

# **16th UFSCar Physics Week (XVI Semana da Física da UFSCar)**

Monday 26 October 2020 - Friday 30 October 2020

## **Book of Abstracts**



# Contents

Palestra de Abertura: Processos dinâmicos em redes Complexas . . . . .	1
Mesa Redonda 1 - Fontes confiáveis e conhecimento aberto: como surgem as Fake News? . . . . .	1
Minicurso 1 - Introdução aos Métodos de Monte Carlo . . . . .	1
Minicurso 2 - Pequena introdução às estranhezas da física quântica . . . . .	1
Palestra 1 - Panorama da participação das Mulheres nas Ciências Exatas . . . . .	2
Minicurso 3 - Formação de Pesquisadores e Escrita de Artigos Científicos de Alto Impacto . . . . .	2
Minicurso 4 - Prof. Wladimir Seixas . . . . .	3
Palestra 2 - Prof. Celso J. Villas Boas . . . . .	3
Abertura da 16a SeFis . . . . .	3
Minicurso 1 - Prof. Emanuel F. de Lima . . . . .	3
Minicurso 2 - Prof. Raul C. Teixeira . . . . .	3
Palestra 3 - Starlink e os riscos das constelações de satélites para a pesquisa astrofísica . . . . .	4
Minicurso 3 - Prof. Valtencir Zucolotto . . . . .	4
Minicurso 4 - Prof. Wladimir Seixas . . . . .	4
Palestra 4 - Prof. Cristina Kurachi . . . . .	4
Minicurso 5 - Prof. Tereza C. da Rocha Mendes . . . . .	5
Minicurso 6 - Introdução a Python para programação numérica . . . . .	5
Palestra 5 . . . . .	5
Workshop . . . . .	5
Workshop . . . . .	6
Minicurso 5 - Prof.Tereza C. da Rocha Mendes . . . . .	6
Minicurso 6 . . . . .	6
Palestra 6 - Prof. Ana Amelia Bergamini Machado . . . . .	6

Workshop . . . . .	6
Workshop - encerramento . . . . .	7
Simulação Quântica da Equação de Dirac e da Equação de Weyl . . . . .	7
Introdução à Mecânica Pseudo-Hermitiana . . . . .	7
Dinâmica de sistemas quânticos no espaço de fases e termalização a partir do formalismo de Weyl-Wigner. . . . .	8
Tentativas de Mecânica Quântica Relativística e a Necessidade de Campos Quânticos . . .	8
ABUNDÂNCIA QUÍMICA DE OXIGÊNIO EM GALÁXIAS LINERs . . . . .	9
Armazenamento e liberação de H <sub>2</sub> . . . . .	10
Efeito da Adsorção de Moléculas Atmosféricas nas Propriedade de Transporte Eletrônico da Monocamada de MoS <sub>2</sub> . . . . .	10
Propriedades Magnetodielétrica do Filme Fino de PZT/CFO . . . . .	11
Propriedades Eletrônicas e Acoplamento Spin-Órbita de Compostos Tetrapirrólicos . . .	12
O movimento browniano: uma abordagem utilizando o princípio de Jaynes . . . . .	12
Aplicação e revisão dos conceitos da Álgebra Linear no contexto da Teoria da Relatividade	13
Evolução ferroelétrica em função da dimensionalidade do sistema Pb(Zr <sub>0,2</sub> Ti <sub>0,8</sub> )O <sub>3</sub> /CoFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub> crescido via RF-Sputtering. . . . .	14
Correlações estatísticas da luz espalhada por amostras atômicas densas . . . . .	14

1

## **Palestra de Abertura: Processos dinâmicos em redes Complexas**

**Corresponding Author:** francisco@icmc.usp.br

Sistemas complexos são formados por partes discretas que interagem de forma não-linear. Exemplos de Sistemas Complexos incluem a Internet, as interações genéticas, os ecossistemas, o cérebro e nossa sociedade. A modelagem desses sistemas considera as interações entre os seus elementos e processos dinâmicos que regem o comportamento do sistema. Nessa palestra vamos mostrar como podemos modelar processos dinâmicos, tais como propagação de epidemias e sincronização de osciladores acoplados, em redes complexas. Mostraremos como a estrutura da rede influencia na emergência do comportamento coletivo e como esse resultado pode ser usado para controlar sistemas dinâmicos em redes. Também apresentaremos alguns resultados recentes, tais como o método para identificação dos principais propagadores de epidemias e rumores, bem como o fenômeno de sincronização explosiva. Aplicações em medicina, ecologia e epidemiologia também serão apresentadas.

