



Anais do XVI EFITA – Encontro de Física do ITA

2 a 4 de Outubro de 2023
São José dos Campos

Instituto Tecnológico de Aeronáutica –
ITA

Divisão de Ciências Fundamentais
Departamento de Física

2 de outubro de 2023

Programação

1. Apresentação	3
2. Programação	5
3. Palestra de Abertura	11
4. Palestras	13
5. Palestra de Fechamento	17
7. Painéis	21
7. Minicurso	19
8. Índice de Autores	49

Comissão de Organização

*Francisco Machado
Marco A. Ridenti
André L. J. Pereira
Franciole Marinho
Maurício Pazianotto
Rene Spada
Anderson Coelho
Diana Navroski
Filipe Kano
Julio Chagas
Leticia Carolaine
Murilo Pedroso
Pablo de Deus*

Apoio



Quantum Design
LATIN AMERICA

Apresentação

É com grande satisfação que apresentamos o livro de resumos do XVI Encontro de Física do ITA (EFITA), realizado de 2 a 4 de outubro de 2023 no Instituto Tecnológico de Aeronáutica em São José dos Campos. Este encontro chega à sua XVI edição e se consolida como um dos eventos de Física com presença constante no calendário.

Concebido como forma de apresentar as linhas de pesquisa do Programa de Pós-graduação em Física (PG/FIS) do ITA, uma instituição militar com vocação científica e tecnológica, o EFITA deste ano ocorre em outubro, em vez de julho como nos anos anteriores, e foi condensado em três dias de evento, em vez de cinco. As circunstâncias deste ano nos obrigaram a fazer essa mudança em razão da realização do SSP (Space Studies Program) da Universidade Internacional do Espaço no ITA. No entanto, o encontro não perdeu a sua essência. Pelo contrário, o tempo reduzido nos obrigou a priorizar o essencial, isto é, a apresentação das atividades de pesquisa em Física no ITA, a interação com alunos de Física de outras instituições e a imersão no ambiente iteano.

Como de costume, convidamos pesquisadores de Física e áreas afins com atividade de pesquisa expressiva dentro de nossa comunidade. Na abertura, tivemos a presença do Prof. Rodrigo Capaz, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, presidente em exercício da Sociedade Brasileira de Física, que apresentou a palestra com título “Quebrando Fios Iônicos Ultrafinos no LNNano/CNPEM”. No fechamento, contamos com a presença da Prof. Kaline Coutinho, da Universidade de São Paulo, que apresentou o palestra “Solvent Effect on the Electronic and Structural Properties of Ru complexes as Water-splitting Catalyzes”.

Um aspecto fundamental do EFITA é a apresentação dos trabalhos dos participantes, tanto os de alunos de fora do ITA, quanto os de alunos do ITA. Neste ano, tivemos um total de 25 trabalhos, apresentados na forma de pôster. Aqui, apresentamos o resumo de cada um desses trabalhos.

O XVI EFITA traz como tema motivador “A Física na Fronteira da Tecnologia e da Inovação”. Para destacar essa temática, convidamos a professora Suelo Cusódio, do InovaLab (Laboratório de Inovação do ITA), especialista na área de inovação, para falar sobre este tema no XVI EFITA.

Este livro de resumos é um registro do evento, que temos a satisfação de publicar em seu site oficial, deixando-o acessível a todos via rede mundial de computadores. Em tempos de grandes mudanças tecnológicas e interesse renovado na ciência, o EFITA contribui para a missão do PG-FIS de “formar, com qualidade, pesquisadores com sólida formação em ciência básica e tecnológica, com ênfase em física e

áreas afins, capazes de agir independentemente e que possam promover o progresso da ciência, da tecnologia e da inovação”

Francisco Bolivar Correto Machado
Coordenador do XVI EFITA

Marco Antonio Ridenti
Vice coordenador do XVI EFITA

Programação

XVI EFITA – Programação

seg - 02 de Outubro de 2023

8h00 – 10h00 Abertura do XVI EFITA

Local: Auditório Weis

Prof. Dr. Rodrigo Barbosa Capaz (UFRJ/CNPEM)

