversial [2]. Previously it was found that the energy gap E_{VS} between the two lower energy valley split bands follows a linear dependence with respect to the applied (perpendicular component of) magnetic field, at least in the range of field between 2 T - 4 T, and below this range the linearity is lost, the behavior is in any case monotonic [1]. In the present work we study the magnetoresistance in AlAs quantum wells under the application of tilted magnetic fields. Estimation of the values of E_{VS} and the Zeeman gap are obtained comparing the experimental spectra to the ones obtained by calculation, using adequate fitting parameters. We found that the VS gap has nonlinear dependence in the range of magnetic fields from 0.6 T to 6 T. [1] Y. P. Shkolnikov, E. P. De Poortere, E. Tutuc, and M. Shayegan, *Phys. Rev. Lett.* 89, 226805 (2002)

[2] T. Ando, A. B. Fowler, F. Stern, *Rev. Mod. Phys.* 54 (2) (1982); T. Ando, *Surf. Sci.* 98, 327 (1980)

O Laboratório de Óptica e Optoeletrônica do Depto. de Física-UEL

J. L. Duarte, F. Franchello, L. Wouk, E. Laureto, I. F. L. Dias

UEL, Londrina, Brazil

Serão apresentadas as técnicas de espectroscopia óptica disponíveis nos seguintes laboratórios da UEL: Laboratório de Óptica e Optoeletrônica (LOO) - Depto. de Física-UEL e Laboratório de Espectroscopia da Central Multusuários - UEL, bem como as sua possíveis aplicações. Também serão discutidos alguns trabalhos que estão sendo desenvolvidos nesses 2 laboratórios, tais como: Formação de exciplex em blendas poliméricas PFO-DMP:P3HT, Blendas poliméricas para uso em OLEDs brancos (WOLEDs), Confecção de OLEDs e Estudo de polarização de fotoluminescência de materiais poliméricos, por elipsometria de emissão.

Nanocomposites of carbon nanotube and polyaniline applied as gas sensor device.

M. Eising¹, R. V. Salvatierra¹, A. J. G. Zarbin¹, C. E. Cava², L. S. Roman¹

¹ UFPR, Curitiba, Brasil

² UTFPR, Londrina, Brasil

In this work we study the characteristics gas sensors devices based on multiple wall carbon nanotube/polyaniline (MWCNT/PANI) nanocomposites. The active layer film of MWCNT/PANI was deposited on a chromium/gold (Cr/Au) interdigitated electrode, with electrical terminals to monitoring their electrical properties. The UV light from a LED was used in order to enhance the sensor limit detection, by decreasing desorption energy barrier. Due to the physical and chemical properties of MWCNT and PANI, the combination of these properties make these nanocomposites, materials with improved properties and great potential to be used in gas sensors. At

this work, two types of MWCNT/PANI films doping were studied, primary doping using H₂SO₄ and applied to detect acid vapor, and another secondary doping using camphorsulfonic acid and m-cresol, applied to organic vapor detection. The MWCNT/PANI nanocomposite is synthesized *in situ*, using an innovative self-assembled method, from a biphasic system polymerization, with water and toluene. The film is formed in the water/toluene interface after 24 hours of mechanical agitation, then the glass substrate with the electrical conduction contacts, that is the bottom of the container where it is synthesized nanocomposite, getting the film deposited on these contacts. Our results showed a short response time to adsorption and desorption of the studied gas molecules, and with sensibility [$S = (RR_0)/R_0$] around 6% for air flux intercalated with air+3000 ppm of ammonia (NH₃), to films with primary doping. And sensibility around 6% for air flux intercalated with air+2000 ppm of acetone (CH₃)₂CO, to films with secondary doping. We also expand this study for others types of gases as: O₂, N₂ and water vapor (H₂O).

Crescimento de cristais cintiladores nano e meso estruturados de BaZrO₃ via micro-ondas.