2

## **Mesa Redonda 1 - Fontes confiáveis e conhecimento aberto: como surgem as Fake News?**

MESA REDONDA 1 , com o Prof. Ivã Gurgel (IF-USP) e o Dr. Reinaldo Lopes (Folha de São Paulo)

Mediadora: Dra. Mariana Pezzo do LABI-UFSCar

3

## **Minicurso 1 - Introdução aos Métodos de Monte Carlo**

Métodos de Monte Carlo constituem maneiras eficientes de se calcular integrais de dimensão alta ou de se resolver equações integrais. O nome Monte Carlo vem da característica aleatória dos métodos e do famoso casino localizado em Mônaco. Ao invés de se calcular um integrando em muitos pontos de quadratura, a ideia básica do método é de se calcular o integrando apenas em um fração aleatória, porém representativa, de pontos. Os Métodos de Monte Carlo são muito apropriados para se resolver uma vasta classe de problemas envolvendo um número grande de graus de liberdade, como no caso de muitos átomos em matéria condensada ou átomos com muitos elétrons.

Nesse minicurso, faremos uma introdução básica dos métodos de Monte Carlo cobrindo os seguintes tópicos: (1) A estratégia básica dos métodos Monte Carlo; (2) Geração de variáveis aleatórias com uma distribuição especificada; (3) O algoritmo Metropolis; (4) O modelo de Ising em duas dimensões; (5) Discussão de outras aplicações e variações dos métodos de Monte Carlo.

4

## **Minicurso 2 - Pequena introdução às estranhezas da física quântica**

A mecânica quântica povoa o imaginário de leigos e cientistas com conceitos que desafiam nosso pensar, e testam os limites de nossa linguagem para descrevê-los. Exemplos destes conceitos-quimera são a “dualidade onda-matéria”, uma partícula estando “aqui e ali ao mesmo tempo”, gatos “mortos e vivos”, colapso do estado de uma partícula, partículas emaranhadas. As dificuldades que temos em descrever tais fenômenos é ligada ao fato de que as regras segundo as quais vemos o nosso mundo macroscópico se comportar parecem excluir tais esquisitices - e, no entanto, elas existem. Tentarei discutir nestes dois seminários, em termos os mais simples possíveis, em que sentido exato estas esquisitices são esquisitas, porque elas violam nossa compreensão do universo, como podemos observar estas esquisitices no laboratório, e quais as consequências que elas podem ter para aplicações tecnológicas, como computadores quânticos ou criptografia quântica.

**Aluno de::**

**Referências bibliográficas:**

5

## **Palestra 1 - Panorama da participação das Mulheres nas Ciências Exatas**

**Corresponding Author:**

Ainda que esforços e iniciativas tenham se intensificado, globalmente, para promover a participação mais igualitária das mulheres em Ciências, em particular nas Ciências Exatas, ainda há muito que se avançar para vencer as barreiras que retardam ou impedem o pleno desenvolvimento profissional de cientistas mulheres. Estudos demonstram que, dessa maneira, não só perdemos a oportunidade de inclusão de uma força de trabalho e massa crítica valiosa, mas também que a diversidade de gênero pode trazer enormes benefícios para a produção científica e o desenvolvimento de soluções tecnológicas, ao reunir diferentes visões e perspectivas. Com esse horizonte, fazem-se necessárias a conscientização do cenário atual no Brasil e no mundo, e a compreensão dos gargalos que previnem mudanças efetivas de comportamento humano e em políticas públicas que incentivem e dêem reais condições para a maior participação profissional feminina. Nesta apresentação pretendo abordar essas questões e estimular uma discussão profícua sobre este tema, bem como compartilhar minha experiência pessoal na construção de uma carreira científica e conciliamento com a família.

**Aluno de::**

**Referências bibliográficas:**

6

## **Minicurso 3 - Formação de Pesquisadores e Escrita de Artigos Científicos de Alto Impacto**

O número crescente de pós-graduandos e recém-doutores no país tem feito com que o número de publicações científicas destes futuros pesquisadores seja utilizado como um importante critério em suas avaliações. Contudo, a escrita científica em língua estrangeira representa ainda uma grande barreira ao pleno desenvolvimento científico de alunos de pós-graduação e pós-doutorandos. Neste curso abordaremos tópicos relevantes em escrita científica como: i) Ideias e Projetos de Pesquisa; ii) principais seções de um artigo científico (abstract, introduction, results and discussion, conclusions and references), iii) estilo e linguagem da escrita científica em inglês e iv) O processo Editorial.

