

# III WORKSHOP do Programa de Pós-Graduação em Física



**15 e 16 de setembro de 2021**

**Local: Online - Microsoft Teams**



## Cronograma

15/09	16/09
08:45 – <i>Abertura</i>	
09:00 – Lucimara Stolz Roman	09:00 – Evaldo Ribeiro
10:00 – Sabrina Borges Lino Araujo	10:00 – Fabiano Yokaichiya
10:30 – Márcio Henrique Franco Bettega	10:30 – Giovani Vasconcelos
11:00 – Herculano Martinho	11:00 – Paulo Barbeitas Miranda
12:00 – <i>Almoço</i>	12:00 – <i>Almoço</i>
14:00 – Dante Homero Mosca Junior	14:00 – Renato Moreira Angelo
14:30 – Marlus Koehler	15:00 – Mônica Cotta
15:00 – Ana Maria de Paula	16:00 – Alice Grimm
16:00 – Apresentações estudantes	17:00 – Apresentações estudantes

### Apresentações estudantes:

15/09	16/09
16:00 – Eduardo Luís Brugnago	17:00 – Aluizio J. Salvador
16:15 – Carolini Costa Felicio	17:15 – Cesar A. Moraes
16:30 – Aron L. O. Santos	17:30 – Thales Augusto Barbosa
16:45 – Andressa Toppel	17:45 – Edvaldo Bandeira da Silva
17:00 – Bruno R. Reichert	18:00 – Paulo Raulino
17:15 – Michele Mugnaine	

## Palestrantes

Profa. Lucimara Stolz Roman - Departamento de Física - UFPR  
“Eletrônica orgânica flexível e suas possibilidades”

Profa. Sabrina Borges Lino Araújo - Departamento de Física – UFPR  
“Utilizando a Física para entender o comportamento, interação e evolução das espécies”

Prof. Márcio Henrique Franco Bettega - Departamento de Física – UFPR  
“Electron scattering by molecules relevant to plasma processing”

Prof. Herculano Martinho - Centro de Ciências Naturais e Humanas – UFABC  
“Biofotônica e nanotecnologia como ferramentas para o novo desafio na medicina: o estabelecimento da medicina de precisão”

Prof. Dante Homero Mosca Junior - Departamento de Física – UFPR  
“Spintrônica e Nanomagnetismo”

Prof. Marlus Koehler - Departamento de Física – UFPR  
“A Dissociação de Éxcitons em Células Solares Orgânicas de Alta Eficiência: Imitando a Natureza?”

Profa. Ana Maria de Paula – Departamento de Física – UFMG  
“Espectroscopia resolvida no tempo e microscopia utilizando pulsos femtossegundos”

Prof. Evaldo Ribeiro - Departamento de Física – UFPR  
“Uma aplicação de técnicas ópticas em ciência forense: obras de arte”

Prof. Fabiano Yokaichiya - Departamento de Física – UFPR  
“Unveiling the Drug Delivery Systems using X-ray and neutron techniques”

Prof. Giovani Vasconcelos - Departamento de Física – UFPR  
“Modelagem Matemática da Covid-19: Contribuições da Física Teórica e Computacional”

Prof. Paulo Barbeitas Miranda – Instituto de Física de São Carlos – USP  
“Usando a óptica não linear para investigar dispositivos eletrônicos orgânicos”

Prof. Renato Moreira Angelo - Departamento de Física – UFPR  
“A (ir)realidade física e as revoluções quânticas”

Profa. Mônica Cotta - Instituto de Física Gleb Wataghin – Unicamp  
“Materiais na nano e microescalas como plataformas para estudo de biofilmes bacterianos de Xylella fastidiosa”

Profa. Alice Grimm - Departamento de Física – UFPR  
“Oscilações Climáticas, Extremos e Desastres Naturais: A Crise Hídrica”

# **Resumos Palestrantes**

## Eletrônica orgânica flexível e suas possibilidades

Lucimara Stolz Roman

<sup>1</sup> Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná.

Nesta palestra serão apresentados resultados dos trabalhos desenvolvidos no grupo de dispositivos nanoestruturados (DiNE), relacionados a eletrônica orgânica. Na primeira parte, será abordado o desenvolvimento de novos materiais e a importância da nanoestrutura nas propriedades elétricas, óticas e morfológicas. Os materiais estudados são os polímeros conjugados em combinação com as formas alótropas do carbono, nanotubos, grafeno e fulerenos. Três metodologias de nanoestruturação de filmes serão apresentadas, i) envolvendo o mesmo solvente, ii) solventes diferentes, com nanoestruturação por sonicação e iii) e síntese interfacial usando solventes imiscíveis. O aprendizado no desenvolvimento dessa nanoestruturação dos filmes passa agora para a nanoestruturação de tintas. O objetivo é obter tintas com as propriedades desejáveis nos filmes, com a impressão controlada desses filmes pela técnica de *slot die*, técnica essa estratégica pois é a usada em grandes impressoras de rolo para rolo. Os filmes obtidos são então estudados em suas propriedades e utilizados em dispositivos fotovoltaicos, sensores de gás e sensores óticos de anticorpo do COVID 19. Na segunda parte, serão apresentados trabalhos de aplicação de células solares orgânicas comerciais em dois projetos: i) estação tubo de Curitiba e ii) prédio de ciências exatas, janelas e telhado. Para finalizar será apresentada nossos esforços em realizar a divulgação científica para a comunidade.

