Difusão em Meios Heterogêneos e Processos de Sorção-Dessorção

Ana Paula da Silva Koltun[1*], Ervin Kaminski Lenzi[1]

anapkoltun@gmail.com

[1]*Departamento de Física, Universidade Estadual de Ponta Grossa, Brasil*

Neste trabalho investigamos a difusão de partículas em um meio heterogêneo limitado por uma superfície onde os processos de sorção-dessorção são governados por uma equação cinética:

$$\tau^{\gamma}\frac{d^{\gamma}}{dt^{\gamma}}\Phi(t)=\int_0^t \kappa(t-t')\rho(0,t')dt'-\Phi(t).$$

Consideramos que a dinâmica de as partículas presentes no meio são regidas por uma equação de difusão com dependência espacial no coeficiente de difusão, sendo da forma, $\mathrm{K}(x)=D|x|^{-\eta}$, com −1 < η e $D=const$ respectivamente. Para isso utilizamos a seguinte equação de difusão:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t)=\frac{\partial}{\partial x}[\mathrm{K}(x)\frac{\partial}{\partial x}\rho(x,t)].$$

Este sistema é analisado em uma região semi-infinita, ou seja, o sistema é definido no intervalo [0, ∞) para um condição inicial arbitrária. Contudo, encontramos uma solução geral e analisamos casos particulares para diferentes situações, onde também relacionamos o operador fracionário de Caputo nos nossos cálculos. Primeiro consideramos o efeito da heterogeneidade no processo de adsorção-dessorção. Nesse sentido, mostramos a influência dos diferentes regimes nos efeitos da superfície relacionados ao parâmetro η . A seguir, consideramos $\gamma\neq 1$, que esta relacionado com o processo de difusão que ocorre, isso no contexto do cenário anterior, e uma interação entre dois efeitos diferentes pode estar presente enquanto as partículas se difundem. Um deles está relacionado à heterogeneidade, e o outro processo cinético conectado que determina a interação entre a superfície e o volume. Neste cenário, também consideramos o caso $\kappa(t)=(k/\tau_a)e-t/\tau_a$. O deslocamento quadrático médio, também foi analisado e relacionado com estes resultados onde foram ilustrados e mostraram um comportamento que pode ser relacionado com a difusão anômala. Dessa forma, as soluções são obtidas e apresentam espalhamento anômalo, ou seja, o dinâmica pode ser vista como difusão anômala, portanto, o modelo pode podem ser aplicados diretamente a vários sistemas complexos, que estão envolvidos com a difusão anômala.

Referências:

Koltun, Ana Paula S., et al. "Diffusion in Heterogenous Media and Sorption—Desorption Processes." *Fractal and Fractional* 5.4 (2021): 183.

Estudo teórico da fotoionização de moléculas de ozônio

Danilo F. Schafaschek[1*], Milton M. Fujimoto[1]