Título: Quebrando fios iônicos ultrafinos no LNNano/CNPEM

10h00 – 10h30 Coffee break

10h30 – 12h00 Minicurso

Local: Auditório Weis

Prof. Dr. Lachlan Thomas Belcher (ITA/USAF)

Título: Introdução a computação quântica

12h00 – 13h30 Almoço

13h30 – 14h30 Palestra Local: Auditório da Química

Prof. Dr. Pedro Pompeia (ITA)

Título: Gravitação Modificada

14h30 – 15h30 Apresentação de Área: Física de Plasmas

Local: Laboratório de Plasmas e Processos (LPP)

Prof. Dr. Argemiro Sobrinho (ITA)

15h30 – 16h00 Coffee break

16h00 – 18h00 Primeira Sessão de Painéis

XVI EFITA – Programação

ter - 03 de Outubro de 2023

8h00 – 10h00 Minicurso

Local: Auditório Weis

Prof. Dr. Lachlan Thomas Belcher (ITA/USAF)

Título: Introdução a computação quântica

10h00 – 10h30 Coffee break

10h30 – 11h15 Palestra Local: Auditório Weis

Prof. Dr. Luiz Ferrão (ITA)

Título: Engenharia de Estrutura Eletrônica

11h15 – 12h00 Apresentação de Área: Dinâmica Não Linear e Sistemas Complexos

Local: Auditório Weis

Prof. Dr. Marco Antônio Ridenti (ITA)

12h00 – 13h30 Almoço

13h30 – 14h30 Palestra Local: Auditório Weis

Prof. Dra. Marisa Roberto (ITA)

Título: Fusão Nuclear Controlada e a Física da Ionosfera: Avanços e Perspectivas Futuras

14h30 – 15h45 Apresentação de Área: Física Atômica e Molecular

Local: Auditório Weis

Prof. Dr. André Jorge Carvalho Chaves (ITA)

15h45 – 16h15 Coffee break

16h15 – 18h00 Segunda Sessão de Painéis

noindent **XVI EFITA – Programação**

qua - 04 de Outubro de 2023

8h00 – 10h00 Minicurso

Local: Auditório Weis

Prof. Dr. Lachlan Thomas Belcher (ITA/USAF)

Título: Introdução a computação quântica

10h00 – 10h30 Coffee break

10h30 – 11h15 Apresentação de Área: Física Nuclear

Local: Auditório Weis

Prof. Dr. Cesar Henrique Lenzi (ITA)

11h15– 12h00 Palestra Local: Auditório Weis

Prof. Dr. Argemiro Sobrinho (ITA)

Título: A Física de Plasmas Superando Importantes Desafios da Tecnologia de Materiais.

12h00 – 13h30 Almoço

13h30– 14h30 Palestra InovaLab ITA Local: Auditório Weis/InovaLab

Prof. Dra. Sueli Sampaio Damim Custódio (ITA)

Título: Palestra com o laboratório de INOVAÇÃO do ITA. Inovação e Tecnologia.

14h30– 15h30 Palestra Patrocinadores Local: Auditório Weis

Palestra dos colaboradores do XVI EFITA

15h30 – 16h00 Coffee break

16h00– 17h30 Encerramento Local: Auditório Weis

Prof. Dra. Kaline Coutinho (USP)

Título: Solvent Effect on the Electronic and Structural Properties of Ru complexes as Water-splitting Catalyzes.

17h30 – 18h00 Premiações e Encerramento Local: Auditório Weis

Palestra de Abertura

Quebrando Fios Iônicos Ultrafinos no LNNano/CNPEM ^{PA1}

Dr. Rodrigo Barbosa Capaz
Universidade Federal do Rio de Janeiro

Esta palestra será dividida em duas partes:

Na **primeira parte**, será descrito brevemente o Laboratório Nacional de Nanotecnologia (LNNano/CNPEM), uma instalação aberta a usuários externos para pesquisa e inovação na área de nanociência e nanotecnologia localizada em Campinas, no mesmo campus em que estão localizados outros 3 Laboratórios Nacionais que incluem o Sirius, o maior e mais complexo projeto da ciência nacional.