## **Utilizando a Física para entender o comportamento, interação e evolução das espécies.**

Sabrina Borges Lino Araujo

<sup>1</sup> *Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná*

Neste seminário falarei brevemente sobre os assuntos que nosso grupo de pesquisa, “Laboratório de Ecologia e Evolução de Interações – LEEI”, tem desenvolvido nos últimos anos: comportamento animal, redes de interação, invasão biológica e evolução de espécies. Como ferramenta para abordar tais assuntos, utilizamos modelagem matemática e análise de séries temporais. Pretendo reforçar como a colaboração entre físicos e biólogos enriquece a ciência.

## Electron scattering by molecules relevant to plasma processing

Márcio H. F. Bettega

*Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná, Caixa Postal 19044, 81531-980 Curitiba, Paraná*

Electron-molecule collisions play a key role in plasma processing of materials. The scattering cross sections for different types of processes are important information to be used in plasma modeling. In this talk recent results for electron scattering by molecules used in plasma processing will be presented. The scattering cross sections were computed using the Schwinger multichannel method implemented with norm-conserving pseudopotentials. Elastic cross sections for molecules such as  $\text{Si}(\text{CH}_3)_4$ ,  $\text{Ge}(\text{CH}_3)_4$ ,  $\text{Ga}(\text{CH}_3)_3$ ,  $\text{B}_3\text{N}_3\text{H}_6$ , and  $\text{SnCl}_4$  for electron energies up to 30-50 eV will be presented. Electronic excitation of  $\text{C}_4\text{H}_4\text{S}$  by electron impact, considering up to 61 open electronic channels, will also be presented. In particular, the presence of shape resonances, Ramsauer-Townsend minimum and the effect of the multichannel coupling in the elastic and inelastic cross sections will be discussed.

This work is funding by CNPq, CAPES and Finep (CT-Infra). The authors acknowledge computational support from Prof. Carlos de Carvalho at LFTC-DFis-UFPR and LCPAD-UFPR and from CENAPAD-SP.

## **Biofotônica e nanotecnologia como ferramentas para o novo desafio na medicina: o estabelecimento da medicina de precisão**

Herculano Martinho

<sup>1</sup> *Centro de Ciências Naturais e Humanas, Universidade Federal do ABC (UFABC), Av. dos Estados, 5001, Santo André-SP, Brasil*

No estágio atual da medicina, o diagnóstico clínico de um paciente é baseado na análise de testes clínicos, comparação com parâmetros fisiológicos e genéticos, imagens médicas de alta precisão e detecção de metabólitos em biofluidos, como sangue e urina. Apesar do amplo arsenal disponível para mensuração e caracterização da homeostase, há uma grande quantidade de casos relatados de pacientes com sintomas e parâmetros diagnósticos semelhantes, mas submetidos a patologias distintas. Além disso, não é raro que indivíduos diferentes apresentem respostas diferentes ao mesmo tratamento. O estabelecimento de diagnósticos e terapias médicos precisos e personalizados (rotulados como teranósticos), levando em consideração as necessidades pessoais e a resposta potencial, é o grande desafio atual da medicina. Isso também é chamado de medicina de precisão. As estratégias para superar esse desafio incluem o estabelecimento de novos biomarcadores, a caracterização da resposta molecular dinâmica e o desenho de novos métodos terapêuticos. Neste seminário apresentaremos as principais questões a serem abordadas no fascinante mundo da medicina de precisão e discutiremos como as novas ferramentas de espectroscopia vibracional podem ser uma ferramenta fundamental para impulsionar os avanços.



## **Spintrônica e Nanomagnetismo**

Dante H Mosca

*Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná  
Caixa Postal 19044, 81531-980, Curitiba, Paraná, Brasil*

Nas últimas décadas, o nanomagnetismo propiciou o desenvolvimento de diversos dispositivos inovadores para a gravação magnética e processamento de informações com densidade ultra-alta e desempenho ultra-rápido. Concomitantemente, desenvolveu-se também a nanomedicina teranóstica usando nanopartículas magnéticas multifuncionalizadas para carreamento de fármacos e tratamentos por hipertermia magnética. Em grande parte, vários avanços foram proporcionados por propriedades magnéticas inusitadas de materiais que surgem quando ao menos uma de suas dimensões é reduzida a uma escala nanométrica. Cabe também lembrar o desafio da manutenção das propriedades magnéticas de compostos e ligas tradicionais para uso em dispositivos de sensoramento, coleta e transdução de energia miniaturizados. Originalmente, nanomateriais ferromagnéticos foram utilizados para o controle ativo de transferência, propagação e detecção de spin através de nanoestruturas e interfaces em regimes estacionário ou dinâmico, inclusive com estabilização por efeitos de proteção topológica. Atualmente, há uma tendência de migração para o uso de nanomateriais antiferromagnéticos que combinam robustez contra campos magnéticos com a ausência de campos dispersos parasíticos, permitindo tanto a gravação de ultra-alta densidade como respostas não-dissipativas de precessão do vetor de Néel no intervalo de frequências de terahertz em dispositivos de processamento ultra-rápidos. Destaca-se também que emergiram muitos novos nanomateriais magnéticos exibindo momento magnético e ordenamentos magnéticos de longo alcance manipuláveis à temperatura ambiente quando suas dimensões são reduzidas a uma escala tal que as quantidades de átomos em superfície e em volume se tornam comparáveis. Dentre os materiais magnéticos emergentes há, por exemplo, a classe dos compostos lamelares naturais e artificiais constituídos por camadas mono e multiatômicas mantidas unidas por forças do tipo van der Waals. Dentre estes há o grafeno que, também na área de nanomagnetismo, se mantém uma promessa de tecnologia disruptiva. Mas destacam-se ainda uma grande família de óxidos e nitretos de metais meramente diamagnéticos à temperatura ambiente quando em volume, mas que quando reduzidos a escala nanométrica exibem momento magnético e ordenamento magnético de longa distância persistente em temperaturas muito superiores à temperatura ambiente. Estes nanomateriais não convencionais apresentam magnetismo induzido por efeito de proximidade magnética, formação de momento magnético criado por distribuição de carga elétrica com polarização de spin parcialmente localizada ao redor de sítios de defeito como vacâncias, linhas de discordâncias ou ainda ao longo de bordas tipo zigue-zague de flocos e lamelas quasi-bidimensionais. Neste caso, a estrutura das bandas eletrônicas, além de facilitar a interconectividade magnética, confere uma alta robustez térmica. Em meio aos avanços do controle e manipulação das propriedades magnéticas nos nanomateriais tradicionais e emergentes, a spintrônica se desdobrou estabelecendo novas plataformas tecnológicas inovadoras ora denominadas caloritrônica de spin, orbitrônica de spin, “valleytronics”, magnônica, skyrmiônica e a recente twistrônica. Em meio a uma concisa introdução aos princípios físicos norteadores das plataformas tecnológicas supracitadas, serão apresentados alguns resultados recentes obtidos dentro do grupo de Filmes e Nanoestruturas Magnéticas destacando-se a importância da infraestrutura de pesquisa instrumental e as colaborações científicas realizadas.