7

## **Minicurso 4 - Prof. Wladimir Seixas**

Minicurso 4

Palestrante: Prof. Wladimir Seixas (DM-UFSCar)

8

## **Palestra 2 - Prof. Celso J. Villas Boas**

Palestra 2

Palestrante: Prof. Celso Jorge Villas Boas (DF-UFSCar)

9

## **Abertura da 16a SeFis**

10

## **Minicurso 1 - Prof. Emanuel F. de Lima**

Minicurso 1

Palestrante: Prof. Emanuel Fernandes de Lima (DF-UFSCar)

11

**Minicurso 2 - Prof. Raul C. Teixeira**

Minicurso 2

Palestrante: Prof. Raul Celistrino Teixeira (DF-UFSCar)

12

**Palestra 3 - Starlink e os riscos das constelações de satélites para a pesquisa astrofísica**

O tema da exploração espacial desperta grande curiosidade no público, e é uma grande oportunidade para a divulgação científica. No entanto, parece haver um conflito entre interesses tecnológicos, de comunicação e a pesquisa astrofísica desenvolvida em observatórios ao redor do mundo. Nessa palestra, vou apresentar as preocupações de cientistas com as mega-constelações de satélites como o Starlink, e discutir as possíveis soluções para os novos (e inesperados) conflitos.

13

**Minicurso 3 - Prof. Valtencir Zucolotto**

Minicurso 3

Palestrante: Prof. Valtencir Zucolotto (IFSC-USP)

14

**Minicurso 4 - Prof. Wladimir Seixas**

Minicurso 4

Palestrante: Prof. Wladimir Seixas - DM-UFSCar)

15

**Palestra 4 - Prof. Cristina Kurachi**

Palestra 4

Palestrante: Prof. Cristina Kurachi (IFSC-USP)

16

## Minicurso 5 - Prof. Tereza C. da Rocha Mendes

Minicurso 5

Palestrante: Prof. Tereza Cristina da Rocha Mendes (IFSC-USP)

17

## Minicurso 6 - Introdução a Python para programação numérica

Python é uma linguagem de programação de alto nível, interpretada e que prioriza a legibilidade do código sobre a velocidade. Com sua sintaxe clara e concisa, além de suas bibliotecas para computação científica, tornou-se uma ferramenta computacional ideal para cientistas e pesquisadores de diversas áreas da ciência. Uma de suas principais características é permitir a fácil leitura do código e exigir poucas linhas de código se comparado a outras linguagens. Neste minicurso, apresentaremos os principais recursos dessa linguagem a partir de uma abordagem “hands on”, através de exemplos práticos e exercícios de programação. Além disso, uma breve apresentação dos pacotes numpy, especialmente desenvolvido para facilitar a manipulação de vetores e matrizes, e matplotlib, focado na plotagem e visualização de dados, será realizada como forma de ilustrar o potencial da linguagem como ferramenta para programação numérica.

**Aluno de::**

**Referências bibliográficas:**

18

## Palestra 5

Palestra 5

Palestrante: a confirmar

19

## Workshop

Workshop

**20**

## **Workshop**

Workshop

**21**

## **Minicurso 5 - Prof.Tereza C. da Rocha Mendes**

Minicurso 5

Palestrante: Prof.Tereza Cristina da Rocha Mendes (IFSC-USP)

**22**

## **Minicurso 6**

Minicurso 6

Palestrante: a confirmar

**23**

## **Palestra 6 - Prof. Ana Amelia Bergamini Machado**

Palestrante: Prof. Ana Amelia Bergamini Machado (UNICAMP)

**Aluno de::**

**Referências bibliográficas:**

**24**

## **Workshop**

Workshop

25

## Workshop - encerramento

Workshop (closing)

27

## Simulação Quântica da Equação de Dirac e da Equação de Weyl

**Authors:** Gabriel Pedro Lima Moyses Fernandes<sup>1</sup>; Celso Jorge Villas-Bôas<sup>1</sup>

<sup>1</sup> UFSCar

**Corresponding Author:** gabrielpedro@df.ufscar.br

Neste trabalho foi realizada uma síntese das atuais pesquisas sobre a simulação quântica da equação de Dirac e da equação de Weyl em um sistema de um único íon aprisionado em um potencial harmônico. Partindo da versão semiclássica do modelo de Jaynes-Cummings, o qual considera a interação entre radiação e um íon de dois níveis, foram geradas interações que permitem o acoplamento dos estados internos e estados externos de um íon aprisionado, permitindo o controle da dinâmica do sistema. Manipulando essas interações foi possível gerar interações apropriadas para simular a dinâmica da equação de Dirac e da equação de Weyl no sistema, o que possibilitou o estudo do efeito *zitterbewegung* - um efeito que se origina da superposição das soluções de energias positivas e negativas da equação de Dirac.