Na **segunda parte**, será discutido nosso trabalho conjunto de teoria e experimento sobre a formação e ruptura de fios monoatômicos de ZrO_2 , publicado recentemente [“Stability and Rupture of an Ultrathin Ionic Wire” Focassio et al Phys. Rev. Lett. 129, 046101 (2022)]

Palestras

Gravitação Modificada

PA2

Pedro Pompéia

Instituto Tecnológico de Aeronáutica

A Relatividade Geral, com sua conexão entre geometria e conteúdo de matéria e energia, tornou-se a teoria padrão no estudo da interação gravitacional. No entanto, desde sua proposição em 1915, ela tem sido sujeita a modificações, seja na sua parte geométrica, seja no conteúdo de matéria. Nesta palestra, pretende-se abordar algumas das observações que motivam essas modificações e apresentar um cenário das teorias de gravidade modificada que se estudam hoje em dia.

Engenharia de Estrutura Eletrônica: Design de Materiais por Abordagens Qualitativas e Quantitativas

PA3

Luiz Ferrão

Instituto Tecnológico de Aeronáutica

O desenvolvimento de novos materiais é um dos principais motores para o avanço tecnológico, sendo que o ajuste das suas propriedades eletrônicas permite melhorias na eficiência de processos físicos e/ou químicos ou mesmo a condução de processos anteriormente impossíveis de serem realizados. Nessa apresentação discutiremos o estudo de propriedades eletrônicas de sistemas na escala molecular por meio de métodos qualitativos e quantitativos de química quântica, visando aplicações em semicondutores orgânicos. Será discutida a ligação química em materiais, em especial aqueles formados por carbono; a construção de tijolos modulares a partir de recortes de grafeno, gerando hidrocarbonetos policíclicos aromáticos e analisando as suas estabilidades e reatividades.

Fusão Nuclear Controlada e a Física da Ionosfera: Avanços e Perspectivas Futuras

Marisa Roberto

Instituto Tecnológico de Aeronáutica

A Agência Internacional de Energia Atômica prevê que o consumo mundial de energia duplique nos próximos 40 anos. Atualmente cerca de 80% do consumo é assegurado pelos combustíveis fósseis, situação que não é sustentável pelas graves alterações atmosféricas que provoca e porque estes combustíveis deverão estar esgotados num futuro próximo. Opções energéticas alternativas são necessárias, sendo a fusão nuclear uma dessas opções. Numa reação de fusão pequenas quantidades de matéria dão origem a enormes quantidades de energia: $3,136 \times 10^{-29}$ kg de combustível originam 17,59 MeV. Comparando com as reações químicas, um milhão de vezes menos poderosas que as nucleares, têm-se, por exemplo, que cerca de um litro de combustível de fusão produz a mesma energia que 6600 toneladas de carvão. A produção comercial de energia elétrica a partir da fusão de átomos leves, tal como acontece no Sol e nas estrelas, colocará a disposição do homem uma fonte alternativa de energia de larga escala, com baixo impacto ambiental. O International Thermonuclear Experimental Reactor (ITER), está sendo construído em Cadarache, França, no âmbito de uma colaboração de grande escala, tendo como parceiros principais a Euratom, o Japão, a Federação Russa, os Estados Unidos da América, a China, a Coreia do Sul e a Índia. O objetivo principal do ITER é demonstrar a viabilidade científica e tecnológica da energia de fusão por confinamento magnético em um dispositivo denominado tokamak, o qual produzirá 500 MW de potência de fusão durante 400 segundos com o auxílio de 50 MW de potência de aquecimento, permitindo o estudo dos plasmas de fusão. O tokamak brasileiro TCABR, baseado no Instituto de Física da Universidade do São Paulo, foi transferido do Instituto de Física da Suécia e está em operação desde 1994. Atualmente o tokamak deverá passar por um upgrade que permitirá que o dispositivo opere com configurações de plasmas em forma de D. É conhecido que em tokamaks operando no modo H surgem instabilidades periódicas conhecidas como edge localized modes (ELMs), as quais são responsáveis pela abrupta elevação de temperatura próximo as placas do desviador provocando a redução do tempo de vida do des-