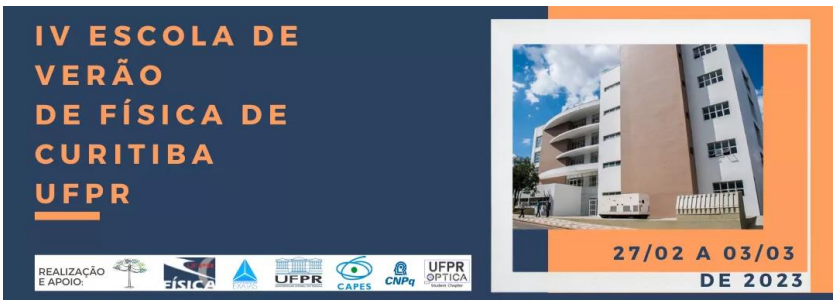
*danilo.fernando@ufpr.br

[1]*Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná, Brasil*

O ozônio é um gás que está presente na estratosfera terrestre formando uma camada, a camada de ozônio, que protege a superfície do nosso planeta absorvendo grande parte da radiação ultravioleta emitida pelo Sol que chega à Terra. Devido sua alta capacidade ionizante a radiação ultravioleta pode causar danos em tecidos biológicos de plantas e animais, incluindo o ser humano. Além disso, a molécula de ozônio é um oxidante poderoso usado para esterilização, por exemplo, de água e equipamentos hospitalares. Tendo isso em vista, justifica-se a necessidade de compreender em detalhes os processos que afetam sua estrutura molecular, entre esses processos está a fotoionização que é a perda de elétrons devido a absorção de radiação eletromagnética. Nessa pesquisa foi analisada a fotoionização de uma molécula isolada de ozônio na faixa do ultravioleta, para isso foi feito uso da teoria quântica. Primeiramente, fizemos uma descrição dos orbitais moleculares do ozônio no nível SCF/Hartree-Fock com o conjunto de bases aug-cc-pVTZ, procedemos realizando uma expansão em ondas parciais para descrever as funções de onda, molecular e do contínuo, os potenciais de interação e a matriz da transição de dipolo com o uso do pacote computacional ePolyScat-E [1], que faz uso do princípio variacional de Schwinger. Então, após testar quais seriam os parâmetros mais adequados para a convergência dos resultados, obtivemos a seção de choque total e o parâmetro de assimetria (relacionado com a seção de choque diferencial) de fotoionização para os oito orbitais de maior energia (mais externos) da molécula de ozônio neutra em seu estado fundamental. Os cálculos foram executados utilizando as aproximações de comprimento e velocidade de dipolo, também foi incluída a polarização da nuvem eletrônica da molécula devido a ejeção de um de seus elétrons durante o processo de fotoionização por meio da inclusão do potencial modelo de Perdew e Zunger [2]. Os resultados mostram que a seção de choque é mais sensível ao tipo de aproximação para o dipolo em comparação com o parâmetro de assimetria, também podemos verificar a existência de picos na seção de choque caracterizando ressonâncias entre o fóton e o íon molecular. Os cálculos foram executados no Centro Nacional de Supercomputação (CESUP) vinculado à UFRGS.

[1] A P P Natalense and R R Lucchese. J Chem Phys, 111, 5344, 1999.

[2] J P Perdew, A Zunger, Phys Rev B, 23, 5048, 1981.



How does a Functional Measure Affect QED?

Gabriel Luis de Souza Weigert[1*]

* gabriel.weigert@ufpr.br

[1] Programa de Pós-graduação em Física, Universidade Federal do Paraná, Brasil

Quantum Electrodynamics (QED) is an abelian gauge theory that provides very accurate predictions regarding light and matter interactions, charged particle interactions by photon exchange, and electromagnetic phenomena in general. In order to obtain quantum corrections, which contain all the information from a quantum field theory, we need to quantize QED. It can be done by the functional approach of quantization, hence using Feynman's path integral. However, path integrals are not mathematically well defined, and thus a rigorous mathematical foundation is needed concerning its functional measure. The motivation for this work arises from the fact that the absence of a functional measure generally leads to gauge-dependent observables. For this reason, the main objective of this study is to perform an analysis of the contribution of the functional measure to the phenomenology of QED.

Keywords: Quantum Electrodynamics. Feynman's Path Integral. Quantum Corrections. Functional Measure.

Análise de Campos Médios de Redes Neurais via Microestados de Recorrência

João Vitor Vieira Flauzino[1*], Sergio Roberto Lopes[1]