**Aluno de::**

Graduação

**Referências bibliográficas:**

LEIBFRIED, D. et al. Quantum dynamics of single trapped ions. *Reviews of Modern Physics*, The American Physical Society, v. 75, n. 1, p. 281–324, 2007.

GERRITSMA, R. et al. Quantum simulation of the Dirac equation. *Nature*, Macmillan Publishers Limited, v. 463, n. 7, p. 68–71, 2010.

LI, D.-S. et al. Quantum simulation of the weyl equation with a trapped ion. *Quantum Information Processing*, Springer, v. 18, n. 5, p. 151–162, 2019.

28

## Introdução à Mecânica Pseudo-Hermitiana

**Authors:** Ciro Micheletti Diniz<sup>1</sup>; Miled Hassan Youssef Moussa<sup>None</sup>

<sup>1</sup> Ufscar

**Corresponding Author:** m.dinizciro@gmail.com

Durante toda graduação, nos cursos de mecânica quântica, lidamos sempre com hamiltonianos hermitianos, bem como com uma base de autoestados e autovalores reais, e em todos os problemas tratados os hamiltonianos obedeciam essa característica. Mas nem todos os fenômenos podem ser

descritos por esse tipo formalismo, o que fez surgir o formalismo pseudo-hermitiano, que diz como tratar os hamiltonianos não hermitianos e também os operadores e os novos tipos de autoestados e autovalores.

**Aluno de::**

Mestrado

**Referências bibliográficas:**

1 BENDER, C. M.; BOETTCHER, S. Real spectra in non-hermitian hamiltonians Having PT Symmetry. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 80, n. 24, p.5243–5246, jun. 1998. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/physrevlett.80.5243>.

2 BALLENTINE, L. E. *Quantum Mechanics*. WORLD SCIENTIFIC, 2013. Disponível em: <https://doi.org/10.1142/9038>.

3 BENDER, C. M. Introduction to  $\mathcal{P}$ -symmetric quantum theory. *Contemporary Physics*, Informa UK Limited, v. 46, n. 4, p. 277–292, jul. 2005. Disponível em: <https://doi.org/10.1080/00107500072632>.

29

## Dinâmica de sistemas quânticos no espaço de fases e termalização a partir do formalismo de Weyl-Wigner.

**Author:** Caio Fernando Silva<sup>1</sup>

**Co-author:** Alex E. Bernardini<sup>2</sup>

<sup>1</sup> UFSCar

<sup>2</sup> Universidade Federal de São Carlos

**Corresponding Author:** caiofernandoesilva@gmail.com

Se por um lado, sistemas clássicos podem ser descritos por um conjunto de trajetórias no espaço de fases sujeitas a condições iniciais apropriadas, por outro lado, a não-comutatividade dos operadores posição e momento impede que se defina uma verdadeira densidade de probabilidade no espaço de fases, em consonância com o princípio da incerteza de Heisenberg. Esse problema pode ser contornado a partir da formulação de Weyl-Wigner da Mecânica Quântica, que estabelece um mapeamento de operadores quânticos a funções dependentes de números comutativos. Essa linguagem unificada permite descrever a evolução de um sistema quântico simultaneamente em termos da posição e momento a partir da generalização da equação de *Liouville*. Evidentemente, uma teoria da mecânica quântica válida deve fornecer um protocolo para se obter observáveis físicos, os quais podem ser obtidos como integrais no espaço de fases com a função de Wigner desempenhando o papel de uma *quasi*-densidade de probabilidade. Ela apresenta uma relação unívoca com o operador densidade do sistema, o que permite a extensão do formalismo a estados mistos, quando o sistema não pode ser descrito por uma função de onda. Nesse escopo, os efeitos térmicos podem ser naturalmente incluídos para se investigar as propriedades termodinâmicas do sistema.