R. U. Fassbender¹, M. L. Moreira², T. Lilge³, S. Tebcherane⁴

¹UFpel, Pelotas, Brazil

²UFSCar, São Carlos, Brazil

³UEPG, Ponta Grossa, Brazil

O Zirconato de Bário (BaZrO₃), é um óxido cerâmico que pertence ao grupo funcional das perovskitas (ABO₃), este quando dopado com Háfnio (Hf) em solução sólida pelo método hidrotérmico assistido por micro-ondas (HAM), potencializa suas propriedades radioluminescentes. O método hidrotérmico assistido por micro-ondas (HAM), baseia-se no acoplamento direto, da radiação eletromagnética com as moléculas de água, ocorrendo na região das micro-ondas de 2,45 GHz. Esse método de síntese, permite obter o Zirconato de Bário à temperatura da ordem de 140°C e tempo de patamar de 160 minutos, muito inferiores aos reportados por outras rotas sintéticas. A escolha do Háfnio (Hf) como um dopante, esta no motivo de sua semelhança química com o Zircônio (Zr). Outro bom motivo pela escolha, é que o Háfnio apresenta características luminescentes intrínseca, o que acaba influenciando as propriedades radioluminescentes do Zirconato de Bário. Em geral, materiais radioluminescentes possuem elevada densidade e uma alta massa atômica, facilitando assim a absorção de radiação ionizante para converte-la em luz visível, essa característica é fortemente dependente da morfologia e principalmente da estrutura eletrônica do BaZrO₃. O Zirconato de Bário na sua forma pura ou dopado com Háfnio, é a única perovskita que possui intensa emissão radioluminescente à temperatura ambiente, propriedade esta, que está relacionada diretamente com o método de síntese empregado. O interesse nesses materiais encontra-se no cerne da tecnologia moderna, podendo assim ter um potencial de aplicações na área da ótica, eletrônica e aeroespacial.

Propagation modes immune to dissipation in one-dimensional spatially periodic array of localized dissipations

S. C. Fernandez, V. S. Shchesnovich

UFABC, São Paulo, Brazil

We demonstrate the existence of propagation modes (i.e. immune to dissipation) in a one-dimensional periodic lattice made of an array of identical spatially localized dissipations, where the dissipation width is much smaller than the period of the array. In particular, we consider propagation governed by the one-dimensional Schrödinger equation in an array of identical Gaussian-shaped dissipations with three parameters, the dissipation strength Γ_0 , local width σ and period d . Using an analytical approach, applicable in the limit $\sigma \rightarrow 0$, when our problem reduces to a generalized (complex-valued) Kronig-Penney model, we find that an infinite number of pure propagation modes appear due to the set of resonances when the respective Bloch index is either at the center $k = 0$ or at the boundary $k = 2\pi/d$ of an analog of the Brillouin zone defined for the dissipative lattice. By using numerical simulations we confirm that the nondecaying modes persist for σ such that $\sigma/d \ll 1$ and have the same Bloch index. The propagating modes persist also if a real-valued periodic potential is added to the spatially periodic dissipation, with the ratio of two periods being given by a rational number. We also consider propagation of soliton-shaped pulses in the nonlinear Schrödinger equation with the spatially periodic dissipative lattice and find that when the pulse width is much larger than the lattice period d a significant

fraction of the pulse emerges propagating throughout the dissipative lattice (though with the shape close to a Gaussian) if the pulse wave number is the same as for a nondecaying Bloch mode.

Development of micro controlled irradiation systems based on Light-Emitting Diodes (LED) arrays for use in Light-mediated Therapies

R. C. Evangelista¹, D. D. A. Carneiro¹, F. C. Janzen¹, A. G. Bezerra-Junior², S. L. Stevan-Junior¹, R. F. T. Gomez¹

¹UTFPR - Campus Ponta Grossa

²UTFPR - Campus Curitiba

Light-mediated Therapies as Photobiomodulation or Photodynamic Therapy using laser light or non-coherent light from LED arrays has become a new concept around the word in clinical medicine. Photobiomodulation characterized by the interaction of light with human tissues has been known to promote pain and inflammatory reduction of wound healing and tissue regeneration. Photodynamic Therapy using light and a chemical compound (photosensitizer) has been known as a useful tool in oncology. In the present study the development of micro controlled irradiation systems based on LED matrix for application in Light-mediated Therapies is reported. Aiming to obtain more efficient devices with satisfactory stability, different LED matrix circuits were developed and are described and discussed in this work (M1, M2 and M3). To verify the stability of these systems, the maximum emission wavelength has been characterized using an optical spectrum analyzer (OSA). The optical power at the maximum emission wavelength (632 nm) was measured using a power meter (Coherent), with a photodiode sensor and a spectral range of 400-1064 nm. The M1 matrix (composed of nine LEDs) presented the biggest optical power (23,58 mW) and the smallest irradiation time (4,77 minutes) for the area and dose considered and was chosen to be connected with the micro controlled system. For greater design flexibility was proposed in this work a micro controlled device with varying times. The algorithm of the micro controlled system was done in assembly language on the Microchip MPLAB software®. Based on these results it has been observed that the micro controlled LED matrix showed satisfactory conditions of use besides their low cost and simplicity for assembling and can be used in the Light-mediated Therapies.

