



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

**4 a 8 de julho de 2022**

***São José dos Campos***

**Instituto Tecnológico de Aeronáutica –  
ITA**

Programa de Pós-graduação em Física do ITA

[www.pgfis.ita.br](http://www.pgfis.ita.br)

Departamento de Física do ITA

04 de julho de 2022

# Programação

1. Apresentação	3
2. Programação	5
3. Palestra de Abertura e Homenagens	13
4. Minicursos	15
5. Palestras	19
6. Palestra de Encerramento	27
7. Seção de Apresentação de Pôsteres	29
8. Participantes	83
9. Índice de Autores	87

# Comissão Organizadora

## Docentes

*Manuel Máximo Bastos Malheiro de Oliveira*  
(coordenador)

*Marco A. Ridenti*  
(vice-coordenador)

*André Pereira*  
*Ivan Guilhon*  
*Lara Kühn Teles*

## Discentes

*Alysson Brhian de Souza Muniz Silva*

*Elisa Assencio*  
*Estevão Teixeira*  
*Gusthavo Brizolla*  
*Júlia Karnopp*  
*Sophia Laranja*





# Apresentação

O Encontro de Física do ITA chega em 2022 à sua XV edição. O Programa de Pós-graduação em Física (PG/FIS) em conjunto com o Departamento de Física do Instituto Tecnológico de Aeronáutica (ITA) estão organizando o XV Encontro de Física do ITA (EFITA) que acontecerá presencialmente no período de 4 a 8 de julho de 2022. Também faremos uma homenagem para os docentes aposentados que tiveram (e alguns ainda têm) uma grande contribuição para o Programa de Pós-Graduação de Física do ITA.

O EFITA é um Encontro de Física organizado no ITA, no âmbito do Programa de Pós-Graduação em Física (PG-FIS). Além de palestras referentes à pesquisa realizada no contexto do PG-FIS, o evento conta também com palestrantes convidados que desenvolvem pesquisa de destaque em diversas áreas. O encontro também possui um caráter formativo e oferecerá minicursos de ferramentas experimentais e teóricas de física.

Na solenidade de abertura comemorativa dos 15 anos do EFITA teremos a participação do Prof. Rogério César de Cerqueira Leite, iteano da turma 58 e doutor em Física pela Universidade de Paris, Professor Emérito da UNICAMP e Presidente do Conselho de Administração e Fiscal do Conselho Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM). O Professor Cerqueira Leite será homenageado na ocasião pelo ITA na presença de seu Reitor pelos importantes serviços prestados à Ciência Brasileira. Além disto, contaremos nesta solenidade com a presença do Físico Prof. Dr. António José Roque da Silva, Diretor do CNPEM, que proferirá a palestra de abertura do XV EFITA intitulada "CNPEM: um complexo singular para os desafios do futuro".

Manuel Máximo Bastos Malheiro de Oliveira  
Coordenador do XV EFITA



# Programação

## XV EFITA – Programação

seg 4 jul 2022

### **8h – 9h30 Cerimônia de abertura do XV EFITA e homenagens**

Abertura oficial contará com a presença do Reitor Prof. Dr. Anderson Ribeiro Correias, Chefe da Divisão de Pós-graduação - Prof. Dr. Erico Rempel (representando a Pró-Reitora de Pós-graduação e Pesquisa do ITA), Chefe da Divisão de Ciências Fundamentais - Prof. Dr. Mauri, Coordenadora do Programa de Pós-graduação em Física - Profa. Dra. Lara K. Teles, Presidente do Conselho de Administração e Fiscal do CNPEM - Prof. Dr. Rogério César de Cerqueira Leite, Diretor do CNPEM - Prof. Dr. António José Roque da Silva.

Chair: *Sarg. Alexandre*

### **9h30 – 10h Coffee break**

### **10h – 12h Minicurso 1 - Parte 1**

*Prof. Dr. César Henrique Lenzi (ITA)*

### **12h – 13h30 Pausa para almoço**

### **13h30 – 15h30 Minicurso 2 - Parte 1**

*Prof. Dr. Gastão Inácio Krein (UNESP)*

Título: Introdução à computação quântica

### **15h30 – 16h Coffee break**

### **16h – 16h30 Palestra 1**

*João Pedro Magalhães Chaves (in memorian), Prof. Dr. Rodrigo Sávio Pessoa e Prof. Dr. Argemiro Soares da Silva Sobrinho (ITA)*  
Chair:*Prof. Dr. Marco A. Ridenti*

**16h30 – 18h Seção de apresentação de pôsters**

**18h – 18h45 Jantar**



# XV EFITA – Programação

**ter 5 jul 2022**

**8h – 9h30 Palestra 2**

*Maj Lachlan Thomas Belcher (ITA)*

Título: Desafios na área da Física Atômica e Molecular

Chair: *Prof. Dr. Renê Spada*

**9h30 – 10h Cofee break**

**10h – 12h Minicurso 2 - Parte 2**

*Prof. Dr. Gastão Inácio Krein (UNESP)*

Título: Introdução à computação quântica

**12pm – 13h30 Pausa para almoço**

**13h30 – 18h Visita ao INPE**

Chair: *Prof. Dr. André Pereira*

**18h – 18h45 Jantar**

# **XV EFITA – Programação**

**qua 6 jul 2022**

**8h – 9h30 Palestra 3**

*Prof. Dr. Antonio Zelaquett Khoury (UFF)*

Título: A Óptica Quântica e seus Desafios

Chair: *Prof. Dr. Manuel Malheiro*

**9h30 – 10h Coffee break**

**10h – 12h Minicurso 1 - Parte 2**

*Prof. Dr. César Henrique Lenzi (ITA)*

**12pm – 13h30 Almoço**

**13h30 – 14h Palestra 4**

*Prof. Dr. Rodrigo Picanço Negreiros (UFF)*

Título: Desafios da Astrofísica Nuclear

Chair: *Prof. Dr. Manuel Malheiro*

**14h – 18h Visita aos laboratórios do ITA: CCM, LCPE, LAB-FENG**

**18h – 18h45 Jantar**

## **XV EFITA – Programação**

**qui 7 jul 2022**

### **8h – 9h30 Minicurso 3 - Parte 1**

*Prof. Dr. Ivan Guilhon Mitozo Rocha e Prof. Dr. Marcelo Marques*

Título: Simulações computacionais: um laboratório virtual de nanotecnologia

### **9h30 – 10h Coffee Break**

### **10h – 12h Minicurso 4 - Parte 1**

*Prof. Dr. Douglas Marcel Gonçalves Leite, Prof. Dr. André Luis de Jesus Pereira e Prof. Dr. Rodrigo Sávio Pessoa (ITA)*

Título: A Física de Plasmas superando importantes desafios da Tecnologia de Materiais

### **12h – 13h30 pausa para almoço**

### **13h30 – 15h30 Minicurso 3 - Parte 2**

*Prof. Dr. Ivan Guilhon Mitozo Rocha e Prof. Dr. Marcelo Marques*

Título: Simulações computacionais: um laboratório virtual de nanotecnologia

### **15h30 – 16h Coffee break**

### **16h – 16h30 Palestra 5**

*Prof. Dr. Marco Antonio Ridenti (ITA)*

Título: Contribuições do projeto SPORT para a Ionosfera Equatorial

Chair: *Prof. Dr. Manuel Malheiro*

### **16h30 – 18h Seção de apresentação de pôsters**

### **18h – 18h45 Jantar**

## **XV EFITA – Programação**

sex 8 jul 2021

### **9h – 9h30 Palestra 6**

*Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Lara K. Teles*

Título: O Programa de Pós-graduação em Física: oportunidades e desafios

Chair: *Prof. Dr. André Chaves*

### **9h30 – 10h Coffee break**

### **10h – 12h Minicurso 4 - Parte 2**

*Prof. Dr. Douglas Marcel Gonçalves Leite, Prof. Dr. André Luis de Jesus Pereira e Prof. Dr. Rodrigo Sávio Pessoa (ITA)*

Título: A Física de Plasmas superando importantes desafios da Tecnologia de Materiais

### **12h – 13h30 Almoço**

### **13h30 – 14h Empresa A: Versatus High Performance Computer**

### **14h – 14h30 Empresa B: Qutools – Quantum Design**

### **14h30 – 15h30 Palestra 7**

*Prof. Dr. Franciole da Cunha Marinho (ITA)*

Título: Perspectivas para a Física de Neutrinos

Chair: *Prof. Dr. Maurício Pazianoto*

### **15h30 – 16h Coffee Break**

### **16h30 – 18h Palestra de Encerramento e Premiação**

Palestra de Encerramento: *Prof.Dr. Ado Jório de Vasconcelos (UFMG)*

Título: O Desafio da Instrumentação Científica

Chair: *Prof. Dr. Manuel Malheiro*

Premiação: *Prof. Dr André Pereira*



# Palestra de Abertura e homenagens

**CNPEM: um complexo singular para os desafios do futuro** PA1

Prof. Dr. Antonio José Roque da Silva

CNPEN

Laboratórios Nacionais se tornaram elementos importantes nos Sistemas Nacionais de Ciência, Tecnologia e Inovação dos diferentes países, desde o sucesso inicial dessas instalações com o Projeto Manhattan. Apesar de, inicialmente, estarem fortemente ligados a questões de segurança nacional, evoluíram ao longo do tempo para centros que desenvolvem, constroem, operam e mantêm infraestrutura e equipamentos de pesquisa diferenciados, de escala de tamanho e recursos incompatíveis com uma replicação em vários laboratórios de pesquisa, com enorme ganho de escala. A evolução dos Laboratórios Nacionais também trouxe um segundo componente, que é a missão de execução de programas estratégicos, em áreas como saúde, meio ambiente, energia, novos materiais, dentre outros. Uma característica desses problemas, dadas as suas complexidades, é a necessidade de abordagens multidisciplinares e coordenadas na busca de soluções.

Inspirado nesse modelo dos Laboratórios Nacionais, o Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM) se destaca no cenário nacional por ser um centro de referência aberto, multiusuário e multidisciplinar, beneficiando anualmente milhares de cientistas nas mais diversas áreas do conhecimento. O CNPEM tem sua origem no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), que desenvolveu a tecnologia e construiu entre 1987 e 1997 uma fonte de luz síncrotron de segunda geração, primeira do hemisfério sul. Ao longo dos anos outras competências foram sendo agregadas ao Centro, atingindo sua configuração atual como um complexo de quatro Laboratórios Nacionais

que reúne: o próprio LNLS; o Laboratório Nacional de Biociências (LNBio); o Laboratório Nacional de Nanotecnologia (LNNano) e o Laboratório Nacional de Biorrenováveis (LNBR).

Desde 2009 o CNPEM tem trabalhado no projeto e construção do novo síncrotron brasileiro – Sirius. Sirius será um sincrotron de altíssimo brilho, uma das primeiras máquinas de 4a geração do mundo, e um dos projetos mais avançados já construídos no país. Esse aumento significativo do brilho irá permitir a execução de experimentos e utilização de técnicas antes indisponíveis no país. Com isso, Sirius abrirá enormes oportunidades para o estudo de materiais – orgânicos e inorgânicos – com grau de detalhe sem precedentes, fornecendo ferramentas de pesquisa de ponta competitivas mundialmente. Esse complexo de competências integradas no CNPEM permite que grandes e complexos desafios científicos para o futuro possam ser abordados, contribuindo para a solução de relevantes problemas para o Brasil e o mundo. Nesta palestra será apresentada uma visão geral do CNPEM bem como as principais características, potencialidades e status do projeto Sirius.

---



# Mini cursos

## Minicurso 1

### Testes Clássicos da Relatividade Geral

Prof. Dr. César Henrique Lenzi

Instituto Tecnológico de Aeronáutica

Foi em 1915 que Karl Schwarzschild, apresentou ao mundo a primeira solução analítica para as equações de campo de Einstein. Tais soluções trouxeram à luz a compreensão de três anomalias observacionais, as quais não encontram resposta na teoria Newtoniana da gravitação: O avanço do Periélio de Mercúrio, Redshift gravitacional e a Deflexão da Luz. A última mencionada, alçou a Relatividade Geral ao status de teoria de corpo científico, fazendo de Einstein um dos cientistas mais midiáticos de seu tempo. Neste mini-curso, vamos tratar cada um destes problemas, da perspectiva da solução de Schwarzschild.

---

## Minicurso 2

### Introdução à Computação Quântica

Prof. Dr. Gastão Inácio Krein

UNESP

O minicurso consistirá em duas aulas sobre os aspectos mais básicos da computação quântica (QC). Após introduzir o qbit, serão abordados os três pilares da QC: superposição, emaranhamento e o processo de medida. A seguir, será explicado como esses conceitos são usados na criptografia e no teletransporte, e em algoritmos quânticos para fazer cálculos que são custosos demais para os computadores digitais. Os participantes do minicurso serão convidados explorar alguns algoritmos quânticos em simuladores e protótipos de computadores quânticos atualmente disponíveis.

---

## Minicurso 3

### **Simulações computacionais: um laboratório virtual de nanotecnologia**

Prof. Dr. Ivan Guilhon Mitozo Rocha e Prof. Dr. Marcelo Marques

ITA

Simulações computacionais são uma forma confiável e eficaz de explorar propriedades físicas de diferentes sistemas, proporcionando economia de tempo e dinheiro em pesquisas básicas e aplicadas. Os resultados dessa abordagem subsidiam experimentos tanto em caráter comparativo, oferecendo parâmetros de caracterização, como também preditivo, motivando novas possibilidades ainda não exploradas.

Neste minicurso, abordaremos princípios fundamentais para a simulação de propriedades físicas de materiais semicondutores e nanoestruturas. Partindo da Mecânica Quântica, discutiremos, em caráter introdutório, cálculos de estrutura eletrônica baseados na Teoria do Funcional da Densidade (DFT).

O curso contemplará não só aspectos teóricos, mas contará com a realização de simulações computacionais demonstrativas. Apresentaremos também modelos teóricos para cálculos de excitações desenvolvidos no ITA (DFT-1/2).

## Minicurso 4

### **A Física de Plasmas superando importantes desafios da Tecnologia de Materiais**

Prof. Dr. Douglas Marcel Gonçalves Leite, Prof. Dr. André Luis de  
Jesus Pereira e Prof. Dr. Rodrigo Sávio Pessoa

ITA

A Física de Plasmas permitiu o desenvolvimento de importantes tecnologias empregadas nos mais diversos setores, em especial na área de Engenharia de Materiais. Através deste minicurso, o Laboratório de Plasmas e Processos do ITA apresentará as principais e mais atuais tecnologias a plasma empregados na produção e processamento de materiais. Foco será dado nas tecnologias de produção de filmes finos a partir de processos assistidos a plasma, incluindo os conceitos e práticas envolvidos na caracterização destes filmes por elipsometria espectrofotométrica. O minicurso será composto de uma aula conceitual e uma aula prática incluindo a visualização de experimentos ao vivo como a ignição de tocha de plasma e a caracterização por sonda de Langmuir de uma descarga luminescente em baixa pressão.