**Aluno de::**

Doutorado

**Referências bibliográficas:**

C. F. Silva and A.E. Bernardini, *Physica A* 558, 124915 (2020).

W. B. Case, *Am. J. Phys.* 76, 937 (2008).

O. Steuernagel, D. Kakofengitis and G. Ritter, *Phys. Rev. Lett.* 110, 030401 (2013).

30

## Tentativas de Mecânica Quântica Relativística e a Necessidade de Campos Quânticos

**Author:** Matheus Melo Santos Velloso<sup>1</sup>

**Co-author:** Raphael Santarelli<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Física - UFSCar

**Corresponding Author:** velloso@df.ufscar.br

O desenvolvimento da Teoria Quântica foi uma das principais mudanças de paradigma na história da Física. Apesar de se afastar radicalmente da intuição clássica, a Mecânica Quântica pode aproveitar conceitos clássicos devidamente atualizados pelos procedimentos de *quantização*. Por exemplo, a quantização da relação de dispersão  $E = p^2/2m$  leva à Equação de Schrödinger, que determina a evolução de uma função de onda para uma partícula não-relativística sem spin. Pela mesma lógica, pode parecer uma simples questão de quantizar a relação de energia-momento relativística,  $E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$ , para obter uma equação para funções de onda relativísticas. Neste trabalho, é mostrado como essa ideia leva a estados de energia negativos e densidades de probabilidade negativas, bem como outras inconsistências entre a Relatividade e a Mecânica Quântica. É mostrado também como uma conciliação é alcançada com a introdução dos *campos quânticos*, necessários para uma descrição quântica completamente relativística e extremamente bem sucedida: a Teoria Quântica de Campos.

**Aluno de::**

Graduação

**Referências bibliográficas:**

- [1] Alvarez-Gaumé, L.; Vázquez-Mozo, M.A. “An Invitation to Quantum Field Theory”. Springer
- [2] Srednicki, M. “Quantum Field Theory”. Cambridge University Press
- [3] Lancaster, T.; Blundell, S. J. “Quantum Field Theory for the gifted amateur”. Oxford University Press

31

## ABUNDÂNCIA QUÍMICA DE OXIGÊNIO EM GALÁXIAS LINERs

**Authors:** Celso Benedito Oliveira Junior<sup>1</sup>; Ângela Cristina Krabbe<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Univap

**Corresponding Author:** cbo\_jr@hotmail.com

Galáxias com região nuclear de linhas de baixa ionização (LINERs) são objetos comuns e aparecem em cerca de um terço das galáxias do universo local. A natureza da fonte ionizante destes objetos ainda não é bem compreendida e não existem métodos específicos e confiáveis para estimar a abundância química desses objetos. Utilizando dados espectroscópicos de campos integral do survey MaNGA (Mapping Nearby Galaxies at Apache Observatory), investigou-se a abundância de oxigênio nos núcleos de dez galáxias LINERs. Para tal estudo, empregaram-se sete calibrações de metalicidade disponíveis na literatura, sendo cinco destas utilizadas para determinação de abundância química de oxigênio em regiões HII (regiões de formação estelar) e duas calibrações empregadas na determinação de abundância química de oxigênio em Núcleo Ativo de Galáxia (AGN). Por meio de extrapolação do gradiente radial estimou-se a abundância de O/H no núcleo dos objetos da amostra, obtendo-se valor médio de  $12 + \log(O/H) \approx 8,81$ .

**Aluno de::**

Doutorado

**Referências bibliográficas:**

CASTRO, C. S. et al. New metallicity calibration for Seyfert 2 galaxies based on the N2O2 index. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 467, p. 1507–1514, maio 2017.

STORCHI-BERGMANN, T. et al. Chemical Abundance Calibrations for the Narrow-Line Region of Active Galaxies. , v. 115, p. 909–914, mar. 1998.

HECKMAN, T. M. An optical and radio survey of the nuclei of bright galaxies - Activity in normal galactic nuclei. *Astronomy Astrophysics*, v. 87, p. 152–164, jul. 1980.

32

**Armazenamento e liberação de H<sub>2</sub>****Author:** Raphael Benjamim<sup>None</sup>**Co-author:** Leonardo Dantas Machado**Corresponding Author:** constatine22@hotmail.com

Em nosso trabalho, utilizamos o programa Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) para analisar se a deformação poderia ser utilizada para liberar gases adsorvidos em materiais 2D. Para determinar se isto era possível, primeiro examinamos se o puxamento alterava a interação entre o gás adsorvido e quatro estruturas: grafeno,  $\alpha$ -grafino,  $\beta$ -grafino e  $\gamma$ -grafino. Para isto, inserimos uma molécula de H<sub>2</sub> a uma altura  $z$  da superfície de cada material, e alteramos a sua posição para determinar a energia de interação ao longo de toda a superfície. A análise dos resultados revelou que o esticamento reduziu a interação atrativa entre o H<sub>2</sub> e todos os materiais 2D investigados. Para confirmar que a quantidade de gás adsorvida seria diferente na presença de deformação, realizamos simulações de Monte Carlo no ensemble Grande canônico, para estruturas com e sem deformação.

**Aluno de::**

Mestrado

**Referências bibliográficas:**

WANG, K. et al. Comparative studies of adsorption capacities for graphene based sorbents with different potential functions in molecular simulations. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 41, n. 18, p. 7419–7424, 2016. ISSN 0360-3199. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319915318498>.