## **A Dissociação de Éxcitons em Células Solares Orgânicas de Alta Eficiência: Imitando a Natureza?**

L. Benatto,<sup>1</sup> C. A. M. Moraes,<sup>1</sup> G. Candiotto,<sup>2</sup> K. R. A. Sousa,<sup>1</sup> J. P. A. Souza,<sup>1</sup> L. S. Roman<sup>1</sup> e M. Koehler<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná, 81531-980, Curitiba-PR*

<sup>2</sup> *Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 21941-909, Rio de Janeiro-RJ,*

Células solares orgânicas (OSC) dependem da dissociação eficiente de éxcitons em heterojunções formadas por polímeros doadores (D) e moléculas aceitadoras (A). Recentemente a pesquisa nessa área sofreu um grande impulso com a descoberta de aceitadores formados por moléculas que podem substituir o fulereno (até então utilizado como molécula aceitadora padrão). Utilizando esses materiais, a eficiência na conversão de potência das OSC já chegou a mais de 17%, tornando-as uma alternativa para a geração de energia renovável. Apesar dos avanços, muitos processos que envolvem a geração de carga nesses sistemas ainda são obscuros. Nesse seminário discutiremos uma abordagem cinética para modelar experiências de extinção de fotoluminescência em blendas doador / aceitador (D / A) como forma de estudar a dissociação de éxcitons em OSC. A partir desta análise é possível derivar relações fundamentais que controlam a geração de carga em blendas D / A, evidenciando como propriedades foto-físicas intrínsecas das moléculas envolvidas influenciam nesse processo. Com base nessas descobertas, propomos algumas estratégias para maximizar a eficiência da extinção de PL e minimizar as perdas de energia do efeito fotovoltaico. Nossas observações sugerem diretrizes para um design racional de materiais visando a otimização de OSCs. Mais que isso, estão revelando que o funcionamento das novas OSCs está se aproximando de propriedades encontradas em sistemas naturais para a coleta de energia solar.

## **Espectroscopia resolvida no tempo e microscopia utilizando pulsos femtossegundos**

Ana Maria de Paula

*Departamento de Física, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Minas Gerais,  
31270-901 Belo Horizonte-MG.*

Os lasers pulsados, com pulsos em femtossegundos, permitem alta resolução temporal em espectroscopias resolvidas no tempo para estudos da dinâmica de relaxação de energia de elétrons em estados excitados em diversos tipos de materiais. Além disto a alta potência de pico permite observar vários processos não lineares, tais como: espectroscopias de múltiplos fótons, geração de segundo e terceiro harmônicos, e fluorescência por excitação com dois fótons com aplicações tanto em espectroscopias resolvidas no tempo como para imagens microscópicas. Neste seminário apresento espectroscopias com resolução temporal de femtossegundos, do tipo excitação e prova, implementadas em nosso laboratório para medidas de absorção transiente em nanomateriais e biomoléculas. Implementamos também, utilizando o laser de pulsos curtos, várias técnicas de microscopias não lineares. Em microscopia obtivemos imagens por geração de segundo harmônico que permitem obter informações sobre a estrutura cristalina de cristais bidimensionais. Imagens por SHG e fluorescência por excitação de dois fótons são também utilizadas para caracterização de biópsias com aplicações em diagnóstico de câncer.

## **Uma aplicação de técnicas ópticas em ciência forense: obras de arte**

Evaldo Ribeiro

*Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná*

Técnicas ópticas são amplamente utilizadas no estudo de Física dos materiais por serem versáteis e, principalmente, não-destrutíveis em termos de amostras. Justamente esta característica mostra-se importante nas ciências forenses, já que é frequente que as provas coletadas em cenas de crime ou similares são vestígios microscópicos. Para uma caracterização robusta desses microvestígios é importante contar com técnicas não-destrutíveis e dentre estas destacam-se aquelas baseadas em propriedades ópticas. Nesta oportunidade serão mostradas alguns exemplos interessantes do uso do espalhamento Raman em ciência forense, e em seguida o uso desta técnica aliada à fotoluminescência para o estudo dos pigmentos presentes em obras de arte, um projeto em conjunto com o Museu Oscar Niemeyer e com o Setor Técnico-Científico da Polícia Federal.