---

# Palestras

## **Estudo do processo de deposição por camada atômica assistida por água ativada à plasma para síntese de filmes finos de Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> visando aplicações em revestimento de materiais**

PG1

Instituto Tecnológico de Aeronáutica

João Pedro Magalhães Chaves (in memoriam), Prof. Dr. Rodrigo Sávio Pessoa e Prof. Dr. Argemiro Soares da Silva Sobrinho

Sabe-se que a deposição por camadas atômicas (ALD) de óxidos metálicos, em especial da alumina (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>), quando operada em modo térmico (150°C), tem uso frequente da água deionizada como precursor oxidante do precursor metálico, i.e. o trimetilalumínio (TMA). No entanto, a taxa de crescimento por ciclo (GPC) do filme de Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> para TMA + H<sub>2</sub>O é limitada a no máximo 0,100 nm/ciclo dentro da “janela ALD”. Diversas são as modificações feitas no pulso oxidante do processo de ALD térmico para aumentar a GPC, onde dentre elas pode-se citar a assistência com uso de plasma de oxigênio (PEALD) ou de ozônio. Estas técnicas são denominadas na literatura como ALD melhorado por energia (energy-enhanced ALD) pelo fato de os precursores fornecerem uma maior energia de ativação durante o processo de oxidação do precursor metálico, TMA, e por conseguinte permitir uma maior eficiência de geração de sítios ativos para posteriores reações. Dentro deste escopo, neste trabalho de mestrado, propõe-se pela primeira vez a nível de literatura mundial o uso indireto do plasma no processo de oxidação do ALD, ou seja, a deposição por camada atômica assistida por água ativada a plasma (Plasma-activated water-enhanced atomic layer deposition (PAW-E-ALD)). Esta recente linha de pesquisa que faz uso da tecnologia de plasma atmosférico para ativar líquidos através de modificações em sua composição química, como por exemplo na mudança de pH, geralmente para ácido, tem

mostrado grande potencial a nível de aplicações na medicina, odontologia e agricultura. Assim, almejou-se neste trabalho verificar a capacidade da PAW em realizar a etapa oxidativa da molécula de TMA durante a formação do  $\text{Al}_2\text{O}_3$  em ALD térmico. Para ativação da água DI foi utilizado um sistema de jato de plasma tipo “Gliding Arc” ou “Arco deslizante” operando em pressão atmosférica com ar comprimido e fluxo de 5 L/min. Foram obtidas PAWs com pH de 3,6 (amostra PAW 3.6), 3,1 (amostra PAW 3.0) e 2,7 (amostra PAW 2.7). Com estas condições foram determinados o GPC para tais amostras além da amostra controle (água DI, pH = 6,7), que foram  $\text{GPC}_{\text{controle}} = 0,100$  nm/ciclo,  $\text{GPC}_{\text{PAW 3.5}} = 0,110$  nm/ciclo,  $\text{GPC}_{\text{PAW 3.0}} = 0,120$  nm/ciclo e  $\text{GPC}_{\text{PAW 2.5}} = 0,105$  nm/ciclo. Este resultado demonstra a capacidade da PAW em melhorar a taxa de crescimento da  $\text{Al}_2\text{O}_3$  ALD em até 17%, que é comparável a um processo PEALD, fato que evidencia o efeito indireto do plasma também é válido para processo de formação de filmes finos ALD. Próximas etapas de estudo foram focados na cinética de reação entre o TMA e a PAW in situ via espectrometria de massas, e estudos ex-situ da química e morfologia do filme formado para diferentes números de ciclo e pH pelas técnicas de FT-IR, XPS, EDS e FEG/SEM.

---

PG2

## Desafios na área da Física Atômica e Molecular

Maj Lachlan Thomas Belcher (ITA)

Um breve resumo dos projetos atuais na área de física atômica e molecular do departamento de física do ITA: design inteligente de propelentes mais energéticos e seguros, modelar a química quântica de lasers que dependam de transições não-adiabáticas, e a espectroscopia rovibracional de moléculas diatômicas.

---

## A Óptica Quântica e seus Desafios

PG3

Prof. Dr. Antonio Zelaquett Khoury  
UFF

Nesta palestra discutiremos novas formas de transmissão e processamento de informação baseadas nos princípios da Mecânica Quântica. Mostraremos como podemos codificar informação em um sistema quântico de dois níveis. Apresentaremos protocolos de criptografia e algoritmos de computação que se beneficiam desse tipo de codificação. Por último, discutiremos algumas técnicas experimentais empregadas nessa área.

---

## Desafios da Astrofísica Nuclear

PG4

Prof. Dr. Rodrigo Picanço Negreiros  
UFF

Os últimos anos nos presentearam com uma genuína revolução na astronomia e astrofísica nuclear. Auspiciosos avanços tecnológicos nos propiciaram as primeiras detecções de ondas gravitacionais e as primeiras “imagens” de buracos negros – além da promessa de outras façanhas, antes apenas imaginadas no reino da ficção científica. Esses avanços foram recebidos com tremendo entusiasmo pela comunidade de astrofísica nuclear, dada a prodigiosa oportunidade que tais feitos se apresentam para o estudo de tal disciplina. Particularmente interessante é a perspectiva de obter um conhecimento mais profundo de estrelas compactas e fenômenos correlatos. Tais objetos, dentre os quais se encontram as já populares estrelas de nêutrons e anãs brancas, se apresentam como ricos ambientes para o estudo da astrofísica nuclear. Nesta palestra iremos fazer um passeio pela história da astrofísica nuclear, desde seus primórdios com o trabalho seminal de Burbidge, Burbidge, Fowler e Hoyle (carinhosamente apelidado de  $B^2FH$ ) até os mais recentes avanços em nossa compreensão teórica e observacional. Particularmente iremos discutir os recentes avanços observacionais e os desafios e oportunidades que eles apresentam para a astrofísica nuclear.

---

## Contribuições do projeto SPORT para a Ionosfera Equatorial

Prof. Dr. Marco Antonio Ridenti  
ITA

O projeto SPORT (Scintillation Prediction Observation Research Task) tem como objetivo projetar, construir e operar um CubeSat em órbita baixa para investigar a ionosfera equatorial, com foco nas instabilidades que produzem o efeito deletério de cintilação sobre sinais de comunicação, radionavegação e geolocalização. Com lançamento previsto pela NASA do Kennedy Space Center na Florida para a ISS no segundo semestre de 2022, o CubeSat carregará seis instrumentos científicos para efetuar medidas locais de densidade e temperatura eletrônicas, campo magnético, campo elétrico, deriva de plasma e distribuição de energia dos íons. Nesta palestra, vamos apresentar os principais instrumentos, motivações, objetivos científicos e oportunidades oferecidas pela missão SPORT. Para contextualizar a missão e esclarecer suas potenciais contribuições no campo da física, geofísica e aeronomia, vamos também discutir algumas características físicas da ionosfera equatorial e o efeito de bolhas de plasma.

---

## O Programa de Pós-graduação em Física: oportunidades e desafios

Prof<sup>ª</sup>. Dr<sup>ª</sup>. Lara K. Teles  
ITA

O EFITA está completando 15 anos e homenageando alguns de seus docentes que se aposentaram e foram muito importantes para a consolidação do programa de pós-graduação em física do ITA (PG-FIS) e o sucesso do EFITA. Será apresentado seu corpo de docente e discente, áreas de concentração e laboratórios, e os representantes de área falarão das pesquisas e principais resultados obtidos nos projetos dos alunos, como também resultados relevantes das pesquisas desenvolvidas no âmbito do programa. Mais informações sobre o programa podem ser obtidas no site do PG-FIS: [www.pgfis.ita.br](http://www.pgfis.ita.br).

---



## Perspectivas para a Física de Neutrinos

PG7

Prof. Dr. Franciole da Cunha Marinho

ITA

Apesar do grande avanço no entendimento das características dos neutrinos desde a sua proposição por Pauli em 1930 até o momento, a Física de neutrinos atravessa atualmente um período muito interessante em que diversos aspectos relativos ao comportamento dessas partículas ainda precisam ser esclarecidos. Destes podem-se destacar a determinação dos parâmetros de mistura dos neutrinos, a descoberta da violação de CP neste setor e o estabelecimento da hierarquia de massa dessas partículas como de grande interesse pois podem fornecer indicações de física além do modelo padrão. Nesta palestra será apresentado um panorama da física de neutrinos onde abordaremos os desafios atuais do ponto de vista experimental indicando diversas oportunidades de atuação futura, tanto no desenvolvimento das tecnologias de detecção quanto na realização dos estudos das medidas dos eventos de interação de neutrinos.

---



# Palestra empresas

## **Empresa A: Versatus HPC, High Performance Computer**

PEmp1

Paulo Fonseca

A física computacional depende grandemente de simulações onde uma infraestrutura computacional de alto desempenho e configurada corretamente faz toda a diferença. Veja como a Versatus HPC pode auxiliá-lo a obter o melhor cluster, workstation ou supercomputador com a verba que você tem disponível. Conheça mais sobre a importância dos serviços em HPC e porque confiar sua infraestrutura HPC à uma empresa que está há 10 anos nessa vertical e vendeu e instalou grande parte do parque computacional científico brasileiro, tendo como clientes a maioria das universidades e incontáveis grupos de pesquisa.

---

## **Empresa B: Qutools Quantum Education Kits**

PEmp2

Ernesto Rezende Souza, PhD Quantum Design — Latin America

In this webinar, qutools will give an introduction to their Entanglement Demonstrator (quED) and available add-ons for the instrument. The quED is designed for educational purposes, fits on any lab desk, and can be set up in minutes. The easy-to-use system helps to explain the complex phenomena of quantum mechanics through the demonstration of several different quantum experiments. Qutools GmbH provides tools for quantum research and educational outreach. Founded in 2005, qutools' aim is to enable a better understanding of quantum physics on one hand and to advance technology through this understanding on the other hand. That is why qutools focuses on innovation while addressing the needs in the lab, making it possible to concentrate on the didactics, not on the measurement tools.

---



# Palestra de encerramento

## O Desafio da Instrumentação Científica

PE

Prof. Dr. Ado Jório de Vasconcelos  
UFMG - Universidade Federal de Minas Gerais

A palestra fala da importância da instrumentação científica, e discute o exemplo do desenvolvimento da nanoespectroscopia Raman e suas aplicações. Fundamentada na técnica de TERS (do inglês “Tip-Enhanced Raman Spectroscopy”), a nanoespectroscopia nos permite vislumbrar propriedades de nanoestruturas, como a localização de elétrons e fônons em materiais bi-dimensionais. A palestra aborda os aspectos científicos, tecnológicos e os esforços para levar o conhecimento básico até a inovação.

---



# Seção de Apresentação dos pôsters

## Grupo 1 - Atômica e molecular (A)

### **Influence of Different Structures in the Electronic Properties of Perovskite Compounds for Solar Cell Applications: Energy Gaps and Optical Absorption**

A1

Débora Nazaré de Freitas, Guilhon, Ivan (1), Teles, Lara K. (1),  
Marques, Marcelo (1), Sousa, Jeanlex S. (2)

(1) Instituto Tecnológico de Aeronáutica (ITA), (2) Universidade Federal do Ceará (UFC)

The interest of new semiconductors materials for solar cells application has been increasing over the years. Recently perovskites materials emerge drastically, causing a great impact in this research field. The main reason is that these compounds allows a device efficiency comparable with the standard Si's technology combined with a low cost production. However, the main obstacle to be overcome is the low stability and consequent fast device degradation. A good alternative to solve this problem is a search for news types of perovskite with optimized characteristics. Nowadays, naturally this task can be more efficiently developed with the help of theoretical-computational simulation. Nevertheless, unlike its synthesis, the theoretical description of perovskites is very complicated. Besides the mandatory inclusion of the energy gap correction, is very common a significative presence of spin-orbit effect, with both effects resulting in a high computational cost. Additionally, these materials, with the general chemical formula  $AMX_3$ , are structurally complex, undergoing multiple polymorph transitions as a function of temperature[1]. The main objective of this work is to study systematically 3 different inorganic perovskite compounds of the type  $CsMX_3$ , where  $M = Pb$  and  $Sn$ , and  $X = I, Br$  and  $Cl$ , in 4 different crystal structures: cubic, tetragonal, orthorhombic and rhombohedral. After a initial rigorous atomic relaxation for

each structure reaching an optimized internal geometry we provide an accurate band structure with a combination of DFT-1/2 [2] method for approximated quasiparticle corrections and the inclusion of spin-orbit interactions. This approach already demonstrated to provide very good results when compared of the experimental gaps of perovskite [3]. In this study, we particularly investigate how different types of structures can directly (or not) affect the physical properties that are essential for optimizing solar cells: band structure, energy gaps and also optical absorption. [1] Aida Alaei, Abigail Circelli, Yihang Yuan, Yi Yang and Stephanie S. Lee, *Mater. Adv.* 2, 47 (2021). [2] L. G. Ferreira, M. Marques, L. K. Teles, *PHYSICAL REVIEW B* 78, 125116 (2008). [3] Fernando Valadares, Ivan Guilhon, Lara K Teles, and Marcelo Marques, *The Journal of Physical Chemistry C*, 124, 26124 (2020).

---

A2

### **Excitonic effects in 2D anisotropic monolayer and bilayer and black phosphorus: an ab initio approach considering the DFT-1/2 method**

Diana Maria Navroski Thomen, A. Chaves (1); A. J. C. Chaves (2); I. Guilhon (2); M. Marques (2); L. K. Teles (2)

(1) Universidade Federal do Ceará, (2) Instituto Tecnológico de Aeronáutica

Obtaining the first two-dimensional (2D) single-layer material, graphene, triggered numerous experiments and theoretical studies on other 2D materials. Among the materials from which mono and few layers are obtained, one that has gained great prominence recently is phosphorene, obtained from black phosphorus (BP). Along with its unique electronic properties, phosphorene is one of the most prominent examples of anisotropic materials. In fact, the electronic properties of all 2D materials are anisotropic, considering both in-plane and out-of-plane coordinates, however, in addition to this anisotropy, a class that has received a lot of attention is that of materials with in-plane anisotropic band structure. It is known that the anisotropy of the energy bands is often reflected in the optical properties of the material, resulting in plasmonic states with different frequencies to polarize light in different directions and thus, the scattering of a plasmon-polariton becomes hyperbolic. Particularly, in-plane hyperbolic polaritons, natural



in layered materials, were demonstrated in MoO<sub>3</sub> and WTe<sub>2</sub>, which are based on phonon and plasmon resonances, respectively. More recently, it was predicted that the BP monolayer naturally hosts hyperbolic exciton-polaritons, thus opening a new perspective of natural hyperbolic polaritons in the plane, based on excitons rather than phonons or plasmons. [1]. However, from the theoretical point of view of ab initio calculations, studies in this regard are lacking. In this work, we investigated the electronic and optical properties of monolayer, bilayer and trilayer of black phosphorus (BP) through density functional theory (DFT) calculations. It is well known that DFT-LDA or GGA underestimate semiconductor gaps and quasiparticle corrections need to be included. Hybrid functionals, such as HSE, present better performance, although with higher computational cost. This problem is aggravated when considering the GW calculations, considered the state of the art. Furthermore, a good description of the optical properties including excitonic effects must be obtained by solving the Bethe-Salpeter equation (BSE), which further increases the computational cost. Thus, the study of low-cost computational methods to obtain accurate electronic structures and optical spectra is of great importance and can open the way for the study of hyperbolic exciton-polaritons, considering not only monolayer, but also few layers of anisotropic materials, via ab initio calculations. In this work, calculations using DFT and DFT-1/2 were performed to analyze the electronic and optical behavior of the mentioned structures. Surprisingly, despite both valence and conduction bands having the same orbital character in BP, the DFT-1/2 method proved to be effective in obtaining a reasonable band gap. Further analysis revealed different weights in the contribution of orbitals, leading to a sharper correction in one of the bands relative to the other. Furthermore, a refinement can be achieved when changing the amplitude of the modified potential, leading to results comparable to the GW method. The anisotropic dielectric function (real and imaginary parts), initially made without considering the contribution of excitonic effects, was obtained and compared with the available data. The results not only open the way for studies of anisotropic systems, using mathematical methods such as BSE to simulate excitonic behavior in these structures, but also provide a new insight into the DFT-1/2 method. [1] Fanjie Wang, Chong Wang, An-

drey Chaves, Chaoyu Song, Guowei Zhang, Shenyang Huang, Yuchen Lei, Qiaoxia Xing, Lei Mu, Yuangang Xie, and Hugen Yan, Nature Communication 12, 5628 (2021). [2] L. G. Ferreira, M. Marques, and L. K. Teles, Phys. Rev. B 78, 125116 (2008); idid AIP Adv. 1032119 (2011).