WANG, Q.; JOHNSON, J. K. Molecular simulation of hydrogen adsorption in single-walled carbon nanotubes and idealized carbon slit pores. *The Journal of Chemical Physics*, v. 110, n. 1, p. 577–586, 1999. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.478114>

XU, B. et al. Li-decorated graphyne as high-capacity hydrogen storage media: First-principles plane wave calculations. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 39, n. 30, p. 17104–17111, 2014. ISSN 0360-3199. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319914023337>.

33

**Efeito da Adsorção de Moléculas Atmosféricas nas Propriedade de Transporte Eletrônico da Monocamada de MoS<sub>2</sub>**

**Authors:** Natan Moreira Regis<sup>None</sup>; Matheus Paes Lima<sup>1</sup>

<sup>1</sup> UFSCar

**Corresponding Author:** n.m.regis@df.ufscar.br

O dissulfeto de molibdênio ( $MoS_2$ ) é um metal dicalcogeneto de transição (TMD) com aplicações promissoras em nanoeletrônica, spintrônica, dispositivos fotovoltaicos e catálise. Algumas aplicações foram relatadas recentemente na literatura [1,2]. A estrutura do  $MoS_2$  é do tipo cristal de van der Waals, onde diversas camadas bi-dimensionais se ligam por interações fracas de van der Waals, tornando fácil isolar uma única folha por esfoliação. Neste trabalho, será estudada a interação de algumas moléculas da atmosfera, a saber,  $H_2$ ,  $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $N_2$  e  $O_2$ , sobre uma monocamada de  $MoS_2$ . Serão aplicadas técnicas relatadas na Ref. [3] com simulações baseadas na teoria do funcional da densidade (DFT) com uso do código *Vienna Ab initio Simulation Package - VASP*. Correções para as forças de van der Waals serão empregadas para uma melhor descrição das interações de longo alcance. Serão empregados nove sítios de adsorção iniciais, e ainda várias orientações moleculares, para se determinar o comportamento de adsorção e a estabilidade das moléculas sobre a monocamada de  $MoS_2$ . Análises posteriores serão conduzidas para os sistemas com geometria otimizada que sejam estáveis.

**Aluno de::**

Graduação

**Referências bibliográficas:**

- [1] Pospischil, A.; Furchi, M.; Mueller, T. Solar-energy conversion and light emission in an atomic monolayer p-n diode. *Nature Nanotechnology*, 2014, 9, 257–261.
- [2] Leng, K.; Chen, Z.; Zhao, X.; Tang, W.; Tian, B.; Nai, C.T.; Zhou, W.; Loh, K.P. Mo-Terminated Edge Reconstructions in Nanoporous Molybdenum Disulfide Film. *ACS Nano*, 2016, 10, 9208-9215.
- [3] Meneses-Gustin, D.; Cabral, L.; Lima, M. P.; Da Silva, J. L. F.; Margapoti, E.; Ulloa, S. E.; Marques, G. E.; Lopez-Richard, V. Photomodulation of transport in monolayer dichalcogenides. *Phys. Rev. B*, 2018, 98, 241403.

35

## Propriedades Magnetodielétrica do Filme Fino de PZT/CFO

**Authors:** Vitor Melo Frata Barbosa<sup>1</sup>; Fabio Luis Zabotto<sup>1</sup>; Ricardo Pereira Bonini<sup>1</sup>

<sup>1</sup> UFSCar

**Corresponding Author:** vitorfrata2016@gmail.com

Os materiais magnetodielétricos tem como propriedade de interesse a variação de suas características dielétricas com a aplicação de um campo magnético. Este efeito é comumente reportado para sistemas com acoplamento magnetoelétrico, tanto na forma volumétrica como em filmes finos. Um dos materiais cujo efeito é reportado são filmes finos do sistema PZT/CFO, cujas aplicações tecnológicas são vastas sendo desde proposições de atuadores multifuncionais até sensores de leitura e gravação de informação. Contudo, para se potencializar suas aplicações faz-se necessário compreender a natureza da interação magnetodielétrica. O presente trabalho tem como objetivo estudar o acoplamento magnetodielétrico no PZT/CFO. A análise baseou-se nas medidas da permissividade complexa ( $\epsilon^*$ ) em função da frequência (100Hz a 1MHz) com campo magnético aplicado (-10KOe a 10KOe, passo 200) realizadas em temperatura ambiente, o maior coeficiente magnetodielétrico, na ordem de 0,67%, foi encontrado na frequência de relaxação, para estudar este processo ajustou-se os dados no modelo Cole-Cole para permissividade, observou-se uma variação do tempo de relaxação ( $\tau_0$ ) com campo magnético aplicado de até 2%, indicando que o campo magnético afeta diretamente o mecanismo de relaxação da amostra.