*joaofl@fisica.ufpr.br

[1]*Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná, Brasil*

Neste trabalho, tratamos de uma das questões mais fundamentais na análise de redes de osciladores e, em especial, de redes neurais: como distinguir aspectos que possam levar a caracterização de estados futuros da rede a partir de séries temporais finitas. Sob esse objetivo, utilizamos o modelo neural de Hindmarsh–Rose para simular o comportamento de redes, calculando soluções de equações diferenciais acopladas desses modelo. Isso nos permite obter sinais de campo médio como os gerados por neurônios reais e consistem na sobreposição de sinais determinísticos caóticos ou periódicos de cada neurônio, dependendo da topologia e parâmetros da rede. Os sinais de campo médio podem ter propriedades tanto estocásticas quanto determinísticas e, em geral, estão corrompidos por ruído ou pela soma de sinais descorrelacionados, gerando flutuações aleatórias com ou sem correlação temporal. Esses sinais de campo médio de uma rede de osciladores são essenciais para a Física, Neurociência e diversas áreas, uma vez que simulam a natureza dos dados experimentais obtidos desde sistemas estelares a sistemas de partículas ou mesmo sistemas biológicos. Então, com a proposta de superar os desafios de se interpretar esse tipo de sinal e por meio deles obter informações que permitam prever fenômenos futuros, utilizamos uma abordagem baseada na análise de microestados de recorrência, calculando entropias de forma a quantificar o grau de correlação temporal das séries de cada estado e estabelecendo um parâmetro de assimetria relacionado à probabilidade de ocorrência de grupos de microestados. Assim, demonstramos variações da estocasticidade dos campos médios e associamos essas propriedades da dinâmica global a um efeito de destruição de sinais locais nas redes proporcionado pela corrente sináptica, o que antecede seu efeito de sincronização do caos e denota novas formas de caracterizar um sistema complexo e conhecer seu futuro.

Sobre a aplicabilidade da Entropia Linear

Marcos Gabriel Alpino[1*], Renato Moreira Angelo[1]

*marcos.gabriel@ufpr.br

[1]*Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná, Brasil*

Em seu trabalho seminal sobre Teoria de Informação, Shannon mostra um tratamento da noção de informação como variável física e como utilizar uma forma de entropia para quantificar a codificação de tal quantidade numa distribuição de probabilidade. A transposição desta medida para o mundo quântico é feita através da entropia de von Neumann, que é capaz de descrever quantitativamente a informação codificada num estado quântico. Entretanto, a literatura ampara outros tipos de funcionais entrópicos, por exemplo, a entropia linear. Neste contexto, nosso trabalho busca fundamentar uma robustez teórica à entropia linear e estabelecer limites onde a troca entre tais entropias ocorra sem perda informacional e numérica. Para isso, utilizamos o formalismo generalizado de Bloch, que consiste em explorar a invariância dos operadores de estados via transformações dos grupos especiais unitários para descrever tal conjunto como uma hiperesfera real. Além disso, identificando a ação das p-normas de Schatten nos operadores de estados, fomos capazes de representar as entropias em forma geométrica e, partindo disso, verificamos limites onde a entropia linear atua como boa aproximação a de von Neumann. Nossos resultados preliminares apontam que, embora não satisfaça propriedades entrópicas importantes como aditividade, a entropia linear pode ser utilizada como um bom estimador de impureza e informação de estados quânticos.

Transições de fase no modelo de Ising na rede hexagonal frustrada

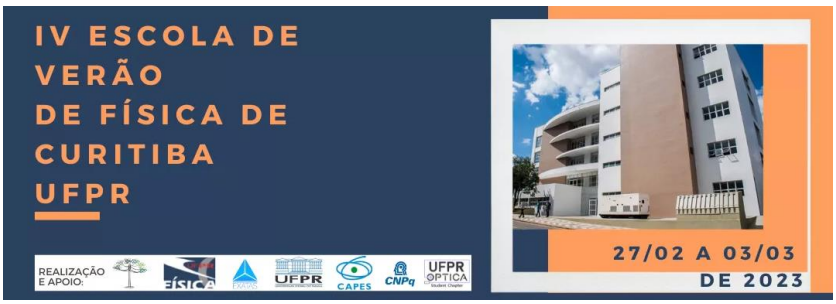
Pietro F. Dias[1*], Mateus Schmidt[1]