---

A3 **Theoretical Study of the Effect of Hydration on  $MAPbI_3$**

Gabriela Nascimento Pereira, I. Guilhon, M. Marques, L. K. Teles,  
A. M. da Silva Jr.(1)

(1) Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro

The rise of organometal halide perovskites (OMHPs) as low-cost alternative for silicon in solar cells has excited the academic and industrial communities. In this context, the  $MAPbI_3$  ( $MA = CH_3NH_3^+$ ) is considered a promising functional material for photovoltaic technology, reaching more than 20% of efficiency. However, the thermodynamic stability of OMHPs against UV radiation, moisture, heat and molecular oxygen is still an important obstacle. One of the main degradation agents is the water and understand its influence at molecular level becomes fundamental [1-3]. Thus, the main goal of this study is improving the understanding about electronic and thermodynamic consequences of water inclusion in perovskites, using the  $MAPbI_3$  as an initial chemical model. First-principles calculations were performed using Density Functional Theory (DFT), including van der Waals interaction through the D3 GGA exchange correlation functional, as implemented in VASP package. In order to provide a reliable prediction of the electronic properties, DFT-1/2 approximate quasiparticle corrections and spin-orbit coupling were taken into account. Using a tetragonal  $MAPbI_3$  supercell, the water molecules were incorporated following the  $H_2O$  :MA ratio (n), with n=0.00, 0.25, 0.50, 0.75 and 1.0. As n increases, the supercell volume expands, mainly due to the  $PbI_6$  octahedron distortions. For the band gap, the addition of water increases the gap, being 1.42 eV, 1.47 eV, 1.63 eV, 1.82 eV and 2,12 eV for n= 0.00, 0.25, 0.50, 0.75 and 1.00, respectively (experimental gap for  $MAPbI_3$  1.57 eV). For n=0.25 to 0.75 were noticed the interaction of water molecules with the  $MA^+$  group. For n=1.0 were observed a bound formation between the water and the  $Pb^{+2}$  of the octahedron,

probably caused by water saturation in the environment. The next steps are increase the value of  $n$ , observing its impact on the properties of ideal  $MAPbI_3$  and later considering compositional and structural defects. [1] Kakekhani, A.; Katti, R. N.; Rappe, A. M. Water in hybrid perovskites: Bulk  $MAPbI_3$  degradation via super-hydrous state. *APL Materials* 7, 041112 (2019). [2] Boyd, Caleb Cheacharoen, Rongrong Leijtens, Tomas McGehee, Michael. Understanding Degradation Mechanisms and Improving Stability of Perovskite Photovoltaics. *Chemical Reviews*. (2018). [3] Zheng, Chao Rubel, Oleg. Unraveling the Water Degradation Mechanism of  $CH_3NH_3PbI_3$  *The Journal of Physical Chemistry C*. (2019).

---

**Thermochemical and Kinetics of  $CH_2CN + CN \rightarrow HCN + HCCN$  and  $HCN + HCCN \rightarrow NCCH_2CN$  Elementary Reactions in Titan's Atmosphere**

A4

Isabela da Silva Vieira, Freire, Paulo (1); Spada, Rene (2)

(1) Univ. Federal do Ceará, (2) ITA

Saturn currently has 82 moons and amongst them we have Titan, a moon that has been carefully recognized and studied by the scientific community due to its atmosphere similarity to the Earth and for having shown to bear a very chemically rich environment. The surface pressure is 50% higher than that of the Earth, and is the only place in the Solar System, other than our planet, with liquid form on its surface, however, unlike our oceans made by  $H_2O$ , it is made by hydrocarbons (with the potential to uphold life forms). Aiming to provide for the understanding and modelling of Titan's atmosphere with reliable data, this study has goals to analyse two elementary reactions,  $CH_2CN + CN \rightarrow HCN + HCCN$  and  $HCN + HCCN \rightarrow NCCH_2CN$  (2). Whereas reaction 1 presents a triplet multiplicity and reaction 2 presents a singlet one. Reactants, products and saddle points were optimized employing Coupled Cluster Theory, 2-nd order Möller-Plesset Perturbation Theory and the  $\omega B97-X$  approach for the density functional theory, all using aug-cc-pVDZ basis set all utilizing the ORCA package. From these calculations, the thermochemical properties for each reaction path were obtained and the rate constants were calculated using the transition state theory (TST) with the incorporation of

Wigner’s correction for tunneling effects evaluation and canonical variational transition state theory approach (CVT). The potential energy surface was calculated with the MP2 methodology for reaction 1 and  $\omega$ B97-X functional for reaction 2. Finally, these curves were improved employing dual-level calculations considering the CCSD(T) methodology and extrapolating the results towards the complete basis set (CBS) limit using the aug-cc-pVXZ (X = T, Q) basis set, all calculated with the Pilgrim program. Reactions 1 and 2 are connected by an intersystem crossing process from the triplet surface (reaction 1) to the singlet one (reaction 2). We will present the evolution of our investigation into the possibility of these reactions taking place in Titan’s atmosphere aside from an indication of the possibility of the existence of the Malononitrile molecule (NCCH<sub>2</sub>CN) in this environment so far not yet detected, to our knowledge.

---

A5

## Probing the aromaticity of benzene derivatives through vibrational spectroscopy

Julio Cesar Verli Chagas, Vytor P. Oliveira (1); Francisco B. C. Machado

(1) Instituto Tecnológico de Aeronáutica

It is widely known that aromaticity is a multidimensional phenomenon closely related to  $\pi$ -electron delocalisation. The most common characteristics of aromatic compounds involve the decrease of bond length alternation, increased stability, and unique magnetic properties. Over the year, the harmonic oscillator model of aromaticity (HOMA) [1] has become a widely accepted index to elucidate the geometric aspect of aromaticity. Roughly speaking, it compares an optimum to an optimised bond length. For an ideal aromatic system, each calculated bond length,  $R_i$ , should be equal to an optimal reference value  $R_{opt}$  leading to  $HOMA = 1$

$$HOMA = 1 - \frac{\alpha}{NB} \sum (R_{opt} - R_i)^2,$$

where  $\alpha$  is a normalisation constant and NB is the number of bonds taken into the summation. Recently, an analogous description of aromaticity based on molecular spectroscopy, AI(vib), was introduced [2].

Essentially, the bond length in the HOMA equation is replaced by the relative bond strength order (BSO), derived from the local stretching force constants. By definition,

$$AI(vib) = 1 - \frac{\gamma}{NB} \sum (n_{opt} - n_i)^2$$

where  $n_{opt}$  is the optimal BSO and  $\gamma$  is a normalization constant. In this work, we utilise the benzene ring, generally accepted as an archetype of aromatic organic systems, and investigate substitutions' effects on benzene derivatives' aromaticity using the AI(vib) index. All optimised structures and vibrational frequencies were obtained through density functional theory using the functionals  $\omega$ B97-X and B3LYP. Our results reveal that the spectroscopy-based descriptor is highly dependent on the level of the methodology in comparison to the geometry-based descriptor. We show, in particular, that the inclusion of the dispersion correction and diffuse atomic functions plays a central role in the accurate description of systems with rotation modes, such as the toluene molecule. Acknowledgements: CNPq and FAPESP. References: [1] *Tetrahedron Lett.* 1972, 13, 36, 3839-3842. [2] *J. Org. Chem.* 2016, 81, 20, 9669–9686.

---

## Relativistic three-boson bound states in the zero-range limit <sup>A6</sup>

Kamyar Mohseni, A. J. Chaves(1), D. R. da Costa(2), T.

Frederico(1), and M. R. Hadizadeh(3,4)

(1) ITA-Brazil, (2) UFC-Brazil, (3) CESTA-USA, (4) Ohio University-USA

The relativistic Faddeev integral equations are solved to calculate three-boson mass and wave function for ground and excited states. The inputs of relativistic Faddeev integral equations are the fully-off-shell boosted t-matrices, calculated from the boosted interactions by solving the relativistic Lippmann-Schwinger equation. We employ Kamada and Glöcke boosted potentials obtained directly from nonrelativistic short-range separable potentials by solving a quadratic integral equation using an iterative scheme. By adopting Yamaguchi and Gaussian potentials and driving them towards the zero-range limit, we show that relativistic masses and wave functions are model-independent, and the Thomas collapse is avoided, while the nonrelativistic limit keeps the Efimov effect. We compare our results for relativistic masses with Light-Front and Euclidean calculations.

---

## Estudo termoquímico e cinético da reação de silano com o átomo de hidrogênio

Filipe Gustavo Kano, Edson F. V. de Carvalho (1); Francisco B. C. Machado (2)

(1) Univ. Federal do Maranhão, (2) Instituto Tecnológico de Aeronáutica

O silano ( $SiH_4$ ) é amplamente utilizado como fonte de gás para muitos processos na indústria de semicondutores, materiais avançados e medicina. Sua cinética química tem recebido considerável atenção por ser um gás pirofórico a temperatura ambiente. Neste trabalho, utilizando métodos de estrutura eletrônica e da teoria do estado de transição, estudou-se a reação de abstração de hidrogênio do silano pelo radical hidrogênio. Ou seja, os estados estacionários (reagentes, estados de transição e produtos) foram caracterizados por métodos da Teoria do Funcional Densidade (DFT), usando os funcionais B3LYP e M06-2X e pelo método de função de onda MP2 com os conjuntos de funções base cc-pVDZ e cc-pVTZ. Os parâmetros energéticos foram refinados via cálculos pontuais pelo método CCSD(T) com as bases cc-pVTZ e cc-pVQZ, com extrapolação para o limite do conjunto base completo (CBS). Os parâmetros cinéticos foram calculados empregando a Teoria Variacional do Estado de Transição (TVET) com correções de tunelamento multidimensional. Os melhores resultados obtidos para a barreira energética e entalpia de formação, respectivamente iguais a 4,19 e -12,87 kcal/mol estão em excelente concordância com os valores experimentais, iguais a  $4,09 \pm 07$  e  $-12,9 \pm$  kcal/mol [1]. (Agradecimentos a FAPESP, CNPq e CAPES) Referências: [1] GOUMRI A.; YUAN W. -J.; DING L.; SHI Y.; MARSHALL P. Experimental and theoretical studies of the reaction of atomic hydrogen with silane. *Chemical Physics*, v. 177, p. 237-238, 1993.

---

## Estudo Termoquímico da Reação $\text{CH}_3\text{NH}_2 + \text{N}$ Relevante para a Atmosfera de Titã

A8

Ghuerda Lima Mayr, Spada, Rene  
Instituto Tecnológico de Aeronáutica - ITA

A Atmosfera de Titã (maior lua de saturno) é composta por várias espécies moleculares constituídas por átomos de Nitrogênio, Carbono e Hidrogênio que expostos a fontes energéticas como os raios solares podem produzir compostos orgânicos complexos como a metilamina. Krosnopolsky (Icarus 201 (2009), 226) simulou essa atmosfera considerando a fotodissociação da molécula de metilamina ( $\text{CH}_3\text{NH}_2$ ) em  $\text{CH}_3$  e  $\text{NH}_2$ , e também o processo reverso na presença de um terceiro corpo inerte. No entanto, outros caminhos para a decomposição dessa molécula não foram considerados. Recentemente, essa decomposição assistida por átomos de hidrogênio foi estudada por Kerkeni e Clary (Chem. Phys. Lett. 438 (2007), 1) e por Zhang et al. (J. Phys. Chem. A 107 (2005), 9112). Nesse contexto, abstrações de átomo de hidrogênio da molécula  $\text{CH}_3\text{NH}_2$  por nitrogênio atômico, tanto do grupo  $\text{CH}_3$  quanto do grupo  $\text{NH}_2$  estão sendo estudadas por métodos de estrutura eletrônica com o objetivo de adquirir propriedades termoquímicas relevantes. Essas propriedades estão sendo obtidas por cálculos de estrutura eletrônica baseados em função de onda e em teoria do funcional de densidade. Dessa forma serão apresentados nesse trabalho a energia necessária para que a reação ocorra e energia consumida nesse processo.

---

## Aromaticity, Stability and Radicaloid character in Periacenes modified by two rows of Borazine rings

A9

Luan Gabriel Fonseca dos Santos, B. C. Machado, Francisco (1)  
(1) ITA

Carbon-based nanomaterials comprise a fascinating new area with many practical applications, combining Materials Science, Chemistry, Physics and Biological Sciences. In particular, polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs), conjugated aromatic molecules composed of fused benzene rings, have aroused wide scientific interest due to their important role in the aforementioned fields. In particular, PAHs

are also considered graphene clipping models, especially in the case of larger PAHs, termed as nanographenes, graphene quantum dots (GQDs) and carbon nanodots. A possible alternative to study in detail the electronic properties of PAH molecules is the simplification of the problem utilizing surrogates, which still preserve the basic electronic characteristics of extended systems. However, extended systems, such as oligoacenes with more than five linear benzene rings, are characterized by having a singlet open shell wave function in the ground state or even presenting, in their ground state, a spin triplet configuration, showing that these systems endue an elevated radical nature. Searching for alternative compounds in which the problems associated with high reactivity are reduced, this study was carried out in modified PAHs via the replacement benzene rings by borazine. The binary hexagonal compound constituted only by borazine is known as Boron Nitride (H-BN. One of the main highlights is that this material (2D) has an almost ideal electrical insulation capacity, as opposed to graphene, which is an excellent conductor. This property guarantees the applicability in electronic devices, being used, for example, as transparent membranes, in the encapsulation of materials and as dielectric substrate. Other properties that stand out are the high thermal conductivity, low dielectric constant, good lubricating properties, high thermal stability, high resistance to corrosion and oxidation, non-toxicity and high resistance to chemical attack. These characteristics allow this material to be used as a coating in the aeronautical, aerospace, chemical, among others technological fields. Since H-BNs have a vertical gap that stabilizes around 6 eV and PAHs tend to zero eV, this work also performs the modification of PAHs (ma,nz-periacenes) in a systematic way, exchanging the PAHs top and bottom rows for borazine rings, in order to study how these variations can affect the structure in general. Those modifications were made in three different ways, being them: 1) rings having the Boron atom on the border, both on the top and bottom row; 2) rings having Nitrogen atom on the border, both on the top and bottom row; 3) rings having Boron atom on the border of one row and Nitrogen atom on the border of the other. The stability, aromaticity and the radicaloid character of the systems constituting with ma,nz rings were analyzed, where  $m = 5$  and  $7$  armchair rings and  $n = 5 - 7$  zigzag rings were studied.



The compounds consisting only of Carbon atoms (Periacenes), and the one with only Boron and Nitrogen (BN-Pericenes) were also characterized. For this purpose, restricted and unrestricted B3LYP and wb97xd functionals were used, which is based on the density functional theory, with 6-31G(d) basis set. The results were analyzed operating with some stability and aromaticity descriptors, such as the HOMA index (Harmonic Oscillator Model of Aromaticity), which is based on the molecular geometry, and the singlet-triplet (ST) energy gap. The radicaloid character were analyzed based on the FOD occupancy number (Fractional Occupation Number Weighted Density) – Nfod. These descriptors indicate the aromatic character of the system, its energetic stability and the occupation of the orbitals, indicating the open shell character. As the system grows, in the case of Periacenes, the values of the HOMA indices show that the aromaticity tends to decrease. The analysis of the results confirms that the radical character tends to increase, that is, there is a decrease in the ST gap, an increase in the number of unpaired electrons with the ground state characterized by a singlet open shell and therefore, the expansion of the chain causes an increase in instability. Calculations carried out using methods with multireference wave functions (MR-AQCC) for these same systems [1] lead to the same conclusions as the results obtained in this study. As affirmed above, the periacenes structures 5-4 to 5-7 and 7-3 to 7-7 exhibits a wave function with an open shell character, indicating the necessity to use multireference methodology to obtain accurate gaps and to describe the electronic structures. For the modified ones, in all cases, the stability increases as observed by the decrease in the number of unpaired electrons, and the increasing in the HOMA index and in the ST gap when compared with the periacenes pristine. For the larger systems, the wave function also has an open shell character, however, compared to the pristine ones, most of the studied modified structures present a closed shell character. It is important to emphasize that the most stable structures are those with the modification (3), and those with armchair 5 display ST gaps ranging from 2.5 – 1.0 eV (1.2 – 0.0 eV in periacenes), which indicate possible application as a semiconductor, since they could exhibit absorption capacity in the visible light range. These systems should also be tested for OLED and Singlet-Fission applications. In these directions, further studies will be carried out

to check if they meet to the necessary criteria [2,3]. (Acknowledge to FAPESP, CNPq and CAPES). [1] Plasser, F.; Pasalic, H.; Gerzabek, M. H.; Libisch, F.; Reiter, R.; Burgdorfer, J.; Muller, T.; Shepard, R.; Lischka, H. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2013, 52, 2581-2584 [2] Wong, M. Y., Zysman-Colman, E. (2017). Purely Organic Thermally Activated Delayed Fluorescence Materials for Organic Light-Emitting Diodes. *Advanced Materials*, 29(22), 1605444. doi:10.1002/adma.201605444 [3] Smith, M. B., Michl, J. (2010). Singlet Fission. *Chemical Reviews*, 110(11), 6891–6936. doi:10.1021/cr1002613

---

## Quantum Algorithms for Solving Problems in Orbital Mechanics

A10

Rodrigo Pires Ferreira, Chaves, AJC (1); Santos, WG (2).