**Aluno de::**

Graduação

**Referências bibliográficas:**

36

## Propriedades Eletrônicas e Acoplamento Spin-Órbita de Compostos Tetrapirrólicos

**Authors:** Vinicius Rocha<sup>1</sup>; Paulo Piquini<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Universidade Federal de Santa Maria*

<sup>2</sup> *UFMS*

**Corresponding Author:** vininrocha.9083@gmail.com

A geração de oxigênio singleto por moléculas que são usadas em aplicações na terapia fotodinâmica (TFD) requer a absorção de luz visível e uma transição de eletrônica de um estado excitado singleto para tripleto. Este último processo é conhecido como cruzamento intersistema (ISC). Para isso ocorrer o acoplamento spin-órbita (SOC) tem de ser grande o suficiente entre os dois estados. Compostos tetrapirrólicos como os coróis têm sido amplamente investigados e parecem ser potentes fotossensibilizadores. Eles têm longo tempo de vida no estado tripleto, alta absorção na janela terapêutica (550nm - 800nm) e alto rendimento quântico de oxigênio singleto. Neste trabalho avaliamos os espectros de absorção e os elementos de matriz SOC para a molécula de corol com diferentes ligantes. A Teoria do Funcional da Densidade (DFT) foi usada para determinar as propriedades estruturais e eletrônicas dos estados fundamentais, enquanto a DFT dependente do tempo foi empregada para calcular as propriedades dos estados excitados. Os elementos da matriz SOC entre os estados excitados singleto e tripleto são calculados por um método não interativo usando o operador completo de Breit-Pauli. Os resultados obtidos para moléculas de corol mostraram que todos os compostos podem ser fotossensibilizadores potentes para uso em terapia fotodinâmica.

**Aluno de::**

Mestrado

**Referências bibliográficas:**

Chiodo, S.; Russo, N., J. Comput. Chem. 29, 912-920, (2008)

RUNGE, E.; GROSS, E. K. Density-functional theory for time-dependent systems. Physical Review Letters, APS, v. 52, n. 12, p. 997, 1984.

Roeder, B., Laser Med. Sci. 5, 99-106, (1990)

38

## O movimento browniano: uma abordagem utilizando o princípio de Jaynes

**Author:** Lucas Figueiredo<sup>None</sup>

**Co-authors:** Rodrigo Bufalo<sup>1</sup>; Tatiana Cardoso

<sup>1</sup> *Universidade Federal de Lavras*

**Corresponding Author:** figluca14@gmail.com

O movimento browniano, descrito por Robert Brown (séc XIX) ao observar pólen suspenso em água, é um exemplo de movimento randômico executado por partículas suspensas em um fluido.

As primeiras tentativas de descrevê-lo foram por meio do cálculo das velocidades das partículas, o que se mostrou ineficiente devido à natureza irregular das trajetórias. Somente em 1905 Einstein propõe uma abordagem termodinâmica ao tratar o movimento browniano como um processo de difusão. Resolvendo a equação de difusão ele encontra a distribuição de probabilidades da posição das partículas, sendo ela a distribuição gaussiana. Uma outra maneira menos conhecida de tratar o movimento browniano é utilizando o princípio de Jaynes, uma poderosa ferramenta em teoria da informação. Tal princípio nos diz que ao maximizar a entropia da informação, levando em consideração os vínculos adequados para o sistema em questão, obtemos a distribuição de probabilidade ótima. Apresentamos no trabalho uma discussão sobre o movimento browniano e algumas das suas muitas aplicações. Discutimos a solução de Einstein brevemente e damos destaque ao tratamento pelo princípio de Jaynes. Utilizando o método dos multiplicadores de Lagrange maximizamos a entropia da informação e encontramos um resultado concordante com o já conhecido pela abordagem termodinâmica.

**Aluno de::**

Mestrado

**Referências bibliográficas:**

CHAICHIAN, Masud; DEMICHEV, Andrei. Path integrals in physics: Volume I stochastic processes and quantum mechanics. CRC Press, 2018.

EINSTEIN, Albert. On the theory of the Brownian movement. Ann. Phys, v. 19, n. 4, p. 371-381, 1906.

JAYNES, Edwin T. Information theory and statistical mechanics. Physical Review, v. 106, n. 4, p. 620, 1957.