pietro.dias@acad.ufsm.br

[1]*Departamento de Física, Universidade Federal de Santa Maria, Brasil*

Estudos recentes, sobre o trisulfeto de ferro e fósforo ($FePS_3$), apontam que este composto pode ser uma realização experimental do modelo de Ising 2D antiferromagnético na rede hexagonal. Os átomos de ferro do $FePS_3$ formam uma estrutura hexagonal e interagem de maneira a formar um ordenamento magnético 'zig-zag'. Lançon et al. [1] propõem que o sistema pode ser descrito ao considerar interações de até terceiros vizinhos em uma rede hexagonal. Motivados pelos resultados experimentais para o composto $FePS_3$, neste trabalho nós estudamos uma rede hexagonal com spins de Ising e interações de troca entre pares de primeiros, segundos e terceiros vizinhos (J_1, J_2 e J_3). Este modelo permite reproduzir a fase zig-zag encontrada no material. Para investigar as transições de fase do modelo, aplicamos a teoria de campo médio com clusters, construindo e analisando diagramas de fases para cluster de 1, 6 e 18 sítios. Como resultado, encontramos transições de fase de primeira e segunda ordem. Nossos resultados mostram que a proposta de Lançon et al. [1] para as interações de troca permite encontrar uma transição de fase de primeira ordem entre as fases zig-zag e paramagnética, em concordância com os resultados experimentais. Além disso, também investigamos o comportamento do calor específico (c_v) para clusters de 6 e 18 sítios. Para J_3 fraco, encontramos dois máximos no calor específico para valores de J_2 próximos da transição entre as fases ordenadas. O máximo do calor específico de baixas temperaturas ocorre devido à transição de fase, enquanto o máximo em mais altas temperaturas é causado pela frustração magnética.

[1] D. Lançon, et al. Physical Review B 94, 214407 (2016).



Solução de Corda Negra na Gravidade Arco-Íris

Roberta Dárlla Reinaldo de Araújo[1*], Francisco de Assis Brito[2], Job Saraiva Furtado Neto[3]

*robertadarlla2@gmail.com

[1]*Departamento de Física, Universidade Federal de Campina Grande, Brasil*

[2]*Departamento de Física, Universidade Federal de Campina Grande, Brasil*

[3]*Centro de Ciência e Tecnologia, Universidade Federal do Cariri, Brasil*

Introdução: As abordagens que recebem o nome de gravidade arco-íris sugerem que a relação usual de dispersão momento-energia é deformada próxima à escala de Planck e que o espaço-tempo também é modificado. Isso acontece devido à representação não linear das transformações de Lorentz, assim, a geometria do espaço-tempo muda de acordo com a energia da partícula nele, isto é, partículas com energias diferentes distorcem o espaço tempo de maneira diferente em um tipo de reação inversa do espaço-tempo levando à modificação mencionada da relação de dispersão relativística. A influência da gravidade arco-íris nas propriedades de um buraco negro foi estudada em vários cenários, incluindo sua termodinâmica e também no estudo de cordas cósmicas. **Objetivos:** Obter analiticamente a solução para uma corda negra de quatro dimensões em termos das chamadas "funções arco-íris" $f(E/E_P)$ e $g(E/E_P)$ e estudar os efeitos dessas funções em sua termodinâmica, calculando a temperatura de Hawking, a Entropia, o Calor Específico e a Energia Livre. **Resultados:** A solução de corda negra na gravidade arco-íris exibe dependência apenas da função $g(E/E_P)$ e recai na solução usual de corda negra quando $g(E/E_P) = 1$. Consequentemente, sua termodinâmica depende apenas da função $g(E/E_P)$. Também obtivemos a temperatura de Hawking para a corda negra, a partir da qual pudemos ver que as funções arco-íris desempenham o papel de aumentar ou diminuir a temperatura de Hawking para um determinado raio do horizonte, dependendo da escolha de tais funções. Também calculamos a entropia, o calor específico e a energia livre. A entropia e o calor específico exibem uma dependência das funções arco-íris enquanto a energia livre não é modificada. Finalmente, estudamos os efeitos da gravidade arco-íris nas órbitas de partículas massivas e sem massa em torno de uma corda negra e obtivemos que nem as partículas massivas nem as sem massa exibem órbitas estáveis em torno de uma corda negra neste cenário, para qualquer configuração das funções arco-íris.