(1) Group of Semiconductor Materials and Nanotechnology, ITA, (2) ITA Space Center

Quantum Computing represents a new approach to information processing. Based on specific characteristics of quantum systems (e.g., superposition), quantum computers can perform some simulations substantially faster than their classical counterparts. This research project focuses on solving the two-body problem of Orbital Mechanics via quantum algorithms. In particular, we are interested in simulating a satellite's orbit (with and without disturbances) using Variational Quantum Circuits (VQCs). Such an algorithm takes an initial arbitrary angle as a parameter of the quantum circuit and compares the circuit's output to the function that we want to obtain. We perform the comparison through a loss function, which tells us how accurate is our current output. We then update our input (angle) in order to minimize the loss function. After nearly 300 iterations, we have been able to achieve relative errors around  $10^{-7}$  using quantum simulators and the PennyLane framework.

---

# Valley-current filter in bilayer graphene based on Magnus Hall effect

A11

Sergio Levy Nobre dos Santos, (1) M. R. Andrade; (1) J. Milton Pereira Jr; (2) A. J. Chaves; (1) G. A. Farias; (1) D. R. da Costa

(1) Universidade Federal do Ceará, (2) Instituto Tecnológico da Aeronáutica

By electrically induced non-zero Berry curvature in bilayer graphene, we propose a valley-current filtering device based on the recently discovered Magnus Hall effect in mesoscopic systems under the time-reversal-symmetric condition. It corresponds to a quantum analog of the Magnus effect where wavepacket trajectories for carriers located at  $K$  and  $K'$  valleys are steered along the transverse direction oppositely by an anomalous velocity proportional to the Berry curvature. This linear-response Hall effect is a consequence of the interplay between the inversion symmetry breaking, due to a built-in perpendicular electric field, and the time-reversal symmetry invariance, e.g. no applied magnetic field is required, that in turn leads Berry curvature to obey the  $\Omega_K = -\Omega_{K'}$  symmetry and opposite Berry induced velocity contributions for the two inequivalent Dirac valleys. By solving the time-dependent Schrödinger equation for the bilayer graphene continuum Hamiltonian taking into account also diagonal interlayer hoppings, we calculate the time evolution of a Gaussian wavepacket propagating through such a system with a slow variation of the perpendicularly applied electrostatic potential and show: (i) that the additional shift along the transverse direction of the average position of electronic motion is proportional to the potential energy difference and the Berry curvature amplitude, as semiclassically expected; and (ii) which system parameters, such as the magnitude and shape of the applied potential and the injected wavepacket energy, optimize the valley polarization efficiency.

---

## Soil Mineralogy: Determination by X-Ray Diffraction with the Rietveld Method

Vagner Da Silva Dias, Pimentel Junior, Jorge Luiz (1); Turatti, Águeda Maria (2)

Universidade Federal do Rio Grande

X-Ray Diffraction (XRD) is a technique that can be used for the quantitative determination of crystalline phases in a solid. The use of this technique provides important information about the microstructure of the materials, such as the nature of the lattice parameters, size, perfection and orientation of the crystals, in addition to other characteristics of the sample to be analyzed. This method consists of emitting X-ray beams using the crystal lattice of the material under study to diffract them. When an X-ray beam is focused on a crystal, it interacts with the atoms present, giving rise to the phenomenon of diffraction. The XRD technique must satisfy the Bragg equation (Equation 1), which defines the relationship between the angle of the diffracted beam and the distance from the beam's origin.

$$n\lambda = 2d \sin \theta \quad (1)$$

In equation 1, “n” corresponds to an integer, “λ” to the wavelength of the incident X-rays, “d” to the interplanar distance and “θ” to the diffraction angle. When Bragg's law is not satisfied, that is, when the optical path difference is not an integer number of wavelengths, the waves are out of phase. In these cases, the maxima and minima of one wave appear displaced in relation to the maxima and minima of the other wave and thus the X-ray beams will not be observed. For XRD to happen, the difference between their optical paths must be an integer number of lengths. waveform, then there will be constructive superposition and an X-ray beam will be observed. The graph obtained with the diffraction pattern is called a diffractogram, whose variables are determined by the angle 2θ versus the intensity of the diffracted peaks. The heights of the peaks are proportional to the intensities of the diffraction effects obtained at 2θ angles and correspond to the diffraction of the incident beam by a certain set of crystal-line planes, which have the same interplanar distance. In conjunction with XRD, the Rietveld Method (RM) is used, in which it is possible

to determine the lattice parameters of a crystalline solid, in addition to the atomic positions, sample granulometry and to determine the quantification of the phases. And when applied to geosciences, it becomes essential for the mineralogical characterization of the crystalline constituents present in the different granulometric fractions of the soil and has the advantage of simplicity, speed and reliability of the results obtained. The MR adjusts a theoretical curve to the experimental diffractogram peaks found, minimizing the difference between the experimental point pattern and the calculated point pattern, by the least squares method, which aims to minimize the sum of squares of the differences between the calculated counts and those observed in the measured angular range, according to Equation 2.

$$S_y = \sum_i w_i (y_{obs} - y_{calc})^2 \quad (2)$$

Where  $w_i = \frac{1}{\sqrt{y_{obs}}}$ ,  $y_{obs}$  is the experimental point pattern and  $y_{calc}$  is the pattern of calculated points. In this way, the use of MR can correct the data found by the XRD, for example, the parameters of the crystal structure models, optical diffraction effects, instrumental factors and other characteristics of the sample, as desired and possible to be modeled. As a methodology of this work, the refinement of a sample collected from a mining tailings dam and a sediment sample from Rio das Velhas, both located in the Iron Quadrangle in Minas Gerais, was carried out. The characterization of the samples was carried out in the CEME-SUL laboratory located at the Federal University of Rio Grande by means of Scanning Electron Microscopy (SEM), XRD and RM. The samples were initially analyzed by SEM in two different ways: particles without Gold (Au) coating and with Au coating. The Au coated particles were coated with a thin gold film, obtained in a metallizer, model Denton Vacuum Desk V. The images obtained were of the following types: SEI (Secondary Electron Images) and BEC (Backscattered Electron Images). The SEM technique was used to obtain more details in the investigation of the mineralogical phases present, evaluation of the morphology of these phases and the chemical composition of the samples. XRD analyzes were performed using a Bruker D8 Advance X-ray diffractometer. The generated diffractograms were analyzed and their phases identified using the DIFFRAC EVA software. For the structural refinement of the samples, the Full-

prof Suite software was used, freely available by the authors, via the internet. For the execution of this software it was necessary to index the data of the counts observed in each position of the  $2\theta$  angle and data with the necessary information for the calculation and adjustment of the predicted counts. The results for the SEM in the morphological analysis of the particles of the samples with the magnifications of 60x, 200x and 500x, it was observed the existence of a particulate system composed by crystallites of varied sizes and formats. In the qualitative analysis of the samples with BEC, a contrast ratio was observed that indicates the presence of heavier chemical elements in the lighter crystallites and lighter in the darker crystallites. Through prior knowledge of the sample from mining and subsequent analysis via EDS, it can be seen that the crystallites represented by the lightest levels are iron oxides such as Goethite and Hematite and the darker minerals of quartz and clay such as kaolinite. In the XRD analysis the results for the tailings sample indicated the predominance of the quartz and hematite phase and with the minority phase the presence of goethite, kaolinite and magnetite. For the river sediment sample, the results indicated the predominance of quartz and muscovite and hematite and kaolinite phases and with the minority phase the presence of goethite. This work proposed to study the RM, seeking to know all the parameters that lead to the optimization for the application of this method, via the Fullprof Program, with the objective of refining samples of geological origin. During this work, we can see that the XRD technique with RM presents itself as an excellent tool for the characterization of the phases of minerals of geological origin.

---

Igor Leite Correia Lima, Andrey Chaves

Universidade Federal do Ceará

O Fósforo Negro (BP) é o alótropo mais estável do elemento fósforo. Foi amplamente estudado desde sua primeira síntese bem-sucedida em 1914. Mas, cem anos depois disso, no início de 2014, um grupo de pesquisadores conseguiu reintroduzir o material não como um bulk, mas como um filme fino de poucas camadas, em que camadas atômicas individuais são empilhadas juntas por interações de Van der Waals. Isso levou a um conjunto de novas propriedades deste material como um semicondutor bidimensional (2D). O BP de poucas camadas (2D BP) é anisotrópico no plano, apresenta características eletrônicas direcionalmente dependentes e é um semicondutor de gap direto com gap ajustável pelo número de camadas ou por um campo elétrico externo. O objetivo do presente trabalho é estudar os efeitos das novas propriedades eletrônicas do 2D BP em comparação com o bulk BP em transporte eletrônico em um sistema de barreira quântica dupla. Apresentaremos o desenvolvimento teórico necessário para modelar esse sistema e em seguida, apresentaremos um método de matriz de transferência para a solução do problema de tunelamento quântico ressonante. Como sabemos que o sistema apresentará o fenômeno de tunelamento quântico ressonante, podemos então usar a matriz de transferência para encontrar o coeficiente de transmissão tanto para o fósforo negro quanto para uma heteroestrutura de fosforeno. Além disso, estudaremos como as características eletrônicas do fosforeno, como band gap ajustável por campos e número de camadas e a sua anisotropia, podem ser usadas para ajustar o coeficiente de transmissão.

---

# AVALIAÇÃO DA ESTABILIDADE DE DERIVADOS DE ACENOS DISSUBSTITUÍDOS COM ÁTOMOS DE OXIGÊNIO

A14

Kássio Henrique Souza Silveira, Júlio, Cesar Verli Chagas, Francisco Bolivar Correto Machado

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo (IFSP) e Instituto Tecnológico de Aeronáutica

Os acenos e poliacenos são potenciais semicondutores orgânicos, identificados para servirem como material funcional para a nova geração de dispositivos fotovoltaicos e transistores de efeito de campo. Eles apresentam valores muito baixos do gap de energia HOMO-LUMO, o que resulta em uma mobilidade de carga bastante superior ao de outros compostos orgânicos [1]. Também, como consequência dos efeitos de confinamento quântico, as propriedades eletrônicas dos acenos tais como gap óptico, potencial de ionização e do gap singleto-triplete podem, em princípio, serem moduladas com o aumento do número de anéis de benzeno fundidos [2,3]. Consequentemente, os acenos maiores são dificilmente acessíveis sinteticamente devido à sua alta propensão em realizar reações de dimerização ou foto-oxidativas. Até recentemente, o hexaceno era o maior aceno bem caracterizado experimentalmente [4]. Ou seja, os acenos maiores têm uma alta instabilidade química que está associada a um efeito de polarização de spins ao longo da borda zig-zag, com ordenamento antiferromagnético ( $S=0$ ). Em outras palavras, o estado fundamental destes sistemas apresenta configuração de spin singleto com camada aberta ("open-shell"), conferindo a eles um alto caráter radicalar [5]. Deste modo, é de extrema importância desenvolver procedimentos que busque estabilizar estes sistemas ou encontrar compostos alternativos que não mostrem esses problemas de instabilidade. Entre outras, uma estratégia para atingir este objetivo consiste em substituir átomos doadores e/ou aceptores de elétrons em suas estruturas. Neste sentido, este estudo consistiu em verificar os efeitos da inserção de dois átomos de oxigênio (um aceitador de elétrons) em substituição a dois átomos de hidrogênio em várias posições nas moléculas de benzeno, naftaleno e antraceno. Um total de vinte e uma estruturas foram caracterizadas e analisadas. A análise foi voltada para compreender a relação entre a posição da substituição e a aromaticidade do sistema, sua estabilidade e o caráter



radicalar. Essas estruturas foram realizadas a partir de cálculos utilizando métodos da teoria do funcional da densidade, em particular, usando o funcional híbrido B3LYP junto do conjunto de funções base def2-TZVP. Com as geometrias otimizadas obtidas a partir destes cálculos, pode-se examinar a aromaticidade e a estabilidade dessas estruturas usando o descritor HOMA (Harmonic Oscillator Model of Aromaticity), que é um índice baseado no critério geométrico. Para uma análise mais quantitativa da estabilidade, usou-se os gaps de energia HOMO-LUMO (HM) e singleto-triplete (ST). A partir dessas análises, foi possível verificar que houve uma maior estabilidade nos sistemas quando as substituições são feitas em um mesmo anel aromático. Também, no caso do antraceno, embora os átomos substituintes sejam aceptores de elétrons, quando colocados no anel central na posição para, verificou-se uma maior estabilidade que no sistema pristino. Estes resultados motivam análises mais quantitativas baseadas em métodos multiconfiguracionais. (Agradecimentos: FAPESP e CNPq). Referências Bibliográficas: [1] BENDIKOV M, Duong HM, Starkey K, Houk KN, Carter EA, Wudl F. Oligoacenes: theoretical prediction of open-shell singlet diradical ground states. *J Am Chem Soc.* 2004 Jun 23;126(24):7416-7. doi: 10.1021/ja048919w. Erratum in: *J Am Chem Soc.* 2004 Aug 25;126(33):10493. PMID: 15198569. [2] ANTHONY, John E. The larger acenes: versatile organic semiconductors. *Angewandte Chemie International Edition*, v. 47, n. 3, p. 452-483, 2008. [3] HUMMER, K. and Draxl, C. A., "Electronic properties of oligoacenes from first principles", 2005, *Phys. Rev. B*, Vol.72, No. 20, 205205. [4] WATANABE, M., Chang, Y. J., Liu, S. W., Chao, T. H., Goto, K., Islam, M. M., Yuan, C. H., Tao, Y. T., Shinmyozu, T., and Chow, T. J., "The synthesis, crystal structure and charge-transport properties of hexacene", 2012, *Nat. Chem.*, Vol.4, No. 7, 574-578. [5] TÖENSHOFF, C. and Bettinger, H. F., 2010 "Photogeneration of Octacene and Nonacene", *Angew. Chem. Int. Ed*, Vol.49, No. 24, 4125-4128.