39

## Aplicação e revisão dos conceitos da Álgebra Linear no contexto da Teoria da Relatividade

**Author:** Caio Martins<sup>1</sup>

**Co-author:** Carlos Eduardo Pellicer<sup>1</sup>

<sup>1</sup> UFRN

**Corresponding Author:** caio.mg.rmoraes@gmail.com

A pesquisa objetiva apresentar uma modificação na Álgebra Linear para a formulação da Teoria da Relatividade Restrita sem a necessidade do conceito de “espaço de Minkowski”. Para isso, foram feitas revisões bibliográficas sobre Álgebra Linear, Eletromagnetismo Clássico e Relatividade Restrita. A modificação foi apresentada junto com suas consequências na Física. Em decorrência da modificação, uma revisão bibliográfica de tensores é feita. Também, discussões sobre polinômio de Taylor, Dinâmica de Fluidos, orientação de bases no  $\mathbb{R}^n$ , símbolo de Levi-Civita e formas bilineares são apresentadas.

**Aluno de::**

Graduação

**Referências bibliográficas:**

[1] APOSTOL, Tom M. “Calculus”. v 2. ed 2. Nova Iorque: John Wiley. 1967-69.

[2] GRIFFITHS, David J. “Introduction to Electrodynamics”. ed 3. Upper Saddle River: Prentice Hall, 1999.

[3] RENTELN, Paul. “Manifolds, Tensors, and Forms: An Introduction for Mathematicians and Physicists”. ed 1. Nova York: Cambridge University Press, 2014.

40

## **Evolução ferroelétrica em função da dimensionalidade do sistema Pb(Zr<sub>0,2</sub>Ti<sub>0,8</sub>)O<sub>3</sub>/CoFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> crescido via RF-Sputtering.**

**Authors:** Ricardo Pereira Bonini<sup>1</sup>; Fabio Luis Zabotto<sup>1</sup>

<sup>1</sup> UFSCar

**Corresponding Author:** rpbonini@df.ufscar.br

Foram fabricados filmes finos de Pb(Zr<sub>0,2</sub>Ti<sub>0,8</sub>)O<sub>3</sub> utilizando a técnica de deposição física por rádio frequência (RF-Sputtering) crescidos sobre camada de 300 nm de CoFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> em substrato de Si (1 0 0). Os filmes fabricados possuem espessuras de 20, 50, 100 e 300 nm e foram cristalizados em forno RTA a temperatura de 700 °C por 3 min. Foi verificado que o tamanho médio de grãos aumenta com o aumento da espessura dos filmes. De maneira geral, os resultados obtidos indicam que o sistema passa a ser tipicamente ferroelétrico para os filmes com tamanho médio de grãos superior a 200 nm, em que, também foi verificado um aumento significativo da quantidade de domínios ferroelétricos. Também foi estudado o avanço da relaxação nas propriedades dielétricas em função da espessura dos filmes, onde, um dos mecanismos de relaxação corre para regiões de alta frequência.

**Aluno de::**

Doutorado

**Referências bibliográficas:**

41

## **Correlações estatísticas da luz espalhada por amostras atômicas densas**

**Author:** Pablo Gabriel Santos Dias<sup>1</sup>

**Co-authors:** Pedro H. N. Magnani<sup>1</sup>; Marcia F. Frometa<sup>2</sup>; Philippe W. Courteille<sup>2</sup>; Raul C. Teixeira<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidade Federal de São Carlos

<sup>2</sup> Universidade de São Paulo

**Corresponding Author:** pablo.dias@df.ufscar.br

A propagação de luz por uma amostra desordenada de centros espalhadores isotrópicos quase-ressonantes com a luz incidente no regime diluído pode ser descrita por um modelo de campo médio. No regime denso, por outro lado, uma descrição de campo médio não é mais possível, pois as correlações entre vizinhos próximos tornam-se fortes. Para uma onda escalar, é possível descrever o processo de espalhamento a partir das correlações, temporais e espaciais, da luz espalhada. Flutuações universais de condutividade manifestam-se na função de correlação angular da onda espalhada. As correlações temporais, por outro lado, trazem informação sobre a distribuição de distâncias percorridas pela onda quando se difunde no meio material. As noções obtidas em sistemas complexos de baixa densidade serão estudadas no contexto dos sistemas densos, onde o caráter vetorial da luz que se torna fundamental. Para isso, uma nuvem de átomos frios de estrôncio é um ótimo corpo de prova devido a sua baixa temperatura e a possibilidade de se explorar facilmente diferentes geometrias e densidades. Com esta nuvem iremos verificar os comportamentos espaciais e temporais da função de correlação da luz espalhada.

**Aluno de::**

Doutorado

**Referências bibliográficas:**