## **Unveiling the Drug Delivery Systems using X-ray and neutron techniques.**

Fabiano Yokaichiya<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> *Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná (UFPR).*

The use of X-ray and neutron techniques, especially with the advent of large synchrotron light sources, nuclear reactors and "spallation sources" dedicated to scientific research, offer unique possibilities in the complementary use of its radiation for structural analysis in the advances of material engineering and provides information about the microstructure in regions of the material close to the surface and throughout the volume in a non-destructive manner. The objective of this presentation is the study of drug delivery systems such as cyclodextrins, poloxamers, solid lipid nanoparticles (SNL), nanostructured lipid carriers (NLC), self-emulsive drug delivery systems (SNEDDS) and hybrid systems for biological applications (medical and agriculture applications) such as anesthetics, high blood pressure control, colitis and cancer using X-ray and neutrons techniques. The presentation will focus on small-angle X-ray (SAXS) and neutrons (SANS) scattering techniques in order to characterize the drug carrier systems, and show the changes that these systems undergo with the addition of drugs, as a function of temperature (and also pH). The results from all these studies aim to improve the formulation of the drug carrier systems, their efficiency to act in the diseases and to minimize the side effects that most of the drugs can produce in other organs of the body..

## **Modelagem Matemática da Covid-19: Contribuições da Física Teórica e Computacional**

Giovani L. Vasconcelos<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná.*

A pandemia de Covid-19 provou ser uma das mais graves crises de saúde pública da história recente da humanidade. Mais de 205 milhões de casos de infecção pelo novo coronavírus já foram identificados em todo o mundo, resultando até o momento em mais de 4,3 milhões de mortes. A comunidade científica respondeu rapidamente aos desafios apresentados por essa crise sem precedentes, produzindo um grande número de trabalhos acadêmicos em um curto período de tempo. Muitos físicos no Brasil e no mundo, incluindo grupos do DFIS-UFPR, engajaram-se desde cedo nesse esforço coletivo. De uma maneira geral, pode-se dizer que os físicos teóricos contribuíram de maneira relevante para a modelagem de importantes aspectos da dinâmica da epidemia, chamando a atenção, sobretudo, para a complexidade do fenômeno, manifestada, por exemplo, na existência de leis de potência, transições de fase, entre outros conceitos oriundos da física estatística e de sistemas complexos. Nessa palestra, farei inicialmente uma breve revisão de alguns trabalhos de físicos brasileiros que aplicaram esses conceitos à dinâmica da Covid-19. Em seguida, discutirei em mais detalhes as contribuições da Rede de Modelagem da Covid-19 e Intervenções não Farmacológicas (Modinterv), ancorada no DFIS-UFPR e sob nossa coordenação. Uma forte área de atuação da Rede Modinterv tem sido a utilização de modelos de crescimento (modelos logísticos generalizados) para descrever as curvas de óbitos e casos, tanto de países, como de cidades e estados do Brasil. Esses modelos mostraram-se muito adequados para descrever o comportamento complexo das curvas epidêmicas, seja com uma ou com várias ondas epidêmicas. Essa classe de modelos permite ainda implementar critérios matemáticos para classificar o estágio da epidemia em um determinado local, de acordo com o regime de aceleração da respectiva curva epidêmica, indo, dessa forma, além das “métricas” normalmente utilizadas na epidemiologia (como o famoso número de reprodução efetivo  $R_t$ ). Nossa abordagem matemática foi implementada de forma automatizada no aplicativo *Modinterv Covid-19*, de acesso livre pela internet, onde se pode monitorar as curvas de casos e óbitos de todos os países do mundo, bem como das cidades e estados do Brasil e dos EUA, o qual será descrito rapidamente. Mostraremos também o Portal Modinterv Paraná, que agrega e disponibiliza para o público em geral um conjunto bastante completo de dados sobre a pandemia no estado, como as curvas de casos, óbitos e vacinação para todos os municípios paranaenses. Por fim, será mencionada brevemente a repercussão que nossos trabalhos tiveram na imprensa e no público em geral.

## **Usando a óptica não linear para investigar dispositivos eletrônicos orgânicos**

Paulo B. Miranda

*Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos - SP*

O comportamento de moléculas em interfaces é geralmente muito diferente daquele no volume de materiais. Por exemplo, devido a interações intermoleculares assimétricas em interfaces, o arranjo molecular e a reatividade de superfícies são significativamente diferentes do que ocorre no volume. Nesta palestra descreverei os fundamentos de uma técnica experimental para o estudo de moléculas em interfaces baseada na óptica não linear: a espectroscopia SFG (do inglês, Sum-Frequency Generation). Esta técnica permite obter o espectro de vibrações de moléculas em interfaces, eliminando as contribuições do volume dos materiais. A partir dos espectros SFG é possível inferir informações importantes sobre a organização, orientação e interações de moléculas em superfícies. Em seguida ilustrarei algumas aplicações da espectroscopia SFG em nosso laboratório, que é o único a implementar essa técnica na América Latina, ao estudo de interfaces e campos elétricos em dispositivos eletrônicos orgânicos, tais como células solares, LEDs e transistores. Outras aplicações da espectroscopia SFG em físico-química de interfaces também serão mencionadas. Finalmente, descreveremos brevemente uma nova linha de pesquisa em nosso laboratório, que usa a espectroscopia de bombeio e prova para investigar a dinâmica de recombinação de cargas em células solares orgânicas. Esse efeito é normalmente o fator limitante da eficiência dessas células solares, e seu entendimento e quantificação podem levar a avanços que as tornem mais competitivas economicamente em relação às células solares inorgânicas.