---

# An efficient tight-binding approach for the investigation of twisted bilayers of graphene and molybdenum disulfide near the magic angle

A15

Victor Gabriel Morele Duarte,

Caleiro, Lucas (1); Chaves, André (1); Costa, Diego (2); Guilhon, Ivan (1); Marques, Marcelo (1); Gomes, Thiago (1); Teles, Lara (1)

The measurement of superconductivity in magic-angle bilayer graphene has reinvigorated the interest in atomically thin (2D) materials. The novel physics that emerges from twisting the layers of stacked 2D materials is broad and has a lot to be investigated. In this sense, a comprehensive theory of 2D twisted materials is desirable to interpret ongoing and future experiments. In the case of bilayer graphene, the twist originates flat bands that contribute to a plethora of exotic states due to the predominance of electron-electron interactions over kinetic energy. Furthermore, in semiconductor transition metal dichalcogenides, the twist originates a Moiré potential that confines excitons on the regions with AA stacking, similar to a periodic array of quantum dots. For small twist angles, these Moiré systems may have thousands of atoms on a single unit cell. The use of first-principles calculations alone is hence limited due to its large computational complexity, and more efficient approaches become necessary. We developed a software tool that constructs and diagonalizes large tight-binding Hamiltonians of twisted bilayers of graphene and MoS<sub>2</sub> in the reciprocal space. The diagonalization process is exact in the sense that it does not require the use of approximation techniques to become computationally feasible. The inputs are the twist angle, the hopping parameters, and the highest order of included nearest neighbors. In the case of MoS<sub>2</sub> interlayer coupling, the hoppings were extracted by fitting the bands of first-principles calculations. Our model for twisted bilayer graphene correctly describes the band flattening as the twist angle decreases. Moreover, the low energy bands of bilayer MoS<sub>2</sub> have been adequately reproduced around the K point using a basis that only includes three metallic d orbitals. Therefore, our results lead to a sufficiently precise yet relatively simple model for MoS<sub>2</sub> and analogous transition metal dichalcogenides, with some advantages: (i) it is effective, with a low computational cost, e.g., for a unit cell of 11164 atoms, the calculation took no more than 1.5 hours on a modern i5 processor with 8

GB of RAM; (ii) the computed wave functions can be used in further studies; and (iii) our approach can be extended with a similar computational cost to treat unit cells with vacancies, defects, and geometric deformation/relaxation.

---

## **Structural and Electronic Properties of Interfaces Between TiO<sub>2</sub> and Perovskites: A First-Principles Study**

A16

Vinicius Gabriel Gomes de Albuquerque, Guilhon, Ivan (1); Teles, Lara K. (1); Marques, Marcelo (1)

(1) Instituto Tecnológico de Aeronáutica

Perovskite solar cells (PSC) are a good promise to become the prevalent technology in the solar energy scenario, its electronic properties and relatively easy processing methods become the PSCs a potential low-cost and high-efficiency technology. Since the presence of many layers in the device and its low dimensions, the interfaces between these layers play a crucial role in stability and efficiency issues. Hence, the knowledge of the chemical and physical processes at the interface, such as the bonding of the atoms at the interface region, charge transfer and interfacial recombination mechanisms, is necessary to create stable and efficient devices. This work aims to study, by first-principles calculations, the structural and electronic properties of interfaces between inorganic metal-halide perovskites and TiO<sub>2</sub>, the most widely material used as electron transport layer in the PSC, obtained by the explicitly constructed heterostructure. We use the Density Functional Theory (DFT) and run all the calculations by solving the Kohn-Sham equations with the projector-augmented-wave (PAW), as implemented by VASP code. DFT can accurately describe structural properties for semiconductors, but it underestimates severely the bandgap of the materials. To overcome this limitation, we implement the quasiparticle correction DFT-1/2, which has the same computational cost as standard DFT and avoid the utilization of others methods more computationally expensive, such as GW or HSE06. Besides, we also incorporate the relativistic spin-orbit coupling (SOC) effect within the calculations. To achieve the interface properties, it is necessary to know initially the bulk properties of each compound for comparison with the interface to obtain strain and band offsets values, later,

there are two systematic approaches to obtaining the band offsets: (i) compare the calculated absolute band edge values for each compound separately or (ii) construct the explicit heterostructure and find the properties from it. The former is the lowest-cost, however, it might neglect important interfacial effects, which are unraveled by the latter approach. Despite providing more computational cost, this work uses the explicit heterostructure for accurately find the interfacial properties of TiO<sub>2</sub> and perovskites. So far, this work obtained the bulk properties of TiO<sub>2</sub>, CsPbI<sub>3</sub> and CsSnI<sub>3</sub>. The lattice parameter of the three compounds are close to experimental data. All the band-gaps were found both with and without the corrections for comparison of its influence. With this first step concluded, we collected data for the interface construction parameters and started running convergence calculations.

---

# Grupo 2 - Dinamica não linear e Sistemas complexos (DNC)

## NON-UNIFORM MAGNETIC FIELD FOR THE QUASI-STATIC APPROXIMATION ON PIPE FLOW WITH THE LATTICE BOLTZMANN METHOD

D1

Bruno Magacho da Silva, Saraiva, Hugo (1); Moriconi, Luca (1);  
Loureiro Juliana (2)

(1) Instituto de Física, UFRJ, (2) Programa de Engenharia Mecânica, UFRJ

We present a numerical scheme to solve the coupled system of magnetohydrodynamic (MHD) equations

$$\partial_t u = -\nabla(p/\rho) - (u \cdot \nabla)u + \nu \nabla^2 u + \frac{(\nabla \times B)B}{\mu\rho}$$

$$\partial_t B = -(u \cdot \nabla)B + (B \cdot \nabla)u + \eta \nabla^2 B$$

in a quasi-static regime (low magnetic Reynolds numbers) along the lines of the lattice Boltzmann method (LBM). The LBM, which is a mesoscopic model to simulate hydrodynamic phenomena from space-time discretized Boltzmann equations, has attracted considerable interest in the recent literature. It is an explicit method, alternative to other well-established approaches like direct numerical or large-eddy simulations, which offers great simplicity in the implementation of general boundary conditions in complex geometries, non-trivial body forces (as the Lorentz force in MHD), and code parallelization. In the last decade, LBM applications have been devised for the simulation of the magnetic induction equation, a core aspect of MHD equations, essentially based on the simplest collision model, the single relaxation time (SRT) model. Although the use of SRT in MHD is found in a number of problems that range from MHD turbulence to nuclear fusion, there is plenty of room for relevant improvements, such as the introduction of better collision models or better boundary condition treatments. This motivates our work, where we introduce the multi relaxation time technique for the solution of the magnetic induction equation, besides a boundary condition method which allows us to deal with Boltzmann populations on non-Cartesian boundaries. We furthermore investigate, under the light of the quasi-static approximation, open issues related to the description of transient flow regimes in

MHD systems. We benchmark and illustrate our numerical framework with simulations of MHD pipe flows under a variety of external magnetic field configurations.

---

D2 **Origin of Multifractality in Solar Wind Turbulence: The Role of Current Sheets**

Leonardo Fabricio Gomes Batista, Tiago F. P. GOMES, Erico L. REMPEL, Silvio GAMA

Instituto Tecnológico de Aeronáutica, Universidade do Porto

In this work, we investigate the effect of current sheets in the solar wind turbulence through the multifractal perspective. By using the multifractal detrended fluctuation analysis (MFDFA) method together with the volatility of the time series, two solar wind magnetic field time series are investigated, the first one with current sheets and the second one without current sheets. As expected, a stronger level of multifractality is found in the volatility of the series containing currents sheets when compared to the second one. To know the origin of the multifractal behavior, the Surrogate method is applied to all time series. The results for the magnetic field time series reveal a major contribution from a heavy-tail distribution to the multifractality of the series with currents sheets but a bigger influence of long-range correlations for the series without current sheets.

---

D3 **Lagrangian Descriptors Applied to Astrodynamics - Restricted Three-Body Problem**

Luiz Eduardo Sivieri

ITA

The main objective of this work is to analyze Lagrangian Coherent Structures detection tools, seeking to identify the advantages and disadvantages of each of these tools applied to the dynamical model of the Planar Circular Restricted Three-Body Problem. Generally, in the literature, the phase space of the three-body problem is studied by means of Poincaré sections and escape basins. We will compare these results with those obtained by two Lagrangian descriptors. The first

of these is Finite-Time Lyapunov Exponent (FTLE) field, a tool that has already been used in this context in the literature. The second Lagrangian descriptor is the arc-length using the M-Function, or its variant, the  $\hat{M}$ -Function. The investigation was done for the time evolution of the Earth-Moon system with different energy levels, which enable natural transport channels between regions in phase space in the context of space mission. In our comparison, the  $M(\hat{M})$ -Function proved to be better suited than FTLE in this task.

---

## Grupo 3 - Ensino (E)

### E1 **Construção e comparação de modelos de microscópios de baixo custo para o ensino de Óptica**

Ana Beatriz Monteiro dos Santos, Gisele Bosso de Freitas

Universidade Estadual da Região Tocantina do Maranhão

De acordo com a Base Nacional Comum Curricular (BNCC) é esperado que os alunos possam desenvolver, durante sua formação básica de aprendizagem, habilidades de associar os conhecimentos adquiridos em sala de aula ao seu cotidiano (BRASIL, 2018). Nesse sentido, é necessário apresentar os temas e conceitos que fazem parte do currículo escolar de forma contextualizada e prática. A Óptica é o ramo da Física que está associado ao estudo da natureza e propagação da luz (YOUNG; FREEDMAN, 2016). Na educação básica, os estudantes têm em seu currículo o estudo da óptica geométrica, no qual são estudados os fenômenos luminosos por meio da geometria (YAMAMOTO; FUKU, 2016). Com esse tema aprende-se sobre o funcionamento lentes, inclusive sua associação, que gera instrumentos ópticos como o telescópio e o microscópio. Este, também conhecido como microscópio composto, porque apresenta a combinação duas ou mais lentes, conectadas por um cilindro, a lente pela qual se olha, chamada de ocular e a lente que fica mais próxima ao objeto, chamada de objetiva. Este trabalho tem como objetivo construir diferentes modelos de microscópios feitos com materiais de baixo custo, analisar as imagens obtidas através deles e propor atividades práticas para a sala de aula. Comparando os modelos de microscópios caseiros, que podem ser utilizados na prática em aulas que tenham como temas lentes e instrumentos ópticos, fomentamos a contextualização das teorias ensinadas, trazendo metodologias que despertam o interesse do educando para a aprendizagem de Física (SOGA et al, 2017). Referências: BRASIL. Ministério da educação: Base Nacional Comum Curricular. 2018. SOGA, D. et al. Um microscópio caseiro simplificado. Revista Brasileira de Ensino de Física [online], SciELO Brasil, v. 39, 2017. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/rbef/a/PvPcjvwW8JGngVwmvDQStCn/?format=pdf&lang=pt>. Acesso em: 02 jun. 2022. YAMAMOTO, K.; FUKU, L. F. Física para o ensino médio: terminologia, óptica, ondulatória. 4 ed. São Paulo: Saraiva, 2016. YOUNG,



H. D.; FREEDMAN, R. A. Física IV: ótica e física moderna. 14 ed.  
São Paulo: Pearson, 2016.

---

## Grupo 4 - Nuclear (N)

### N1 **Density dependent van der Waals model with short range correlation**

Everson Henrique Rodrigues,<sup>(1)</sup> Odilon Lourenço, <sup>(2)</sup> Mariana Dutra  
(1,2) Instituto Tecnológico de Aeronáutica

The van der Waals (vdW) model was originally proposed to describe real gases. Recently it was modified in order to be able to describe quantum systems such as asymmetric nuclear matter. It takes into account the interaction between particles (nucleons) through an excluded volume mechanism, representing the nuclear repulsion, and through a term that incorporates the attractive part of the nucleon-nucleon interaction. Both of them are regulated by two constant parameters. A possible variation of this structure is the density dependent van der Waals (DD-vdW) model, in which the constant parameters become density dependent. This version of the vdW model reproduces the values of some bulk parameters, such as the saturation density, binding energy and incompressibility. This last quantity is not reproduced by the original vdW model. Another issue solved by the DD-vdW model is the capability of reaching the high density regime, which is not possible if the vdW model is applied. This feature becomes the DD-vdW model also able to describe astrophysical systems, such as compact neutron stars. In this work we implement the short-range correlations (SRC) in the structure of the DD-vdW model and apply this new version to the description of neutron stars. The short-range correlation is an effect that generates correlated nucleon pairs (mostly neutron-proton pairs) with a relatively high momentum. It has been observed in many different reactions such as neutron and electron scattering, pickup and other ones. We show that the inclusion of this phenomenology in the DD-vdW model increases the density region attained by the model, still satisfying the causality condition. It is also shown that the DD-vdW-SRC model can also fit recent observational data from neutron stars.

---

## $\Upsilon$ and $\eta_b$ nuclear bound states

N2

Guilherme Novais Zeminiani, J.J. Cobos-Martinez, K. Tsushima  
Universidade de Sonora, Universidade Cidade de São Paulo

$\Upsilon$  and  $\eta_b$  nuclear bound state energies are calculated for various nuclei neglecting any possible effects of the widths. Essential input for the calculations, namely the medium-modified  $B$  and  $B^*$  meson masses, as well as the density distributions in nuclei, are calculated within the quark-meson coupling (QMC) model. The attractive potentials for the  $\Upsilon$  and  $\eta_b$  mesons in nuclei are calculated from the mass shifts of these mesons in nuclear matter in the local density approximation. These potentials originate from the in-medium enhanced  $B\bar{B}$  and  $BB^*$  loops in their respective self energy. After an extensive analysis we conclude that our results suggest that the  $\Upsilon$  and  $\eta_b$  mesons should form bound states with all the nuclei considered.

---

## FORMULAÇÃO DE INTEGRAL DE CAMINHO NA MECÂNICA QUÂNTICA

N3

Anderson Francisco Coelho  
ITA

No início do século XX, o universo da física aspirava a uma teoria unificadora. Diversas foram as tentativas de descrever a física do universo. Essa questão fora tentada ser solucionada por diversos físicos ao redor do mundo Einstein, Dirac, Newton, Faraday, Maxwell entre outros buscaram a interpretação do mundo físico. Podemos salientar que duas vertentes eram vistas como antagônicas: a clássica e a quântica. Dirac em suas obras havia tentado relacionar a mecânica quântica com a ação clássica, porém, não deixara claro como essa relação era feita. Sua ideia era tão brilhante que despertou a curiosidade um físico norte-americano, chamado Richard Phillips Feynman, afinal de contas relacionar grandezas quântica e clássicas era algo visto como improvável de se acontecer. Foi baseado na ideia precursora de Dirac, que no ano de 1948, que Feynman propôs a ideia de uma nova formulação da mecânica quântica que é diferente da usual. Que é conhecida como formulação de integrais de caminho, ou integrais de trajetórias ou simplesmente, formulação de Feynman. Tal método é

eficiente em várias áreas da física e, particularmente, em teorias de calibre. A formulação da mecânica quântica em termos das integrais de caminho é uma ideia que expande o conhecimento da ação da mecânica clássica para uma teoria quântica. Diferentemente do que se espera no caso clássico, sua fundamentação se dá na troca da noção de uma única trajetória clássica, por uma soma ou integral funcional levando em conta infinitas trajetórias possíveis.

---

N4

## **Cordas cósmicas: Uma solução numérica**

Pablo de Deus Silva

ITA

Em 1946, o físico Russo George Gamow propôs que o surgimento do universo veio de uma quente e densa sopa de partículas que vem se expandindo até os dias atuais. Utilizando relatividade geral, física nuclear e termodinâmica, Gamow e seus colaboradores criaram um modelo no qual a sopa de partículas era formada por prótons, nêutrons, elétrons e fótons, esse modelo cosmológico foi posteriormente chamado de Big Bang. O modelo do Big Bang descreve bem a evolução do universo quente, porém falha em algumas questões, podemos destacar o problema da planicidade, formação estrutural e assimetria de bárions. Uma forma de solucionar esses problemas do modelo é através das transições de fases que possam ter ocorrido. Se uma transição de fase aconteceu no início do universo, isso pode ter deixado alguns sinais. Uma delas é a geração de energia na configuração do campo, conhecida como um defeito topológico. Esses defeitos são determinados pela quebra de certas simetrias e podem ser benéficas para a explicação de fenômenos cosmológicos. Com a quebra da simetria nos primórdios do universo, um defeito topológico que pode ter aparecido durante a transição de fase, são as cordas cósmicas. Objetos microscópicos que se expandem com o universo e se tornam grandes de forma que podem ser estudados com uma aproximação clássica com a escala de quebra de simetria de  $\eta \sim 10^{24} GeV$ . Embora não tenha evidências experimentais da existência, esse tipo de defeito topológico é capaz de explicar diversos fenômenos astrofísicos, entre eles a rajada de raios gama. A dinâmica de uma corda cósmica em um Universo em expansão, homogêneo e isotrópico não apresenta uma solução analítica,

então soluções computacionais são necessárias. O trabalho apresenta uma solução numérica que parte da necessidade da introdução de duas coordenadas,  $\alpha$  e  $\beta$ , gerando um sistema de equações diferenciais parciais de primeira ordem. Considerando um universo plano, ocupado por radiação e seguindo as condições que preservam a simetria espiral e periódica, a equação é discretizada pelo método de diferenças finitas e conseguimos chegar em um conjunto de equações discretas que geram a evolução temporal da corda por meio do método de leapfrog. Para os cálculos foi utilizado a linguagem C em conjunto com técnicas de computação em paralelo para maior eficiência na execução do código.