viador em um futuro reator. Tal upgrade se mostra necessário para estudar cenários de tokamaks com desviadores poloidais, que permite o estudo dos footprints, que possibilitará controlar o tempo de vida nas paredes do desviador. O Brasil está caminhando para a implementação de um laboratório nacional – o Laboratório de Fusão Nuclear (LFN) – para concentrar e coordenar estudos em fusão nuclear em todo o país. O LFN será construído no município de Iperó, São Paulo, pela Comissão Nacional de Energia Nuclear (CNEN). Quanto ao estudo da física da ionosfera propomos estudar o comportamento dinâmico de partículas presentes na ionosfera em baixas latitudes. Temos como objetivo obter resultados que descrevam adequadamente as características da ionosfera, assim como de suas irregularidades pela formação das chamadas “bolhas de plasmas”. Os dados do sistema de posicionamento global (GPS) e as medidas do conteúdo total de elétrons na vertical (VTEC) serão utilizados como referência para a análise e interpretação dos resultados numéricos correspondentes aos parâmetros do plasma ionosférico.

A Física de Plasmas superando importantes desafios da Tecnologia de Materiais

PA5

Argemiro Sobrinho
Instituto Tecnológico de Aeronáutica

A Física de Plasmas permitiu o desenvolvimento de importantes tecnologias empregadas nos mais diversos setores, em especial na área de Engenharia de Materiais. Nesta palestra, o Professor Argemiro Soares da Silva Sobrinho, responsável pelo Laboratório de Plasmas e Processos (LPP) do ITA, apresentará as principais e mais atuais tecnologias a plasma empregadas em diversas áreas, das quais é possível destacar: Processos a Plasmas, Engenharia de Superfície, Filmes Finos e Rebrimentos, Sensores e Dispositivos, Destruição de Resíduos, Produção de Combustível Verde, Tratamento de Efluentes Sólidos e Líquidos e Processos a base de Ozônio.

Palestra de Fechamento

Solvent Effect on the Electronic and Structural Properties of Ru complexes as Water-splitting Catalyzes

PA6

Kaline Rabelo Coutinho

Universidade de São Paulo

Most molecular ruthenium catalysts are based on polypyridine ligands, which can tolerate harsh oxidation conditions and present high stability towards hydrolysis. Changing one of the pyridine ligands for a water molecule, leads to the formation of the class of Ru/aqua complexes that can easily lose electrons and protons to form reactive high oxidation state Ru=O species. Then, these Ru/aqua complexes have been widely used as redox catalysts in the water-splitting reaction, producing clean fuels as products, like H₂ and O₂. The understanding of the electronic properties of these complexes in different oxidation states and in different protonation conditions in aqueous solution is a fundamental task for a better description of the artificial water-splitting reaction. We studied the five derivative complexes of [RuII(H₂O)(pyridine)(bipyridine)₂]²⁺ in gas phase and in aqueous solution. We have applied a multi-scale method, a sequential QM/MM approach to calculate several electronic properties, such as the solute polarization due to the solvent, the energy of the valence orbitals that affects the oxidation process, the excitations energy of the valence electrons that describe the light harvest process and the excitation energies of the core electrons that identify the chemical environment of each atom of the catalyst. Our results are compared with experimental data of pK_a, redox potential, UV-visible absorption spectrum and X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) and presented a good agreement.

Minicurso

Introdução à Computação Quântica

M01

Lachlan Thomas Belcher
Instituto Tecnológico de Aeronáutica

A COMPUTAÇÃO QUÂNTICA é a ciência que estuda as aplicações das teorias e propriedades da MECÂNICA QUÂNTICA na Ciência da Computação. Dessa forma seu principal foco é o desenvolvimento do computador quântico.

Na computação clássica o computador é baseado na arquitetura de Von Neumann que faz uma distinção clara entre elementos de processamento e armazenamento de dados, isto é, possui processador e memória destacados por um barramento de comunicação, sendo o seu processamento sequencial.

Entretanto os computadores atuais possuem limitações, como por exemplo na área de Inteligência Artificial (IA), onde não existem computadores com potência ou velocidade de processamento suficiente para suportar uma IA avançada. Dessa forma surgiu a necessidade da criação de um computador alternativo dos usuais que resolvesse problemas de IA, ou outros como a fatoração em primos de números muito grandes, logaritmos discretos e simulação de problemas da Física Quântica.