## **A (ir)realidade física e as revoluções quânticas**

Renato Moreira Angelo<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, Brasil*

As novas teorias físicas introduzidas no início do século XX produziram uma revisão profunda em nosso entendimento sobre a natureza. De um lado, a teoria da relatividade nos ensinou que espaço e tempo não são conceitos absolutos independentes, nem devem ser vistos como mero constituintes de um palco para a ocorrência dos eventos físicos. De outro, a mecânica quântica colocou em cheque os paradigmas de realismo, determinismo e causalidade local. Embora esteja na base de algumas tecnologias modernas, como as celebradas computação e criptografia quânticas, a mecânica quântica ainda se apresenta como uma estrutura axiomática árida que carece de um enquadramento consensual em termos de conceitos físicos simples. Em que pese tal lacuna conceitual, anos recentes têm testemunhado um crescimento significativo das pesquisas acerca de fenômenos quânticos na interface com a teoria de informação, termodinâmica, biologia, relatividade especial e gravitação. Após fazer uma revisão panorâmica do cenário apontado acima e uma discussão a respeito de alguns aspectos quânticos essenciais, apresentarei as linhas de pesquisa em andamento no grupo de Fundamentos de Mecânica Quântica da UFPR.



## **Materiais na nano e microescalas como plataformas para estudo de biofilmes bacterianos de *Xylella fastidiosa***

Mônica A. Cotta

*Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física “Gleb Wataghin”, Campinas, SP.*

Compreender a sinalização celular bacteriana pode abrir caminhos para o desenvolvimento de ferramentas de diagnóstico inteligentes de próxima geração, bem como fornecer novos alvos para a prevenção de infecções relacionadas ao biofilme. Nos últimos anos, temos investigado extensivamente em nosso grupo o ciclo de vida da bactéria *Xylella fastidiosa*, um fitopatôgeno de grande importância econômica que afeta culturas no mundo todo. A patogenicidade da *X.fastidiosa* está relacionada a biofilmes formados nos vasos do xilema, que geram estresse hídrico com grandes impactos na produtividade agrícola. Neste trabalho, planejamos e discutimos a aplicação de diferentes plataformas usando propriedades de materiais para entender melhor a interação da *X.fastidiosa* com superfícies, bem como os principais mecanismos envolvidos na adesão celular e formação de biofilmes. Em particular, mostraremos como arranjos de nanofios monocristalinos podem ser usados para sondar em tempo real as forças de adesão celular na presença de drogas utilizadas para controlar a infecção, como n-acetil-cisteína, auxiliando na identificação de possíveis mecanismos moleculares que possam melhorar a eficácia desses métodos. Em uma abordagem complementar, usamos micropadrões de Au com geometrias e dimensões bem definidas, preparados com litografia de escrita direta em substratos de SiO<sub>2</sub>, para gerar adesão espacialmente seletiva de células de *X. fastidiosa*. Arranjos de discos de Au fornecem controle sobre a densidade celular e as distâncias entre os agrupamentos de células. Nossos resultados elucidam a formação de células filamentosas induzidas pela densidade bacteriana local; seu crescimento é orientado para colônias de células vizinhas de uma maneira dependente da distância. Esse processo gera uma rede de colônias celulares interconectadas que facilitam a arquitetura do biofilme na macroescala. Esses resultados confirmam indiretamente que a sinalização química baseada em sensoriamento de quórum está envolvida na formação de células filamentosas associadas a aglomerados bacterianos de *X. fastidiosa*. A abordagem baseada em padrões de Au não é apenas promissora para entender fenômenos complexos de sistemas multicelulares, mas também oferece novas direções para a engenharia de sistemas biológicos.

## **Oscilações Climáticas, Extremos e Desastres Naturais: A Crise Hídrica**

Alice M. Grimm<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Universidade Federal do Paraná, Departamento de Física.*

Quase todos os desastres naturais no Brasil tem origem meteorológica, sendo associados com eventos climáticos extremos. Estes são geralmente relacionados com oscilações climáticas globais, que podem alterar significativamente a frequência e intensidade de eventos extremos de precipitação, de forma particular em cada região e em cada estação do ano. Os eventos mais intensos resultam de combinações favoráveis de fases de diversas oscilações, que podem ter períodos predominantes em diferentes escalas de tempo: intrassazonais, interanuais e interdecadais. A maior parte dos seus impactos sobre o Brasil é produzida através de teleconexões, pois as forçantes das perturbações atmosféricas são remotas. Serão dados exemplos de oscilações climáticas e teleconexões.

Para construir resiliência aos extremos climáticos e evitar desastres naturais, é necessário saber como as oscilações climáticas naturais e suas diferentes combinações influenciam a variabilidade climática em dada região e quais eventos extremos podem produzir. Um exemplo do efeito da combinação de oscilações climáticas de várias escalas de tempo é a crise hídrica no Sul do Brasil, especialmente no Paraná, em 2020/2021. Mudanças climáticas antrópicas podem intensificar este efeito.

# **Resumos Estudantes**

## Vetores Covariantes de Lyapunov e predição em sistemas caóticos

Eduardo Luís Brugnago<sup>1</sup>, Marcus Werner Beims<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, PR, Brasil.*

Os vetores covariantes de Lyapunov (VCLs) estão associados às variedades tangentes ao longo das trajetórias desenvolvidas por sistemas dinâmicos no espaço de estados, sendo, especificamente, geradores dos subespaços de Oseledets referentes a cada expoente de Lyapunov. Permitem uma caracterização da dinâmica quanto à hiperbolicidade do sistema e diversos empregos dessas quantidades têm sido propostos na última década. Neste estudo focamos na análise dos ângulos formados entre pares de VCLs ao longo de trajetórias caóticas a fim de estabelecer uma técnica de predição para a duração de regimes no sistema de Lorenz e no modelo geomagnético de Rikitake, ambos configurados com os valores de parâmetros típicos. Mostramos, então, ser possível relacionar o alinhamento obtido entre os pares de VCLs ao longo de um regime passado com a duração de regimes vindouros, assim demonstrando que tais quantidades são variáveis preditoras viáveis. Observa-se que, dentre os três ângulos formados pelos VCLs, o entre a variedade estável e a direção do fluxo (variedade central) apresenta maior relação com a duração dos regimes futuros. Como complemento, aplicamos técnicas de *Machine Learning* para estabelecer a predição, relacionando assim, sem depender de uma função analítica, as variáveis preditoras (ângulos entre VCLs) e as preditas (duração dos regimes).