Precessão de Órbitas em Buracos Negros Girantes

Sidney Natzuka Jr.[1*], Carlos A. D. Zarro[1], Carlos Farina de Souza[1], Daniela Szilard L. C. D'O liveira[1], Laura Stolze L. Portugal[1]

*sidney1395271@gmail.com

[1] *Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Brasil*

A solução de Kerr das equações de campo de Einstein descreve a métrica do espaço-tempo na presença de um buraco negro com momento angular e sem carga elétrica. Neste trabalho discutiremos os efeitos da rotação do corpo central sobre o movimento de partículas teste. Em regime perturbativo, determinamos a precessão da partícula teste causada pela rotação do corpo central.

Para calcularmos as velocidades de precessão da partícula teste utilizaremos um método baseado no chamado vetor de Laplace-Runge-Lenz (LRL). Este método é extremamente conveniente, pois o vetor LRL é uma constante de movimento no problema de Kepler. Em particular, nas métricas de Schwarzschild e Kerr, o efeito gravitacional sobre a órbita terá outras contribuições além da previsão newtoniana. Entretanto, para grandes distâncias, a aproximação newtoniana é adequada. Assim, introduzindo o vetor LRL em problemas nos quais a interação entre os corpos é uma perturbação à interação newtoniana, é possível encontrar a velocidade de precessão da órbita de forma relativamente simples, sem determinar explicitamente a função movimento da partícula teste.

Referências:

[1] - Uzêda, Diego Dias. Tópicos em Mecânica Clássica. Diss. Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2011.
[2] - Bardeen, James M. "Timelike and null geodesics in the Kerr metric." Black holes 215 (1973).
[3] - Jiang, C., and W. Lin. "Post-Newtonian dynamics and orbital precession in Kerr-Newman field." The European Physical Journal Plus 129 (2014): 1-4.

Estudo analítico da equação de Schrödinger para potenciais unidimensionais utilizando o método de Nikiforov-Uvarov

Viviane B. Leite[1*], Álvaro Santos Alves[1], Franz A. Farias[1]

*vivianneleite2@gmail.com

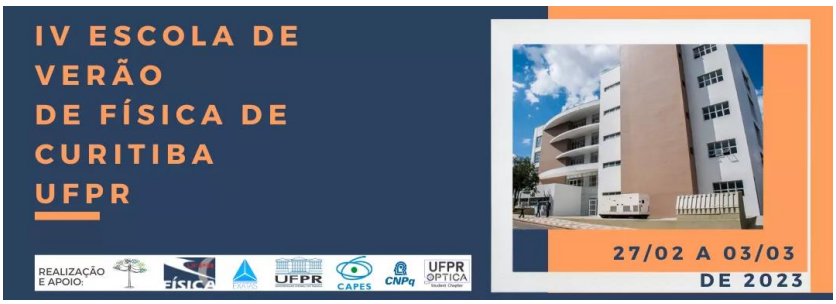
[1]*Departamento de Física, Universidade Estadual de Feira de Santana, Brasil*