Tribo-mechanical characterization of titanium modified by ion nitrinding for bone implants

G. B. de Souza, B. A. da Silva, G. Steudel, S. H. Gonsalves, C. E. Foerster and C. M. Lepienski

The aim of this work was to investigate the mechanical properties and composition of the titanium surface, modified by ion nitriding. The bioactive layers growth on titanium, to induces the osseointegration, may not be a mechanically stable or have an elastic modulus incompatible with the bone. The modification of the titanium samples by ion nitriding can eventually improve adhesion and mechanical properties of such bioactive coatings. Titanium samples were DC plasma nitrided in low conditions of temperature (673 K and 873K) and time (1 h and 3 h). The samples were studied by grazing-incidence X-ray diffraction, Raman spectroscopy, instrumented indentation and nanoscratch tests. The samples treated at 873 K produced a stratified surface containing d-TiN, e- Ti₂N and N-solid solution and none changes were observed on diffractograms of the 673 K samples. However, the Raman spectroscopy analysis showed the d-TiN compound at ~20 nm depth in all studied conditions. The asperity degree and distribution increased with the treatment temperature, whose effects on hardness and elastic modulus were corrected by the contact stiffness analysis. The hardness and elastic modulus have a most significant change in the samples treated at 873 K (3 times and 27%, respectively). In the cases where the samples were treated at 673 K - 3 h, it was observed the scratch hardness twice as high as the substrate value, even if the ductile deformation mechanism under tangential loading was preserved. We conclude that Ti surfaces can be modified by plasma nitriding to improve the tribo-mechanical requirements for bone implants.

Teoria do Funcional da Densidade aplicada a sistemas quânticos unidimensionais

M. E. Bento, D. Vieira

Universidade do Estado de Santa Catarina - UDESC, Joinville, Brasil

Os esforços direcionados ao desenvolvimento da Teoria do Funcional da Densidade (DFT) têm se concentrado, sobretudo, em dois pilares fundamentais: (1) a busca por funcionais de troca e correlação (XC) mais precisos, com possibilidades de aplicações cada vez mais gerais; (2) a viabilidade de implementação computacional diante de sistemas estendidos, caracterizados pela presença de muitos elétrons interagentes. Nesse contexto, o objetivo principal deste trabalho consiste em utilizar sistemas quânticos unidimensionais, mais simples de serem tratados computacionalmente, como laboratórios para o desenvolvimento de alternativas de implementação numérica de funcionais orbitais (OF's) da densidade. Por definição, OF's são todos aqueles que dependem apenas implicitamente da densidade, via formulação explícita em termos dos orbitais Kohn-Sham. Exemplos típicos são os funcionais XC advindos da correção de auto-interação de Perdew e Zunger (PZSIC), em particular, a correção PZSIC aplicada ao funcional local da densidade 1DLDA, específico para o tratamento de sistemas unidimensionais (1D). Formalmente, via equações de Kohn-Sham, a implementação de OF's deve ser procedida por meio do método do potencial efetivo otimizado (OEP), que, por sua vez, é conhecido por se tornar computacionalmente custoso, inclusive para sistemas com poucos elétrons. Sendo assim, investigamos, de forma sistemática, alternativas de simplificação para o procedimento OEP, além de maneiras de evitá-lo por completo. Em particular, consideramos a implementação da correção PZSIC ao funcional 1DLDA, aplicada a átomos e moléculas unidimensionais, avaliando, em cada caso, os desvios em relação aos dados OEP.

Apoio:



**FUNDAÇÃO
ARAUCÁRIA**

*Apoio ao Desenvolvimento Científico
e Tecnológico do Paraná*



*Conselho Nacional de Desenvolvimento
Científico e Tecnológico*