## **Previsão da duração de três regimes conectados em um modelo de Lorenz generalizado**

E.L. Brugnago<sup>1</sup>, C.C. Felicio<sup>1</sup>, M.W.Beims<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Universidade Federal do Paraná,  
81531-980 Curitiba, PR, Brasil.*

Este trabalho considera o problema de prever mudanças de regime e sua duração em sistemas capazes de suportar três regimes dinâmicos conectados. Isso é feito explorando o alinhamento dos vetores covariantes de Lyapunov (VCLs) conhecidos por precederem a ocorrência de picos e mudanças de regime em alguns sistemas caóticos. Aqui, o alinhamento dos VCLs é combinado com procedimentos de classificação, técnicas de aprendizado de máquina e análise de vizinhos mais próximos, para prever a duração dentro de regimes acoplados (ou asas). O procedimento de classificação possui classes distintas definidas como o número de máximos de  $z$  dentro de uma asa, proporcional ao tempo gasto dentro de cada asa. Notavelmente, acurácias maiores que 0,9 são obtidas para predições de classes nas  $\leq 3$  asas visitadas subsequentemente. Acurácias superiores a 0,5 são obtidas para predições de classes nas  $\leq 6$  asas posteriormente visitadas.

## Exploring Multiples Solutions in Piecewise Tracking Control Method

Aron L. O. dos Santos<sup>1</sup>, Guilherme J. Delben<sup>2</sup>, Marcos G. E. da Luz<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Universidade Federal do Paraná, Curitiba, Paraná, Brasil.*

<sup>2</sup> *Universidade Federal de Santa Catarina, Curitibanos, Santa Catarina, Brasil.*

Control of quantum systems consists, in essence, of the ability to drive the probabilities from a given arbitrary initial state at  $t_i$  to a final target state at instante  $t_F$ . Such manipulation paves the way for several important applications, but illustrating in a few examples, like piecewise control of a two-level system [1], or general N-level system [2], entanglement control of two qubits [3] and quantum information processing of two qutrits [4]. In this study we will present different ways to explore the amplitude and phase solutions of the control field  $E(t)$  that satisfy the same expectation value  $\langle O \rangle(t)$ , and thus, determine the multiple solutions in each time window. First, we choose a 10- and 20-level harmonic oscillator problem and we drive the expectation value of the position  $\langle x \rangle(t)$  from a predetermined function  $S(t)$ , then calculating the number of solutions in each time window in both cases. Next, we implement 22 vibrational levels of the OH radical and control the intermolecular distance  $\langle r \rangle(t)$  of the O - H atoms, as well as selective population control of such levels. We finish our analysis with two unlike cases where we impose low dispersion (for 10-levels) and minimal dispersion (for 3-levels). Through those examples we demonstrate the capability of the piecewise tracking control to exploit the space of multiple available solutions.

[1] J. Kuhn and M. G. E. da Luz. "Piecewise time-independent procedure to control two-level systems", *Phys. Rev. A*, vol. 75, 053410 (2007).

[2] G. J. Delben, and M. G. E. da Luz. "General tracking control of arbitrary n-level quantum systems using piecewise time-independent potentials", *Quantum Inf. Process*, vol. 15, 1955-1978 (2016).

[3] G. J. Delben, and M. W. Beims. "Tracking control of two qubit entanglement using piecewise timeindependent method", *Physica Scripta*, vol. 96, 025102 (2021).

[4] A. L. O. dos Santos, and G. J. Delben. "Tracking quantum control for a two qutrits system under amplitude damping noise", *Physica A: Stat. Mech. and its Appl.*, vol. 574, 126017 (2021).

## **Manufacturing Organic Memories Based On Cyanoacrylate, Epoxy Resin and Nanocomposites Metallic Nanoparticles**

Andressa Toppel<sup>1</sup>, Celso de Araujo Duarte<sup>1,2</sup>, Messai Adenew Mamo<sup>3,4</sup>

<sup>1</sup> *Programa de Pós-Graduação em Física Universidade Federal do Paraná, Curitiba, PR, Brazil.*

<sup>2</sup> *Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, PR, Brazil.*

<sup>3</sup> *Department of Applied Chemistry, University of Johannesburg, Doornfontein, South Africa.*

<sup>4</sup> *DST-NRF Centre of Excellence in Strong Materials (CoE-SM), Johannesburg, South Africa.*

The present work concerns the fabrication and the characterization of organic, rewritable ReRAM (Resistive Random Access Memory) memories with epoxy resin (ER) or cyanoacrylate (CA) matrix, and metallic (Au, Ag, Co e Bi) nanoparticle (MNP) reinforcement. Previous studies with ER and carbon nanostructures (CNS) showed excellent results in the fabrication of WORM (Write Only Read Many) memories [2-5], and here we use MNP instead of CNS, aiming to fabricate ReRAM memories, for that preliminary studies in our research group with Au MNP/ER nanocomposites revealed a characteristic ReRAM behavior. Another contribution of the present work is the study of the replacement of ER by CA that does not require aging and cure processes as the ER, resulting a drastic reduction of the time of fabrication of the memory devices.