Recentemente, tem havido um interesse renovado na utilização do método de Nikiforov-Uvarov (NU) na resolução de sistemas mecânicos quânticos [1]. Esta técnica algébrica é baseada na resolução de equações diferenciais de segunda ordem do tipo hipergeométrico por meio das funções ortogonais especiais. Para um determinado potencial central V(r), a equação de Schrödinger independente do tempo em coordenadas esféricas – ou, de forma geral, a equação de Helmholtz homogênea – é reduzida a uma equação generalizada do tipo hipergeométrico com uma transformação de coordenadas apropriada, então, ela pode ser resolvida sistematicamente. Destarte, o objetivo deste projeto é utilizar o método de NU para obter o espectro de energia e a função de onda correspondente a uma partícula sujeita aos potenciais unidimensionais: harmônico, de Morse, de Kratzer, de Coulomb e de Hulthen. Assim, este trabalho está fundamentado na Teoria Quântica e seu desenvolvimento se dá a partir duma metodologia baseada no método de NU. Os resultados obtidos são interpretados e comparados com aqueles encontrados na literatura. Muitas vezes acontece em alguns sistemas quânticos que a solução da equação de Schrödinger com um potencial V(r) não é conhecida com precisão (por exemplo, ao considerar o movimento de uma partícula sujeita ao potencial de Morse juntamente com o termo centrífugo l(l + 1)/r vindo da parte radial da equação de Schrödinger em coordenadas esféricas), nesses casos delineamos um procedimento dado por Pekeris [2]. Tendo em conta o algoritmo padrão do formalismo de NU, constatamos que esse método se destaca por sua versatilidade e capacidade de encontrar a solução da equação de Schrödinger de forma mais direta e elegante quando comparado aos demais.

Referências

[1] NIKIFOROV, A.V. & UVAROV, V.B. (1988). *Special Functions of Mathematical Physics*, Birkhauser, Bassel.

[2] Pekeris, C.L. (1934). The Rotation-Vibration Coupling in Diatomic Molecules. Phys. Rev., 45, 98-103.



Planetário do Observatório Astronômico Antares: Astronomia na Escola

Wesley L. dos Santos[1], Marildo G. Pereira[1], Lucas C. Lima[1], Wanderson M. B. Santos[1],

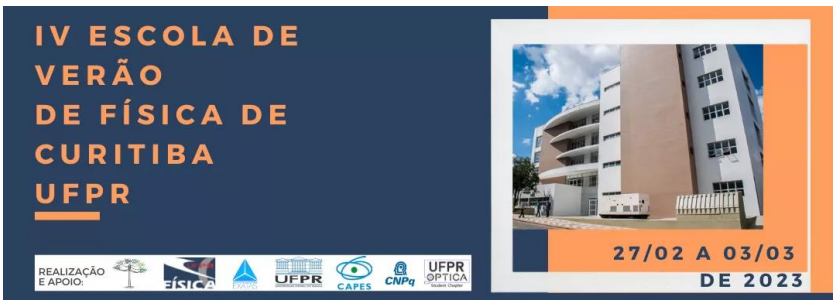
*Wesleylsantos05@gmail.com

[1] *Departamento de Física, Universidade Estadual de Feira de Santana*

Este trabalho faz parte do projeto de Extensão de Incentivo à Vocação Científica nas Escolas, ligado ao Observatório Astronômico Antares e o Departamento de Física da UEFS. O projeto, iniciado em 2007 se destina à divulgação e popularização da ciência nas escolas da rede de ensino do estado da Bahia[1] . O projeto leva experimentos de diversas áreas da Física (mecânica, hidrodinâmica, eletromagnetismo, óptica e, principalmente, astronomia) para que os alunos possam interagir com estes e com a equipe apresentadora, suscitando questionamentos sobre os fenômenos envolvidos com cada experimento. Neste trabalho, apresentamos um recorte das ações realizadas no ano de 2022, onde foram realizadas 23, tanto remotas quanto presenciais. Além das escolas de Feira de Santana, também foram envolvidos os municípios de Madre de Deus, Anguera, Lençóis e Itaberaba, priorizando escolas da rede pública, atingindo um público mínimo de ~1.200 pessoas. Algumas das ações foram divulgadas nas nossas redes sociais no YouTube (canal de Experimentos de Física nas Escolas), no Facebook na página Planetário Itinerante e no Instragam do Observatório Astronômico Antares. Ao longo destas apresentações temos buscado adequar a nossa linguagem aos diversos públicos envolvidos, tendo que se destacar tanto o público infantil quanto estudantes do EJA. Entretanto, os estudantes do Ensino Fundamental I e II tem interagido de forma mais intensa com os experimentos, principalmente, com aqueles em que podem visualizar e sentir o fenômeno físico, como o gerador de *Van de Graaff*, o ebulidor de *Franklin* e o telescópio. As apresentações são realizadas de forma que os alunos podem manipular os experimentos em um ambiente controlado, podendo assim interagir com o fenômeno e isso acaba os cativando ainda mais, tanto que os experimentos que eles mais manipulam, são aqueles que eles mais querem repetir.