---

## Grupo 5 - Plasma (P)

### P1 **Effect of the plasma dosage on reactive oxygen and nitrogen species generated on plasma-activated water**

William Chiappim Junior, Neto, Benedito (1); Gonçalves, Luan (1); Shiotani, Michaela (1); Miranda, Felipe (1); Pessoa, Rodrigo (1))

(1) Instituto Tecnológico de Aeronáutica

In the last decade, plasma-activated liquids (PAL) or, more specifically, plasma-activated water (PAW) has gained attention from the medical and agricultural community. These PAWs are generated by combining a cold plasma discharge applied to millimeters of distance or submerged in water. Besides being inexpensive, PAW represents a green alternative to chemicals conventionally used as antibacterial, antiseptic, or pesticide agents. The antibacterial and antiseptic early mentioned effects result from the complex physical and chemical processes that occur in the plasma/water interaction, which are responsible for generating a rich source of reactive oxygen and nitrogen species (RONS), which can be classified as short- and long-lived species. In agriculture, the RONS present in PAW plays a strong potential in environmental remediation, as seed germination inducer, as surrogate bactericidal/fungicidal agent, combined with organic waste, can be used as a green fertilizer, and aiding the rapid growth of plants. In contrast, in medicine, RONS have the potential to induce oxidative stress to the cells, being used as powerful disinfectants and antibiotics, in addition to application in tumors and cancer cells, wound healing, in the root of the canal for disinfection (dentistry). It's worth highlighting that between agriculture and medicine is food technology that can benefit from the unique properties of PAW, thus being able to practice clean and antimicrobial washing of fresh food products. However, there is no detailed study on the accumulation of plasma dosage in activated water, nor how this accumulation can interfere with the physico-chemical properties and generation of reactive species. In this context, the present work studies the following properties, pH, oxidation-reduction potential, and types of reactive species generated as a function of plasma dosage accumulated during activation.

---

## Study of the antibacterial efficacy of plasma-activated water on *Escherichia coli*

P2

William Chiappim Junior, Neto, Benedito (1); Gonçalves, Luan (1); Shiotani, Michaela (1); Sampaio, Aline (2); Koga-Ito, Cristiane (2); Pessoa, Rodrigo (1))

(1) Departamento d(1) Instituto Tecnológico de Aeronáutica, (2) Unesp Campus São José dos Campos

Gram-negative bacteria *Escherichia coli* is a pathogen known to cause serious public health problems worldwide, which can lead to death. Studies show plasma-activated water (PAW) as a promising antimicrobial tool in different microorganisms and suggest a relationship between the microbicidal action and the properties of plasma-activated water. This study explores the antibacterial effect over time and the physicochemical properties of plasma-activated water prepared by a non-thermal plasma jet using the gliding arc as a plasma reactor. PAW was prepared by indirect application through a plasma system with a gliding arc reactor with compressed air (Volume: 40 mL; Distance: 5 mm; Flow: 5 L/min; Time 60 min). The antibacterial efficacy of PAW against *E. coli* was evaluated by exposure time (1 min – 1 hour). A 1 mL aliquot of the bacterial suspension ( $10^6$ CFU/mL) prepared in saline solution was exposed to 4 mL of PAW solution, followed by serial dilution and seeding on a BHI agar plate, with incubation at 37 C for 24 hours. The bacterial reduction was analyzed by counting colonies per milliliter (CFU/mL). As a control for the acidification effect, deionized distilled water with pH modified by nitric acid was analyzed. Results were obtained in 4 replicates in two independent events. The pH of DI and PADW water was measured with a pH meter. The concentration of reactive oxygen and nitrogen species (RONS) present in DI and PADW water was measured using a UV-vis spectrophotometer (190-1200 nm), using the DI water curve as a baseline.

---

## Nebulized plasma-activated water to control microbial species in tubes and tracheal appliances used in the respiratory tract

P3

William Chiappim Junior, Neto, Benedito (1); Gonçalves, Luan (1);  
Miranda, Felipe (1); Shiotani, Michaela (1); Sampaio, Aline (2);  
Koga-Ito, Cristiane (2); Pessoa, Rodrigo (1))

1) Instituto Tecnológico de Aeronáutica, (2) Unesp Campus São José dos Campos

Despite plasma-activated water - PAW's tremendous biotechnological appeal due to its potent antimicrobial effects and wide potential application in clinical practice, some challenges need to be overcome. Long-term intubation is a recent example triggered by the coronavirus pandemic (COVID-19), which created new challenges in treating infections caused by long-term intubations induced by bacterial colonization in tubes coupled to the airways. The plasma-activated liquid has a wide effect of inactivating bacterial and fungal species and is a potential candidate to control the respiratory tract microbiota. There is a clinical impossibility of using liquid water in the respiratory tract, which leads to extraction and death by asphyxiation. On the contrary, nebulized plasma-activated water (NPAW) mist carried by tube and inhaled is a viable possibility and requires investigation for its applications in airway tracheal appliance, such as the silicone T-tube. In this study, the test with a mist of PAW was performed with the aid of a mechanical nebulizer, and its pH and oxidation-reduction potential (ORP) were measured in tubes of different lengths ranging from 0.1 to 3 m. Finally, PAW was nebulized on *Staphylococcus aureus*, *Escherichia coli*, and *Candida albicans* for 15 min to assess its antimicrobial action. For better understanding, the tests with NPAW were compared with the positive control (nebulization of H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> at 3%) and negative control (nebulization with water).

---



## **Development and study of a plasma system generated by dielectric barrier discharge (DBD) for continuous activation of liquids**

P4

FELIPE DE SOUZA MIRANDA, Gilberto Petraconi (2); Rodrigo Sávio Pessoa(2); Cristiane Yumi Koga-Ito (1)

Universidade Estadual Paulista - UNESP (1), Instituto Tecnológico de Aeronáutica - ITA (2)

The antimicrobial, anti-inflammatory, and tissue repair-inducing actions promoted by reactive species generated by the plasma and its low toxicity are favorable characteristics that can be applied to treat diseases in the dental area. In this context, this work aims to investigate the applications of cold atmospheric pressure plasma (LTAPP) in Dentistry. The general objective is to develop a system for activating nebulized liquids using plasma generated from a dielectric barrier discharge (DBD) for application in a single step, with no need to activate the liquid prior to the treatment process. As specific objectives, it is intended to establish the physical operating parameters of the DBD system. Chemical characterizations of the plasma will be performed to identify the species generated to assess the effectiveness of the process in activating nebulized liquids. The activated liquid will be collected to determine the effectiveness of the activated liquid in vitro and in vivo antimicrobial tests on biofilms related to oral diseases. Subsequently, these parameters will be evaluated for cytotoxicity and genotoxicity, adopting the most appropriate cell line for each case. The effective (maximum antimicrobial effect) and safe (less toxicity) protocols will be applied in in vivo or ex vivo models for validation. In short, after the validation tests of the system and effectiveness of the method, it is intended to develop a robust and compact prototype that is easy to operate and to be used in dental clinics

---

# EFFECTS OF REACTION SET ON COLLISIONAL ENERGY: GLOBAL MODEL STUDY FOR ARGON ICP DISCHARGE

P5

Júlia Karnopp, Magaldi, Bernardo Vieira (2); Sagás, Julio César (3);  
Pessoa, Rodrigo Sávio (1)  
(1) ITA, (2) INPE, (3) UDESC

The interest in plasma modeling has been increased in the last few decades [1]. Modeling and simulations of plasma are fundamental activities of research to complement and give further information of plasma chemistry and their dependence on process parameters. The global model is a good option for this goal. It is a zero-dimensional model compound by balance equations set of species densities and energy [1]. With low computational cost, this model gives information about plasma chemistry as reactions and diffusion rates, species densities, electron temperature, and their dependence on process parameters. In the literature, there are several models for different gas discharges, and the most common models are developed for argon-based plasmas and inductively coupled plasma (ICP) reactors. Differences on chosen species, reactions, rate constants and/or cross sections affect the plasma chemistry and its parameters such as electron temperature and density. This can be observed primarily in the collisional energy per pair electron ion created that corresponds to the energy lost by electron between two consecutive ionizations. Therefore, it is interesting to investigate the most appropriate reaction set for a given plasma chemistry. In this work, the argon ICP global model is revisited to explore the effect of excited species on collisional energy through the study of different approaches to model equations. For this purpose, five cases were simulated for argon ICP discharge. In each case, the species and reactions included in particle and energy balance equations were modified. Additionally, the collisional energy per pair electron ion created was calculated in two different ways, considering only the single-step ionization, i.e., only the ionization from Ar ground state, and including multistep ionization, the ionization of excited species,  $Ar^m$ ,  $Ar^r$ ,  $Ar^p$ [2]. Argon ion,  $Ar^+$  and electrons are considered in all cases. The simulations were made as function of pressure and absorbed power. Simulations were made varying gas pressure (0.5–100 mTorr) and absorbed power (150 W and 300 W). The model results

were compared with experimental measures from literature [3]. The results show that collisional energy loss per pair electron ion created is much more sensitive to modifications in the balance equations than the electron temperature [4]. The electron temperature is practically equal for all investigated cases. In turn, the collisional energy had the same dependence on pressure, absorbed power, and electron temperature for the five cases, but the magnitude was different. The multistep ionization reduces the collisional energy loss in all investigated reaction sets and the inclusion of heavy species reactions has negligible influence. The plasma parameters obtained, such as total energy loss and electron temperature, were compared with experimental results from the literature. The simulated cases that have more excited species and reactions in the energy balance are in better agreement with the experimental measurements. References: [1]- Alves, L.L.; et al. Foundations of modelling of nonequilibrium low- temperature. Plasma Sources Sci. Technol. 2018, 27, 023002. [2]- Lee, M.H.; Chung, C.W. Effect of multistep ionizations on the electron temperature in an argon inductively coupled plasma. Appl. Phys. Lett. 2005, 87, 131502. [3]- Hong, Y.H.H.; et al. Experimental investigation on optimal plasma generation in inductively coupled plasma. Phys. Plasmas 2021, 28, 053507. [4]- Karnopp, J. et al. The Effect of Excited Species on the Collisional Energy of Argon Inductively Coupled Plasmas: A Global Model Study. Plasma 2022, 5(1), 30-43.

---

## **ATOMIC LAYER DEPOSITON AND ANNEALING BY PLASMA JET FOR IMPROVE THE CARBON FIBER FABRICS**

P6

Vanessa M. Dias<sup>1</sup>, William Chiappim<sup>1,2\*</sup>, Felipe. S. Miranda<sup>1</sup>,  
André Petraconi<sup>1</sup>, Nierlly K. A. M. Galvão<sup>1</sup>, João P.B. Machado<sup>3</sup>,  
Joaquim P. Leitão<sup>2</sup>, Argem

<sup>1</sup> Laboratório de Plasmas e Processos, Instituto Tecnológico de Aeronáutica (ITA), São José dos Campos, SP, 12228-900, Brazil. <sup>2</sup> i3N, Departamento de F

Titanium dioxide (TiO<sub>2</sub>) coatings prepared by thermal atomic layer deposition (ALD) were applied to carbon fiber fabrics (CFFs) in order to increase their thermal and oxidation resistance at gaseous environment. Uniform and thin TiO<sub>2</sub> coatings were obtained using TiCl<sub>4</sub>

and H<sub>2</sub>O precursors at 100 °C. The coating thickness was controlled by the number of reaction cycles (500, 1500 and 3000 cycles). The oxidation resistance uncoated- and TiO<sub>2</sub>-coated CFFs was tested by exposing them to a thermal plasma torch operating with nitrogen and water vapor for 2 min to investigate the post-deposition of TiO<sub>2</sub>-coated CFFs annealing. Results showed that the instantaneous growth per cycle (GPC) of the ALD TiO<sub>2</sub> coatings was 0.067 nm/cycle, they are amorphous and uniformly cover the carbon fibers, in addition to following the substrate material roughness and after the annealing with thermal plasma was observed the crystallinity Anatase phase. Thermalgravimetric analyzes showed a considerable decrease in the mass loss at temperatures ranging from 600 to 900°C when increase the TiO<sub>2</sub> coating thickness, demonstrating an improvement of the thermal resistance, where the mass loss of uncoated CFFs reaches more than 12%. In the post-deposition tests was evidenced that the thicker TiO<sub>2</sub>-coated CFFs were able to withstand the thermal plasma exposure.

---

P7

## **STUDY OF WO<sub>3</sub> FILMS AIMING THE APPLICATION IN GAS RESISTIVE SENSORS**

Andrea Alves Boaventura, Fazenda, G. (1); Leal, R.S. (1); da Silva Sobrinho, A.S. (2);Pereira, A.J.(2);

(1) Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo; (2) ITA

One of the main problems that plague modern society lies in the uncontrolled emission of toxic gases into the environment. Thus, the development of resistive gas sensor technology, aiming to make them more efficient and cheaper, has been the focus of several research groups and the industry in recent years. The development of this technology is essential for, among other applications, monitoring air quality. Among the most promising materials to be applied in this type of sensor, tungsten oxide (WO<sub>3</sub>) stands out for having several interesting properties such as excellent selectivity, fast response, easy construction, flexibility and stable physicochemical properties. Although we can find several works involving WO<sub>3</sub> applied to resistive gas sensors, more studies are still needed to enable its practical application. The main bottlenecks related to the application of WO<sub>3</sub> in resistive gas

sensors are related to selectivity and stability. In this context, the objective of this work was to evaluate how different growth parameters influence the main properties of WO<sub>3</sub> films deposited by the DC magnetron sputtering technique. WO<sub>3</sub> films were deposited applying different DC powers on the metallic W target: 100W, 125W, 150W and 175W. Other parameters such as deposition time (60min), argon flow (10sccm), oxygen flow (10sccm) and pressure (3.0 mtorr) were kept constant. Films were grown at room temperature on Si(100) and glass substrate. After deposition, the films were calcined at 400°C, 500°C and 600°C, in order to evaluate the influence of temperature on their structural and optical properties. Results of structural, vibrational, optical and electrical characterizations of the films will be presented, obtained through measurements of Raman spectroscopy, x-ray diffraction, ultraviolet visible spectroscopy, scanning electron microscopy (SEM) and optical and mechanical profilometry.

---

## **WATER ACTIVATED BY COLD PLASMA OF THE GLIDING ARC TYPE AT ATMOSPHERIC PRESSURE**

P8

Gabriel de Almeida Filgueira, Sobrinho, Argemiro (2); Pessoa, Rodrigo(3); Leite, Douglas(4)  
Instituto Tecnológico de Aeronáutica

Plasma technology has been used in several of applications in areas such as healthcare, materials, and agriculture. In the last-mentioned, certain applications have been cited for promoting certain improvements through some types of treatment in food and related plant cultivation. In relation to cultivation, such processes are defined as: direct and indirect treatment in the seed, with the latter concerning the water treatment called cold plasma activation in the literature. Hence, this academic work consists of achieving the activation of water by cold plasma over an experimental arrangement composed of a high voltage generator (2.76 kV) two divergent copper electrodes, an aquarium pump, and a glass reactor. To evaluate the plasma activation process of water, UV-Vis and pH spectrophotometry analyzes were performed as a function of treatment time, which are subject to comparison with the references.