## **The role of individual neuron ion conductances in the synchronization processes of neuron networks**

B.R.R. Boaretto<sup>1</sup>, C. Manchein<sup>2</sup>, T.L. Prado<sup>1</sup>, S.R. Lopes<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> *Department of Physics, Universidade Federal do Paraná, 81531-980 Curitiba, PR, Brazil*

<sup>2</sup> *Department of Physics, Universidade do Estado de Santa Catarina, 89219-710 Joinville, SC, Brazil*

The partial phase synchronization (sometimes called cooperation) of neurons is fundamental for the understanding of the complex behavior of the brain. The lack or the excess of synchronization can generate brain disorders like Parkinson's disease and epilepsy. The phase synchronization phenomenon is strongly related to the regular or chaotic dynamics of individual neurons. The individual dynamics themselves are a function of the ion channel conductances, turning the conductances into important players in the process of neuron synchronized health depolarization/repolarization processes. It is well known that many diseases are related to alterations of the ion-channel conductance properties. To normalize their functioning, drugs are used to block or activate specific channels, changing their conductances. We investigate the synchronization process of a Hodgkin-Huxley-type neural network as a function of the values of the individual neuron conductances, showing the dynamics of the neurons must be taken into account in the synchronization process. Particular sets of conductances lead to non-chaotic individual neuron dynamics allowing synchronization states for very weak coupling and resulting in a non-monotonic transition to synchronized states, as the coupling strength among neurons is varied. On the other hand, a monotonic transition to synchronized states is observed for individual chaotic dynamics of the neurons. We conclude the analysis of the individual dynamics of isolated neurons allows the prediction of the synchronization process of the network. We provide alternative ways to achieve the desired network state (phase synchronized or desynchronized) without any changes in the synaptic current of neurons but making just small changes in the neuron ion-channel conductances. The mechanism behind the control is the close relation between ion-channel conductance and the regular or chaotic dynamics of neurons. Finally, we show that by changing at least two conductances simultaneously the control may be much more efficient since the second conductance makes the synchronization possible just by performing a small change in the first. The study presented here may have an impact on new drug development research.



## Transport, symmetry and dissipation in nontwist maps

Michele Mugnaine<sup>1</sup>, José Danilo Szezech Jr.<sup>2</sup>, Ricardo Luiz Viana<sup>1,3</sup>.

<sup>1</sup> *Programa de Pós-Graduação em Física, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, Paraná.*

<sup>2</sup> *Departamento de Matemática e Estatística, Universidade Estadual de Ponta Grossa, Ponta Grossa, Paraná.*

<sup>3</sup> *Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, Paraná*

The nontwist maps are discrete mathematical models used to describe the properties of physical systems which violate the twist condition, such as systems that modelled the magnetic field line behavior in tokamak, celestial mechanics, condensed matter, plasma wave heating and others. The violation of the twist condition has consequences for the behavior of the system and the associated phase space, such as the existence of the shearless curve and twin island chains, and also a nonmonotonic behavior in the profile of the winding number can be observed. The simplest bi-dimensional system that violates the twist condition is the standard nontwist map (SNM), a conservative and symmetrical map whose transport properties and phase space structures are well established. The nontwist standard map is a conservative and perturbed system, which leads to a coexistence of chaotic, periodic and quasiperiodic solutions in the phase space. The symmetry of the map is responsible for an unbiased transport, which means that there is no tendency for the chaotic orbits to move to a specific region in the phase space. In our research, we study two modifications in the nontwist map: (1) the inclusion of dissipation, which modifies the conservative scenario and leads to an existence/coexistence of attractors in phase space, and (2) the inclusion of a new perturbation, which modifies the symmetry properties and affects the phase space and the transport scenario. When the dissipation is considered, we have the dissipative standard nontwist map (DSNM) and we study, by numerical simulations, the nature of the attractors present in the phase space, as also the route to chaos in a torus and the multistability scenario in the system. For the inclusion of the new perturbation, we have the extended standard nontwist map (ESNM) and, as we observe by analytic analysis, the symmetry in the system is broken. From our numerical results, we conclude that a broken symmetry in the ESNM can modify the twin island scenario and a direct transport of the chaotic orbits can emerge..

## Effect of low annealing temperature on the structure and chemical order of Ni<sub>2</sub>MnGa thin films

A.J. Salvador<sup>1</sup>, I.T. Neckel<sup>2</sup>, D.S. Costa<sup>1</sup>, I.L. Graff<sup>1</sup>, D.H. Mosca<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Universidade Federal do Paraná (UFPR).*

<sup>2</sup> *Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM).*

Low temperature annealing effect on the structure, residual stress and local chemical order of Ni<sub>2</sub>MnGa alloys thin films were investigated by atomic force microscopy, x-ray diffraction and x-ray stress analyses as well as extended x-ray absorption fine structure. Thin films were prepared by sputtering on GaAs substrates maintained at room temperature and 300 °C during deposition. The samples prepared at 300 °C were subsequently annealed at 150 °C and 300 °C for one and half hour. X-ray diffraction measurements indicated both a development of crystalline texture in which austenite (110) crystalline planes are preferentially aligned parallel to the film plane as well as compressive residual stress, mainly induced by the accommodation of the film on the substrate surface and by heating-cooling in the growth process. Atomic force microscopy analyses reveal a surface morphology dominated by a topography of hillocks and peaked massifs, whose roughness increases by about twenty times with the increase in the crystalline texture induced by annealing at 300 °C of the samples. Interestingly, extended x-ray absorption fine structure analysis performed at Mn K-edge indicate that residual stress is preserved even after significant increase of the structural and chemical ordering induced by the low temperature annealing.

## Theoretical study of electrical properties of organic photovoltaic devices

C. A. M. de Moraes<sup>1</sup>, M. Koehler<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Graduate Program in Physics of UFPR.