A Lei de Moore afirma que a velocidade de um computador é dobrada a cada 12 meses. Assim sempre houve um crescimento constante na velocidade de processamento dos computadores. Entretanto essa evolução tem um certo limite, um ponto onde não será possível aumentar essa velocidade e então se fez necessária uma revolução significativa na computação para que este obstáculo fosse quebrado. E assim os estudos em Computação Quântica se tornaram muito importantes e a necessidade do desenvolvimento de uma máquina extremamente eficiente se torna maior a cada dia.

O minicurso terá uma duração de 5 horas, tratando dos seguintes temas:

Descrição:

- *Classical bits vs Quantum bits;*
- *A esfera de Bloch;*
- *Interferência, Paralelismo e Emaranhamento Quântico;*
- *Circuitos Quânticos;*
- *Algoritmos Quânticos.*

Painéis

Cosmology in the Brans-Dicke-Rastall gravity

P01

Manoel Vicente de Souza Filho¹;Thiago Roberto da Possa Caramês¹

¹Universidade Federal Fluminense (UFF)

In this work, we study some consequences of the Brans-Dicke-Rastall theory in the cosmological context. This theory consists of an attempt to combine aspects of Brans-Dicke gravity with the non-conservative property of Rastall's theory. In this scenario, the gravitational field is the result of both the distortion of space-time geometry and the presence of a dynamic scalar field, known as dilaton. Furthermore, it is assumed that the energy-momentum tensor is no longer subject to the same conservation law as in General Relativity. In our study, the main purpose is to obtain the numerical solution of the system of non-linear equations that describe the dynamics of the model. Besides, we intend to compare the evolution of the cosmological background obtained from the dynamic equations with observational data from the so-called Hubble parameter.

UTILIZAÇÃO DE LEVANTAMENTOS BIBLIOGRÁFICOS PARA ANÁLISE DO PLASMA EM ASTROFÍSICA

P02

Caetano Fermino¹;Maiara Mendonça¹, Prof. Me Angélico Arthur
Issa Mangili¹, Prof. Me. Thiago Pignatti de Freitas¹

¹Centro Universitário do Sagrado Coração - UNISAGRADO, Bauru, Brazil.

O plasma pode ser encontrado em todo sistema solar, como em ventos solares que atingem o planeta Terra diariamente, mas sobretudo vale ressaltar os diversos níveis de temperatura, O plasma é encontrado em várias formas no universo, como em cavidades magnéticas em torno

de cometas, magnetosferas planetárias, atmosfera solar, heliosfera externa e discos de acreção em torno de objetos compactos. (1,2) A análise do plasma no universo demonstra as infinitas possibilidades de aplicação de suas características, como a análise do sol para estudos de seus mecanismos internos e compreender as reações que desencadeiam, baseada nessa compreensão, delimitamos eventos cósmicos impactando estrelas, galáxias e tudo estudado no universo.(3,4) o trabalho busca investigar as propriedades dos plasmas em astrofísica e compreender fenômenos cósmicos, incluindo radiação planetária, manchas solares, explosões solares, ventos estelares, emissões de rádio e raios cósmicos. Para isso, serão usadas análises teóricas, modelagem computacional e observações astronômicas, focando nas interações entre plasma e campos magnéticos em estrelas, galáxias e outros objetos.(5) O plasma é estudado em laboratório para entender seu comportamento e sua aplicação em fusão nuclear controlada, visando desenvolver tecnologias de energia limpa e sustentável. Além da fusão termonuclear, o estudo do plasma tem implicações em áreas como astrofísica, fontes de energia alternativa, processamento de materiais e medicina. A física do plasma é crucial para avanços científicos e tecnológicos, com potenciais benefícios para a humanidade.(6) O estudo investiga plasmas em astrofísica e seus fenômenos em escalas cósmicas. Analisando processos como radiação planetária, manchas solares, ventos estelares, emissões de rádio e raios cósmicos, visa avançar o conhecimento do universo. Utilizando abordagem teórica, modelagem computacional e observações astronômicas, oferece insights valiosos para a compreensão desses processos e a evolução do universo. O embasamento em fontes acadêmicas confiáveis fortalece as conclusões alcançadas da importância significativa do plasma no contexto da inovação tecnológica atual.