---

## EFEITO DA TEMPERATURA DE SUBSTRATO EM FILMES FINOS DE NITRETO DE GÁLIO DEPOSITADOS POR SPUTTERING REATIVO

Regiane Santana de Oliveira, Jade Helena Campos Augstroze (1),  
Isabela Machado Horta (1), Argemiro Soares da Silva Sobrinho (1),  
Douglas Marcel Gonçalves Leite (1)

(1) Instituto Tecnológico de Aeronáutica

Filmes finos de nitreto de gálio (GaN) tornaram-se alvo de aplicações de última geração em dispositivos optoeletrônicos, principalmente devido aos frequentes avanços nas técnicas de crescimento [1,2]. Neste sentido, este estudo tem o objetivo de estudar e otimizar o efeito da temperatura de substrato nas propriedades estruturais de filmes finos de GaN depositados por sputtering reativo em substratos de silício [3]. Os filmes foram crescidos em uma atmosfera de plasma de Ar + N<sub>2</sub>, a 3 mTorr de pressão de trabalho, com 60 W de potência RF aplicada ao alvo de gálio e com distância alvo-substrato de 90 mm. A temperatura de substrato usada foi de 250, 400 e 550°C. As propriedades estruturais foram extensivamente analisadas por medidas de difração de raios-X. Os filmes crescidos a mais altas temperaturas apresentam uma tendência de aumento na fração cristalizada, representado principalmente por um maior grau de texturização e maiores tamanhos de grão, além de topografia de superfície mais irregular. Por outro lado, menores temperaturas levam a filmes com superfície menos rugosa e com estrutura com maior componente amorfa. Todos os resultados são discutidos em termos do balanço entre as energias térmicas e não térmicas envolvidas no crescimento de GaN pela técnica de sputtering, bem como as respectivas zonas de crescimento das estruturas dos filmes devido à temperatura do substrato. Os resultados ainda são discutidos em relação ao surgimento de tensão nos filmes devido às diferenças nos coeficientes de expansão térmica dos substratos de vidro relação ao GaN. Agradecimentos: Fapesp (2015/06241-5, 2011/05772-0), CAPES (88887.510395/2020-00, 88887.508992/2020-00, 88882.501072/2020-01), CNPq (143273/2018-3), FINEP. Referências: [1] Elon Musk Wants to Mine Lithium for EV Batteries, But He Should Dig For This Metal Instead. Disponível em: [. Acesso em: 4 jun. 2022.](#) [2] IEDM to Feature Gallium-Nitride Power Semis ICs and Thin-Film Solid State Batteries - News. Disponível em: [. Acesso em: 4 jun. 2022.](#)

[3] - OLIVEIRA, R. S. de et al. Structural, Morphological, Vibrational and Optical Properties of GaN Films Grown by Reactive Sputtering: The Effect of RF Power at Low Working Pressure Limit. *Materials Research*, v. 25, p. 9, 2022.

---

**Study of physicochemical parameters of different Plasma Activated Liquid (PAL) by a Gliding Arc Plasma Jet (GAPJ)**

P10

Benedito Donizeti Botan Neto, Lima, Luan Gonçalves de (1,2); Marcondes, Michaela Shiotani (1,2); Chiappim, William (1); Pereira, André Luis de Jesus (1); Pessoa, Rodrigo Sávio (1)

(1) ITA, (2) Universidade Anhembi Morumbi

Plasma Activated Liquids (PAL) have been attracting the attention of different areas of knowledge, due to their wide application, such as medicine, food science, materials science, and other many areas. Plasma activation promotes an improvement of parameters, such as hydrogenionic potential (pH), conductivity, redox potential (ORP), and total dissolved particles (TDS) [1–3]. This work presents on the dependence of the physicochemical parameters of different PAL (tap water, filtered water, distilled water, deionized water, and saline solution) with plasma activation time. The activation of different liquids has been performed by a Gliding Arc Plasma Jet (GAPJ) operating at an airflow of 5L/min, coupled with a high voltage source, using 30.9% of your max voltage in a frequency of 20 kHz. Here, we investigated times of activation varying from 1 to 60 min. For this, 40 mL of liquid was exposed to plasma that was placed at 0.3 mm of the plasma plume. After the activation process, the samples were characterized by a multiparameter meter to evaluate the pH, ORP, conductivity, and TDS. Results show an increase in the pH value, and this is due to the transport between the plasma/air/liquid interface of long-lived species that can promote a chemical equilibrium reaction series in the liquid. The ORP increases along with the TDS, and this increase is due to the generation of oxygen reactive species, giving a reduction or oxidating character to the PAL. The TDS increases with que transport of long-lived species between the interface and, this increase promotes a high conductivity of the liquids due to the number of ions present

in the solution. Finally, we conclude that the time evolution of liquid physicochemical parameters allows us to better understand the plasma activation of different liquids, as well as evidence of an ideal PAL for a given application. References: [1] S. Kim, C.-H. Kim, Applications of Plasma-Activated Liquid in the Medical Field, *Biomedicines*. 9 (2021) 1700. [2] A. Mai-Prochnow, R. Zhou, T. Zhang, K. (Ken) Ostrikov, S. Mugunthan, S.A. Rice, P.J. Cullen, Interactions of plasma-activated water with biofilms: inactivation, dispersal effects and mechanisms of action, *Npj Biofilms and Microbiomes*. 7 (2021) 11. [3] Q. Wang, D. Salvi, Recent progress in the application of plasma-activated water (PAW) for food decontamination, *Current Opinion in Food Science*. 42 (2021) 51–60.

---

### **Effect of Heat Treatment on the Properties of AlN Films Deposited by Magnetron Sputtering**

P11

Cauana Moraes Carvalho, Pereira, André (2); Sobrinho, Argemiro (2)  
(2) Instituto Tecnológico de Aeronáutica

Several types of instruments are required for safe and economical operation in air and space vehicles. Pressure gauges stand out as one of the fundamental instruments, since they are the basis for the operation of all necessary manometers and altimeters [1]. Of the technologies used for the manufacture of these sensors, those that use MEMS (Micro-Electrical-Mechanical Systems) stand out for allowing large-scale production with high reproducibility and attractive characteristics, such as: reduced dimensions, low weight, high resistance to shocks and vibrations, high performance and low power consumption. This sensor measures pressures of both gases and liquids and its operation is based on the transformation of pressure variations into electrical signals [2]. Currently, research related to the development of piezoresistive pressure sensors seeks to obtain devices with high thermal and chemical stability that support extreme conditions of use in aggressive environments, such as applications in the aeronautical and aerospace industries. Among the most studied devices, it is possible to highlight the surface acoustic wave sensors (sound acoustic waves - SAW) that differ mainly because they have a transmitter and a receiver in the same device. This feature makes the SAW sensor



self-sustaining, dispensing with any external power source. SAW sensors are devices that work on the surface of piezoelectric materials with their physical and/or chemical properties [3]. Aluminum nitride (AlN) thin films play fundamental roles in the microelectronics field and their production began in the 1950s. Initial research showed that the physicochemical properties of these films make them promising for application in electrical, optical and mechanical fields. . Some of these properties worth mentioning are the high piezoelectric coupling coefficient, high acoustic speeds, high bandwidth value and high thermal conductivity [4]. In order to contribute to the development of this technology, this work was a study to optimize the properties of AlN films grown using the RF Magnetron Sputtering technique, aiming at its application in SAW sensors. AlN films were grown with different radiofrequency (RF) powers: 400W and 450W. The other deposition parameters (pressure, flow of Ar and N<sub>2</sub> gases and temperature of the substrates) were kept constant. Once grown, the films were fractionated and subjected to different heat treatment conditions at ambient pressure: 800°C/12h, 800°C/48h, 800°C/60h, 900°C/12h and 1000°C/12h.

---

### **Study of the Tungsten Incorporation on the Titanium Dioxide Films Properties**

P12

Giovana Fazenda, Leite, Douglas (1), Pereira, André (1), Sobrinho, Argemiro (2)

Instituto Tecnológico de Aeronáutica (ITA)

The accelerated development of world population brought serious environmental problems that require the developing of clean and sustainable technologies to be overcome. Between these problems, the contamination of aquatic environments, such as rivers, lakes and groundwater, by organic contaminants is one of the main problems. The waste generated by industrial and agricultural activities are, in most cases, toxic and harmful to the population and the environment. The destination of most of the residues produced by human activities and industries are rivers. In the countryside, the increase in agricultural development has also increased the indiscriminate use of fertilizers and pesticides, which has been another source of contamination of rivers

and groundwater. For these reasons, currently many researchers aim to contribute to the development of new technologies that are harmonic with the environment, ecologically clean, safe and sustainable to eliminate the pollutants. The process of photocatalysis, which uses the abundant, clean and safe solar energy, together with a photocatalyst for the degradation of organic components, is one of the technologies that has presented the most advances in this direction. Titanium Dioxide (TiO<sub>2</sub>) has several advantages in addition to photocatalytic activity, including its natural abundance, low toxicity, thermal and chemical stability, and photocorrosion resistance. However, although there are already several practical applications of photocatalytic systems using TiO<sub>2</sub>, the low efficiency of these systems are a challenge faced by a variety of research groups worldwide. One of the main challenges is related to the TiO<sub>2</sub> bandgap, (3.2eV) that allows a good photocatalysis activity only in the ultra-violet spectrum of the sun light ( 5% of the solar spectrum). One of the strategies to decrease the TiO<sub>2</sub> bandgap and, consequently, increase the absorption region to the visible light region (¿50% of the solar spectrum) is doping the TiO<sub>2</sub> with cations of other metals, since the dopant can act as an electron trap, preventing electron-hole recombination. Thus, in this work, was performed a study of the properties of TiO<sub>2</sub> films doped with different tungsten (W) concentration aiming at its application in the photodegradation of organic contaminants. The films were grown by the dual magnetron sputtering technique and were deposited on Si(100), glass and FTO substrates previously cleaned and stored in an isopropyl alcohol bath. The control of the W incorporated into the films was performed by varying the DC power applied to the W target. Five different powers were used: 5W, 7W, 8W, 9W, 10W, in addition to the undoped film. The other deposition parameters, such as power at the metallic Ti target, pressure, Ar and O<sub>2</sub> flow, were kept constant in all depositions. In order to guarantee the crystallinity of the samples, they were submitted to a heat treatment of 450°C for 2 hours. The influence of different W concentrations on TiO<sub>2</sub> films was evaluated by Energy Dispersive X-ray Spectroscopy (EDX), X-ray Diffraction (XRD), Raman scattering and Transmittance measurements. The photocatalytic properties of the films were evaluated by photodegradation tests of the methylene blue dye. References [1] Lapworth,

D. J. Baran, N. Stuart, M. E. Ward, R. S. Environmental Pollution. V.163, p.287, 2012. [2] Alfano, O. M.; Bahnemann, D.; Cassano, A. E.; Dillert, R.; Goslich, R. Catal. Today v.58, p.199, 2000. [3] Schneider, J.; Matsuoka, M; Takeuchi, M.; Zhang, J.; Horiuchi, Y.; Anpo, M.; Bahnemann, D. W. Chem. Rev. v.114, p.9919, 2014

---

## A INFLUÊNCIA DO TRATAMENTO TÉRMICO EM FILMES DE NITRETO DE GÁLIO

P13

Jade Helena Campos Augstroze, Oliveira, Regiane (1); Horta, Isabela (1); Pereira, André (1); Leite, Douglas (1)

(1) Instituto Tecnológico de Aeronáutica

O nitreto de gálio (GaN) é um semicondutor da família III-V amplamente utilizado para aplicações optoeletrônicas e também para as aplicações que necessitam de altas frequências, altas velocidades e altas temperaturas devido a seu elevado band-gap e por apresentar alta estabilidade química e física [1] [2]. O presente trabalho tem como objetivo o crescimento de filmes finos de nitreto de gálio em substratos de vidro pela técnica de sputtering reativo e posterior tratamento térmico visando a otimização de suas propriedades ópticas e estruturais. Um total de 10 amostras de GaN/vidro foram produzidas concomitantemente em um processo de deposição por sputtering reativo utilizando: temperatura de substrato de 250 °C; potência RF aplicada ao alvo de Ga de 60 W; e atmosfera composta por Ar e N<sub>2</sub> mantida a 3 mTorr. Posteriormente, pares destas amostras foram submetidas a tratamentos térmicos nas temperaturas de 400°C e 550°C, durante 1 e 4 horas, totalizando 4 condições de tratamento diferentes, mais o par de amostras como-crescidas. As análises das modificações nas propriedades ópticas e estruturais causadas pelos diferentes tratamentos térmicos são realizadas a partir de espectrofotometria no Uv-Vis e difratometria de raios X. Agradecimentos: Fapesp (2015/06241-5, 2011/05772-0), CNPq (157584/2021-6 PIBIC/ITA) Referências: [1] Elon Musk Wants to Mine Lithium for EV Batteries, But He Should Dig For This Metal Instead. Disponível em: [. Acesso em: 4 jun. 2022.](#) [2] IEDM to Feature Gallium-Nitride Power Semis ICs and Thin-Film Solid State Batteries - News. Disponível em: [. Acesso em: 4 jun. 2022.](#)

---

**ESTUDO DO PROCESSO DE FILTRAGEM DE  
MÁSCARAS DE PROTEÇÃO INDIVIDUAL DE TNT  
RECOBERTAS COM ALUMINA PELA TÉCNICA DE  
DEPOSIÇÃO POR CAMADA ATÔMICA**

P14

Pollyanna Saldanha Pequeno, Rodrigo Sávio Pessoa  
Instituto Tecnológico de Aeronáutica

COVID-19 é uma infecção viral respiratória, altamente transmissível, causada por um novo coronavírus SARS-CoV-2. Suas formas de contaminação são ocasionadas pela emissão de gotículas, e são transmitidas pelo ar e por contato. A emissão de gotículas se dá pela liberação de partículas expelidas durante eventos expiratórios, tais como, falar, tossir ou espirrar. A transmissão por contato, ocorre quando as gotículas maiores se depositam em uma superfície, seja ela na mão do próprio indivíduo durante o ato de tossir e espirrar, ou nos chamados, fômites, que são superfícies nas quais as gotículas maiores se depositam e tornam aquele local contaminado, esse tipo de transmissão ocorre quando uma pessoa tem contato com uma superfície contaminada e leva o vírus em contato com a boca, os olhos ou o nariz. Das diversas medidas adotadas, as que ganharam maior destaque foram: isolar pacientes infecciosos, limpar e desinfetar objetos e superfícies, lavar as mãos com frequência, estabelecer melhores hábitos de higiene e o uso de Equipamentos de Proteção Individual (EPI). Os equipamentos de proteção individual (EPI) incluem os produtos para higiene e saúde e são usados nos centros cirúrgicos, nas enfermarias dos hospitais ou clínicas para a higiene, cuidados e segurança de funcionários e pacientes, dentre eles a máscara de proteção facial ganha enorme interesse, devido ser uma barreira controladora de emissão de gotículas e bloqueadora da liberação do vírus no ambiente. Um material muito utilizado na confecção de máscaras tem sido o TNT, e devido ao seu baixo valor de gramatura, o TNT apresenta muitos poros, os quais ainda permitem a passagem de algumas gotículas, visto isso, surge o interesse no revestimento de máscaras de TNT com filmes finos a fim de retardar a passagem de gotículas. A técnica de deposição por camadas atômicas (ALD) é um método de deposição de filme finos com compostos químicos na fase gasosa, baseado em reações de superfície no substrato. Diferente da deposição por vapor químico (CVD), na deposição por ALD, os reagentes são introduzidos na câmara de ma-

neira alternada, ou seja, um reagente por vez. A técnica de ALD, desperta um grande interesse, devido crescer filmes finos, uniformes, com controle simples e preciso da espessura do filme pelo número de ciclos de deposição, além de ser capaz de depositar filmes em substratos tridimensionais (3D). Filmes finos de alumina ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ), vem sendo um material promissor a diversas aplicações, devido algumas de suas propriedades, tais como: proteção contra corrosão, baixa porosidade, resistência ao calor e hidrofobicidade. Após o recobrimento do TNT, medidas de Espectroscopia no Infravermelho (FTIR), Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV), Espectroscopia de Dispersão por Raios - X (EDS), ângulo de contato e potencial eletrostático foram realizadas. Foram estudadas as estruturas: (A) camada TNT 50g filtro (ou barreira) e (B) 3 camadas (compostas de TNT 30g/ TNT 50g/ TNT 30g). Os resultados obtidos evidenciam que a técnica ALD foi capaz de recobrir a fibras de polipropileno do TNT com  $\text{Al}_2\text{O}_3$  de maneira conforme, tanto para a estrutura (A) quanto para (B).