Referências

[1] Torres, T.C.S, et al; Projeto itinerante de popularização de ciências e astronomia; XI Congreso Iberoamericano de Extensión Universitaria : integración, extensión, docencia e investigación para la inclusión y cohesión social / Gustavo C.M. Menéndez ... [et.al.]; compilado por Gustavo C.M. Menéndez; Cecilia Iucci ; Mariela Urbani. - 1a ed. - Santa Fe: Universidad Nacional del Litoral, 2011.



Incorporation of Gallium Into Bioactive Glasses: New Structure/Function Relations Uncovered by Solid State NMR Techniques

Yara Hellen Firmo Gomes[1*], Hellmut Eckert[1]

*yaragomes@usp.br

[1]*Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo (IFSC-USP)*

Since the pioneering publication reporting the ability of certain glasses in the SiO_2-CaO-Na_2O-P_2O_5 composition diagram to join bone material without forming fibrous tissue around them or promoting inflation or toxicity (1), research and development of bioactive glasses and glass-ceramics have promoted better quality of life. In bioglasses, gallium stands out for its antibacterial potential, due to the similarity between its Ga^{3+} ions and Fe^{3+} ions (2); so far, however, there is little knowledge about the relation between the details of its structural incorporation and bioactive properties. The present work aimed to study gallium-doped bioactive glasses, melt-quenching and sol-gel process derived, using NMR techniques and additional characterizations. For the melt-derived glasses, 7 samples of Biosilicate® doped with Gallium were produced, with composition [(49,16-x)SiO_2–(23,33)Na_2O–(25,79)CaO–(1,72)P_2O_5–(x)Ga_2O_3], where x= {0,1,2,4,6,8,10} mol%. DSC results show an increase in the glass transition temperature regarding Ga content, indicating there's an increase in network connectivity with the presence of gallium. The NMR spectra indicate that gallium is 4-coordinated and that there is formation of Ga-O-Si linkages with the increase of gallium content in the sample, as well as a proximity/interaction effect of P and Ga atoms. For the sol-gel derived glasses, samples of composition [(80-x)SiO_2–(15)CaO–(5)P_2O_5–(x)Ga_2O_3] and x={0,2,4,6,8,10} mol% were prepared. The NMR results indicate that, as in the previous set of samples, there may be a formation of Ga-O-Si linkages, since there is a decrease in high-coordinated ^{29}Si and a proportional increase in the lower coordinations. Something curious observed in the ^{29}Si spectra is that there is a stabilization of the components between the 6%, 8% and 10% samples — the spectra are very similar. This may indicate that 6% is an upper bound for gallium incorporated in the sample. In this case, a change in gallium environment should be expected, which will be explored further through ^{71}Ga measurements. This is the focus of the present phase of the research, as well as BET characterization of the other samples. In the future, it is intended to focus on the insertion of sodium in samples derived from sol-gel, on new characterizations and on bioactivity studies (dissolution kinetics in SBF), in order to compare the properties of the different sets of samples.

References: (1) Hench, L. L., Polak J. M. Third-generation biomedical materials. Science. 2002, Feb 8; 295(5557):1014-7. doi:10.1126/science.1067404; **(2)** Kurtuldu, F., Mutlu, M., Boccaccini, A. R., Galusek, D. Gallium containing bioactive materials: A review of anticancer, antibacterial, and osteogenic properties, Bioactive Materials, Volume 17, 2022, Pages 125-146, ISSN 2452-199X, doi: 10.1016/i.bioactmat.2021.12.034.