In this work computational simulations were performed of a PSiF-DBT C<sub>60</sub> organic solar cell organized in bilayer. For this purpose, the Kinetic Monte Carlo Method was used to incorporate all the possible events associated with the excitons and the free charges that exist in OPVs. It was found that the interface between Donor/Acceptor materials plays a key role for device efficiency, and therefore was one of the parameters analyzed throughout the study of these devices. In addition to the interfacial area, the mobility of charges is the limiting factor for the generation of high current density. In organic photovoltaic devices, there is the generation of electrons and holes that move through the material and give rise to the current. The mobility of holes is up to three orders of magnitude smaller than that of electrons, and so is the transport property that dominates the device. Therefore, parameter maps were constructed and analyzed to verify the influence that hole mobility has on recombination and dissociation phenomena. Experimental results, supplied by DiNE - UFPR's Group of Nanostructured Devices, were used to adjust the theoretical curves. In addition to the study of solar cells, the dynamics of dissociation of exciton at the interface between donor and acceptor materials were addressed. In possession of a previously developed kinetic theory [1], the electric field and positional and energetic disorders were included. The rates that characterize the possible events on the interface, as well as the quenching, were analyzed according to the electric field and the angle  $\theta$  that guides the normal vector of the interface in relation to the field.

[1] L. Benatto, C. A. M. Moraes, M. de Jesus Bassi, L. Wouk, L. S. Roman, and M. Koehler. **Kinetic Modeling of the Electric Field Dependent Exciton Quenching at the Donor–Acceptor Interface**. *The Journal of Physical Chemistry C* **2021** 125 (8), 4436-4448. DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c11458 .

## Quantum mechanical work

Thales Augusto Barbosa Pinto Silva, Renato Moreira Angelo

*Universidade Federal do Paraná*

Work can be regarded as one of the most fundamental concepts of classical mechanics and thermodynamics. It has received well-grounded definitions within the quantum framework, being successfully applied to many contexts with a highlighted emphasis on the emergent field of quantum thermodynamics. Notwithstanding this remarkable progress, it is still debatable whether some sensible notion of work can be posed for a strictly quantum instance involving a few-particle system prepared in a pure state and abandoned to its closed autonomous dynamics. By treating work as a quantum mechanical observable with a well defined classical limit, here we show that this scenario can be satisfactorily materialized. We prove, by explicit examples, that one can indeed ascribe eigenbases for work operators. This opens the room for frameworks involving quantum superposition and nonlocal steering of work. Moreover, we envisage how our framework can be extended to other two-time quantities such as linear and angular displacements.

## Elastic scattering of low-energy electrons by borazine and triazine

Edvaldo Bandeira da Silva<sup>1</sup>, Luiz Vitorino dos Santos Dalagnol<sup>1</sup>  
and Márcio Henrique Franco Bettega<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> *Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná.*

In this work we present the study of the elastic scattering of low-energy electrons by borazine (B<sub>3</sub>H<sub>6</sub>N<sub>3</sub>) and triazine (C<sub>3</sub>N<sub>3</sub>H<sub>3</sub>). These molecules have technological relevance, while borazine can be used in processing plasmas, triazine is used as an impurity removing agent in the oil and gas industry and in petroleum processing. However, what is most striking are the structural similarities between them. Borazine is known as "inorganic benzene", because it is isoelectronic and isostructural with benzene, and triazine being the middle ground between them. It is well known that electron-molecule collision cross sections are important in the description and understanding of chemical processes that occur. Our goal in the present study is to obtain the shape resonance spectra of borazine and triazine through electron-molecule collisions calculations. For the elastic scattering calculations we employed the Schwinger multichannel method implemented with norm conserving pseudopotentials of Bachelet, Hamann and Schluter. The calculations were carried out in the static-exchange (SE) and static-exchange plus polarization (SEP) approximations. We present integral, differential and momentum transfer cross sections for energies up to 30 eV. Along with the integral cross section, we present its symmetry decomposition according to the C<sub>2v</sub> group, in order to characterize the structures that appear in the integral cross section below 10 eV. Besides the scattering calculations, electronic structure calculations were also performed using GAMESS (The General Atomic and Molecular Electronic Structure System) in order to estimate the position of the resonances using an empirical scaling relation.

## Electronic structure of 3D porous graphene-based structures

Paulo R. E. Raulino<sup>1</sup>, Cristiano F. Woellner<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> *Federal University of Paraná, Physics Department, PR, Brazil.*

Carbon-based Schwartzites are 3D negative curved structures classified by the symmetry of unit cell and grouped within families [1,2]. Members of the Primitive (P) family have hexagonal rings connected by octagon rings where the main topological difference among them relies on the number of hexagonal rings between octagons rings [1,2]. We carried out DFT and DFTB [3] calculations to investigate the electronic properties of three members of the P family carbon-based Schwartzites, named P8-1, P8-3, and P8-7. We showed that as the hexagonal regions increases (smaller in P8-1 and larger in P8-7) the electronic band gap decreases (1.25 eV, 0.32 eV, and 0.20 eV, respectively). We also showed that the density of states become more similar to the graphene structure as the hexagonal rings ratio increases. This is a unique result which shows 3D carbon-based structures with a tunable small electronic band gap. These Schwarzites can be used as a new approach for nanodevices applications.

[1] A. L. Mackay, H. Terrones, *Nature*, v352, 762 (1991).

[2] D. C. Miller, M. Terrones and H. Terrones, *Carbon N. Y.*, v96, 1191 (2016).

[3] P. Koskinen and V. Mäkinen, *Comput. Mater. Sci.*, v47, 237 (2009)..