---

## Grupo 6 - Outros (O)

### 01 PeVatrons dentro da galáxia: emissão de raios cósmicos e gama

Débora Beatriz Götz, Rita C. dos Anjos(1); Jaziel G. Coelho(2)

(1) Universidade Federal do Paraná, (2) Universidade Tecnológica Federal do Paraná

Raios cósmicos são partículas carregadas que se propagam pelo espaço e chegam até a Terra, dentre eles temos partículas com várias ordens de grandeza energética. As fontes destas partículas ainda não foram identificadas, para estudá-las deve-se considerar as várias interações que ocorrem com os raios cósmicos durante sua propagação pelo espaço, como o desvio de sua propagação por campos magnéticos, aceleração e interação com outras partículas. Os chamados PeVatrons ( $\text{PeV} = 10^{15} \text{ eV}$ ) são possíveis fontes de aceleração desses raios dentro da Galáxia até energias de  $10^{15} \text{ eV}$ . Uma das formas de identificar PeVatrons é através da emissão de radiação gama com energias entre GeV e TeV. No centro de nossa galáxia foram detectados, pela Colaboração H.E.S.S., partículas com energia que evidenciam PeVatrons nessa região, como a presença de prótons com energia de 0,04 PeV. Utilizando o software GALPROP para resolver a equação de propagação para raios cósmicos Galácticos, é possível obter a distribuição (espectro) dos raios cósmicos e gamas em diferentes ambientes e parâmetros, e assim comparar com os espectros medidos pelos Observatórios na Terra. Comparando os resultados obtidos, é esperado que a relação entre as simulações e os dados possam auxiliar na compreensão dos mecanismos de aceleração de partículas dentro dos PeVatrons e sua identificação. Neste trabalho apresentamos os espectros de raios cósmicos e raios gama de PeVatrons recentemente identificados pela Colaboração H.E.S.S. Avançar nos estudos de PeVatrons contribuirá na identificação de fontes de raios cósmicos Galácticos.

---

## O teorema de Noether e o momento angular das Ondas Gravitacionais

O2

João Miguel Batista Matzenbacher, Márcio Eduardo da Silva Alves  
ICT - UNESP

In the present work, we present the results of an undergraduate project in which we depart from Hamilton's least action principle as a foothold for the Classical Field Theory formulation. Then, we explore the usage of the field theory tools in the scope of the gravitational wave theory. Mediated by Noether's Theorem, the goal is to explore the relation between invariance and conservation of physical quantities considering infinitesimal spatial rotations provided by Orthochronous Proper group elements. Then, we verify that Angular Momentum emerges as a conserved Noether charge for the spin 2 gravitational wave field. After finding a satisfactory formula for the total angular momentum carried by gravitational waves, we estimate the rate of loss of this angular momentum by a binary system as a function of coalescence time. In the present approach, we do not consider any Post-Newtonian approximation for the evolution of the binary orbit. In spite of this, with the formalism developed here, it is possible to study and understand the coalescence phase of some binary systems observed by the LIGO detector.

---

## Search for gravitational-wave bursts in the LIGO data at the Schenberg antenna sensitivity range

O3

Julio César Martins, Odylio Denys de Aguiar (1); Ik Siong Heng (2);  
Iara Tosta e Melo (3)

(1) INPE; (2) University of Glasgow (GLA) ; (3) Istituto Nazionale di Fisica Nucleare-LNS

The Brazilian Gravitational Wave (GW) detector Mario Schenberg was conceived in the early 2000s and operated until 2016, when it was dismantled. It consists of a spherical resonant mass antenna sensitive to GW signals from 3150 Hz to 3260 Hz, and for this frequency range it has an "ultimate" sensitivity comparable to that achieved by Advanced LIGO detectors during the third observational run (O3). It is in the interest of part of the Brazilian scientific community that this project does not come to an end. The Schenberg project can contribute

to the international gravitational-wave research. Assuming the similar sensitivities between those detectors, this work aims to search for short GW burst signals in the O3 data of Advanced LIGO in which its results help to characterize the advantage of reassembly of the Schenberg antenna. We perform a search for signals with milliseconds to a few seconds without making assumptions about their morphology, polarization, and arrival sky direction. The data were analyzed with the coherent WaveBurst pipeline (cWB) with frequencies from 512 Hz to 4096 Hz and the search targets only signals that have bandwidth overlapping the Schenberg frequency band. No statistically significant evidence of GW bursts during O3 was found. This result was used to feature the search efficiency in identifying different signal morphologies and establish upper limits on the GW burst event rate as a function of its strain amplitude. It was also possible to estimate a distance to detect a set of waveforms from potential astrophysical sources. This search, and consequently Schenberg, is sensitive to sources emitting isotropically  $5 \times 10^{-6} M_{\odot} c^2$  in GWs from a distance of 10 kpc with 50% detection efficiency and with a False Alarm Rate of 1/100 years. The feasibility of detecting f-modes of neutron stars excited by glitches was also investigated. Based on rough estimates, Schenberg would need at least 5.3 years of observational run to get a single detection of this type of signal, given  $E_{glitch} \approx 10^{-10} M_{\odot}$ .

04

---

### The determination of 4-qubit state with a quantum search algorithm.

Liliana Souza do Carmo, Freitas, Gisele Bosso de  
 Universidade Estadual da Região Tocantina do Maranhão

When talking about quantum computers, in fact it is considered a robust "machine" that aims to "overcome" the calculation capacity of current computers. In fact, scientists have already understood the relevance of quantum algorithms such as solving mathematical problems, cryptography, quantum simulations, optimizations and searching a certain database. Classical algorithms are written in binary positions 0 or 1 and quantum algorithms are characterized by superposition, which makes them more agile in some aspects (QUANTUM, 2022). It's like flipping a coin, for the classical bits it will show heads



or tails, however, the qubits will allow the finding” of heads and tails at the same time. The search algorithms are used in a certain database, with the purpose of determining an item in that space. Currently, we have several algorithms that perform this work, however, if the data system is unordered it will be impossible for a classical algorithm to solve this problem. With quantum computing these types of searches have become viable, through quantum search algorithms. For accessibility, we have as an example Grover’s algorithm, which was developed in 1996 by Lov Grover that relies on quantum parallelism and thus determines the state that is sought by the amplification of probability. Performs the measurement in each qubit it collapses to this state of greater amplitude and the other information is lost and thus returns the desired state (NIELSEN, CHUANG, 2002; PORTUGAL, 2004). Furthermore, this study aims to implement Grover’s algorithm in a quantum computer that has 5-qubit in its configuration, in addition, to determine the probabilities of the state —1000 $i$  for 100 iterations and analyze the results acquired a classical, through the quantum simulator Qasm Simulator with 32 qubits and quantum. For this, the quantum circuit was compiled in the Jupyter Notebook environment and applied in the free software Qiskit (Quantum Information Science) from IBM (QISKIT, 2021). References: NIELSEN, Michael A.; CHUANG, Isaac. Quantum computation and quantum information. American Association of Physics Teachers. 2002. PORTUGAL, Renato. Uma Introdução à Computação Quântica. São Carlos, SP: SBMAC, 2004. QISKIT. Available from: <https://qiskit.org/>. Access on: 25 Sept. 2021. QUANTUM, I. What is Quantum Computing? Available from: <https://www.ibm.com/topics/quantum-computing>. Access on: 21 maio 2022.

---

## Fontes Galácticas como emissoras de raios cósmicos de altas energias

Luana Natalie Padilha, Rita C dos Anjos (1), Jaziel G. Coelho (2)

(1) Univ. Federal do Paraná, (2) Univ. Federal do Espírito Santo

A produção de partículas energéticas no Universo é um dos grandes mistérios da ciência moderna. Nos últimos anos, alguns esforços têm sido feitos para identificar fontes Galácticas capazes de acelerar partículas até 1 PeV, conhecidas como PeVatrons. A diferente morfologia dos remanescentes de supernovas (SNRs) Galácticas está correlacionado diretamente com a natureza da explosão da estrela e a existência de um possível Objeto Central Compacto (CCO). Os CCOs apresentam raios pequenos e intensos campos gravitacionais em suas superfícies. Devido a estes fortes campos e interações com nuvens magnetizadas ao seu redor, são considerados possíveis candidatos à produção de raios cósmicos. Em agosto de 2002, a espaçonave XMM-Newton dedicou duas de suas órbitas para o objeto compacto 1E 1207.4-5209, com um tempo total de observação de 257.303 s. A fonte compacta de raios-X 1E 1207.4-5209, classificada como uma estrela de nêutrons silenciosa, magnetizada e de rotação rápida, está localizada muito próxima ao centro remanescente G296.5+10.0. Esta associação, objeto compacto 1E 1207.4-5209 e supernova G296.5+10.0, está localizada na constelação de Centaurus, com uma distância estimada em cerca de 2.0 Kpc. Neste trabalho, obtivemos a contribuição da emissão de raios gama de altas energias ( $E \gtrsim 100$  GeV) proveniente da aceleração e propagação dos raios cósmicos do Objeto Compacto Central 1E 1207.4-5209 e sua hospedeira SNR G296.5+10.0. Além disso, em uma sequência de dois artigos obtivemos a contribuição para a emissão de raios gama de altas energias ( $E \gtrsim 100$  GeV) devido a aceleração de raios cósmicos da Soft Gamma Repeater (SGR) J1935+2154 (também conhecida como a primeira Fast-Radio Burst galáctica) e sua hospedeira SNR G57.2+0.8 [1,2]. Para isso, levamos em consideração a associação SNR + SGR como uma fonte única perto do centro galáctico. Também calculamos as contribuições destas associações para o fluxo total de raios cósmicos Galácticos observado, considerando a propagação de raios cósmicos dentro da Galáxia com todas as perdas de energia e interações de partículas. Propomos que as configurações acima podem fornecer um rico cenário para a geração

de gamas GeV-TeV de raios cósmicos até PeV dentro da Galáxia.  
Palavras-chaves: Raios Cósmicos. Radiação Gama. Objeto Central  
Compacto. Soft Gamma Repeater [1] High-energy gamma-ray emis-  
sion from SNR G57.2+0.8 hosting SGR J1935+2154. JCAP 10, 023  
(2021) [2] An updated view and perspectives on high-energy gamma-  
ray emission from SGR J1935+2154 and its environment. Submitted  
to JCAP, 2022



# Participantes

Amanda Maria de Oliveira,ITA  
Ana Beatriz Monteiro dos Santos,Universidade Estadual da Região Tocantina do Maranhão  
Anderson Francisco Coelho,ITA  
Andrea Alves Boaventura,Ufms  
Ariane Lopes Leite ,IFSP/ITA  
Barbara da Silva Lima,UNILA  
Benedito Donizeti Botan Neto,IFSP/ITA  
Bruna Valeria de Assis,ITA  
Bruno Magacho da Silva,Universidade Federal do Rio de Janeiro  
Camila Gabrieli Feck Hagemann,Universidade Federal da Integração Latino-americana  
Cauana Moraes Carvalho,Instituto Federal de São Paulo/ITA  
Cesar Hipolito Pinto,ITA  
Claudio Ribeiro da Silva,ITA  
Daniel Carlos Souza Santos,Universidade de São Paulo Débora Beatriz Götz,Universidade Tecnológica Federal do Paraná - UTFPR  
Débora Nazaré de Freitas ,ITA  
Diana Maria Navroski Thomen,ITA  
Égon Piragibe Barros Silva Borges,UFABC  
Everson Henrique Rodrigues,ITA  
Fabrizia Henriques Bonates,ITA  
Felipe de Souza Miranda,Unesp - ITA  
Filipe Gustavo Kano,ITA  
Gabriel de Almeida Filgueira,ITA  
Gabriel Krzyzanowski de Almeida,Universidade Federal de Integração Latino Americana  
Gabriel Rocha das Neves Norte,ITA  
Gabriela Nascimento Pereira,ITA  
Ghuerda Lima Mayr,ITA

Giovana Fazenda,IFSP/ITA  
Guilherme de Albuquerque Bruneri,ITA  
Guilherme Gazolla Santana,Universidade Estadual Paulista  
Guilherme Novais Zeminiani,Universidade Cidade de São Paulo (UNICID/UNICSUL)  
Guilherme Peres Almeida,ITA  
Helen Caroline de Souza Barros,Instituto Federal de São Paulo/ITA  
Igor Leite Correia Lima,Universidade Federal do Ceará  
Isabela da Silva Vieira,ITA  
Isabela Machado Horta,ITA  
Isabella Aparecida Marzola,ITA  
Isabella Grinberg Francelino,ITA  
Jade Helena Campos Augstroze,IFSP/ITA  
João Lima Neves,Universidade Federal Fluminense  
João Miguel Batista Matzenbacher,FEG-UNESP  
João Pedro de Marchi Oliveira,ITA  
José Renato Vidigal Filho,ITA  
Julia Conceição Camargo,Universidade Federal Fluminense  
Julio César Martins,INPE - Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais  
Julio Cesar Verli Chagas,ITA  
Kamyar Mohseni,ITA  
Karla Beatriz do Carmo Batista,Universidade Federal Fluminense - VR  
Kássio Henrique Souza Silveira,Instituto Federal de São Paulo (IFSP)/ITA  
Leonardo Fabricio Gomes Batista,ITA  
Letícia Carolaine Silva Faria,Universidade Federal de Alfenas  
Liliana Souza do Carmo,Universidade Estadual da Região Tocantina do Maranhão  
Lis Vieira Silva,Universidade de Pernambuco  
Luan Gabriel Fonseca dos Santos,ITA  
Luan Gonçalves de Lima,Universidade Anhembí Morumbi / I Luana  
Natalie Padilha,Universidade Tecnológica Federal do Paraná  
LUIS Carlos da Silva Junior,ITA  
Luiz Eduardo Sivieri,ITA  
Luiz Gustavo Mendonca Tenorio, ITA  
Marcelo Montenegro Lapol,ITA - ITA  
Marcos Douglas Barros da Cunha,ITA

Matheus Henrique Pavani Pacheco,ITA  
Michaela Shiotani Marcondes,Universidade Anhembi Morumbi / ITA  
Moisés José dos Santos Freitas,ITA  
Natan Aparecido Coleta da Conceição,ITA  
Pablo de Deus Silva,ITA  
Pedro Henrique Ferron Kim ,ITA  
Pollyanna Saldanha Pequeno,IFSP/ITA  
Polyane do Nascimento Santos,ITA  
Rafael da Silva leal,Instituto federal de são Paulo/ ITA  
Regiane Santana de Oliveira,ITA  
Renata Fraga Cardoso,ITA  
Rodrigo Pires Ferreira,ITA  
Sara Leticia Guedes,IFSP/ITA  
Sergio Levy Nobre dos Santos, Universidade Federal do Ceará  
Vagner da Silva Dias,Universidade Federal do Rio Grande  
Vanessa Messias Dias,ITA  
Victor Gabriel Morele Duarte,ITA  
Victoria Cristina Moraes Oliveira ,ITA  
Vinicius Gabriel Gomes de Albuquerque,Universidade de São Paulo  
Vinicius Pereira,ITA  
William Chiappim Junior,ITA





# Índice de Autores

Chaves

João, 19

Coelho

Anderson, 57

Freitas

Gisele, 54

Jório

Ado, 27

Khoury

Antonio, 21

Marinho

Franciole, 23

Negreiros

Rodrigo, 21

Pessoa

Rodrigo, 19

Ridenti

Marco, 22

Santos

Ana, 54

Silva

Antonio José, 13

Sobrinho

Argemiro, 19

Teles

Lara, 22