[1] Universidade College London. Department of Space and Climate Physics. Spac

[2] Piel, Alexander. Plasma Physics: The Plasma Environment of Our Earth

[3] GURNETT, D. A.; BHATTACHARJEE, A. Introduction to Plasma Physics: With Space and Laboratory Applications. Departamento de Física e Astronomia, Universidade de Iowa, Ano de Publicação. 2005.

[4] Frontiers. O universo do plasma: um tema científico coerente para

a Voyage 2050; *Frontiers in Astronomy and Space Sciences*

[5] *REVISTA ASTRONOMY*. *Astronomy Basics: The Plasma of the Sun*

[6] FAPESP - Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Modelo prediz cenários para geração de energia por meio da fusão nuclear

Agradecimento: UNISAGRADO, ITA, EFITA

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

P03

Sergio Levy Nobre dos Santos¹; M. R. Andrade¹; Milton, João¹;
Chaves, André²; R. N. Costa Filho¹; Rabelo, Diego¹

¹Universidade Federal do Ceará - UFC, ²Instituto Tecnológico da Aeronáutica - ITA

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.

**THE TRIGGERING OF NEOCLASSICAL TEARING
P04 MODES BY SAWTEETH IN THE TCABR TOKAMAK**

Gustavo Antonio Pires Vaccani¹; Marisa Roberto ¹, Gustavo Paganini
Canal ²

¹ Instituto Tecnológico de Aeronáutica, ²Universidade de São Paulo

This work addresses a pending issue in developing thermonuclear fusion: the triggering of neoclassical tearing modes (NTMs) by sawteeth (ST) in tokamak plasmas. Although ST and NTMs have been intensively investigated in recent decades, a quantitative and validated theory of ST-triggered NTMs is yet to be developed. Specifically, it is not possible to reliably predict the triggering of NTMs in scenarios of ITER operation with high plasma current and sustained operation with power gain factor $Q = 10$. In this work, a study is carried out that aims to an improvement of the current understanding of the physical mechanisms behind the triggering of NTMs by ST, combining a theoretical/computational approach in the TCABR tokamak, which is operated by the Plasma Physics Laboratory of the Institute of Physics from the University of São Paulo. The M3D-C¹ code, a state-of-the-art code developed at the Princeton Plasma Physics Laboratory, USA, is used to model plasma evolution. It is expected that the knowledge acquired during this work will lead to the development of strategies that inhibit the coupling between ST and NTMs. This model can then be used predictively to indicate safer operating zones with higher plasma pressure in tokamaks.

Keywords: Thermonuclear fusion, neoclassical tearing modes, sawteeth oscillations, tokamaks, plasma physics

Simulação do protocolo de teleporte quântico com graus de liberdade da luz com feixes tensos

P05

João Marcelo Moreira Gama¹;Huguenin, José Augusto Oliveira¹

¹ UFF - Universidade Federal Fluminense

Este trabalho apresenta uma simulação em Python do fenômeno quântico conhecido como "teleporte quântico", um processo de transferência instantânea de estados quânticos entre partículas distantes. O teleporte quântico desempenha um papel fundamental na computação quântica e na comunicação quântica, apresentando aplicações promissoras na área de criptografia quântica e transmissão de informações quânticas. O TCC começa fornecendo uma revisão dos principais conceitos da teoria quântica necessários para entender o teleporte quântico. Isso inclui noções de superposição, emaranhamento, e medição quântica, que são os pilares fundamentais para a compreensão do fenômeno. Em seguida, a simulação é implementada em Python, utilizando a biblioteca NumPy para manipulação de matrizes e operações vetoriais, bem como outras bibliotecas relevantes para a análise dos resultados. O programa simula um sistema quântico composto por duas partículas emaranhadas, geralmente referidas como partícula A e partícula B. O processo de teleporte quântico é dividido em três etapas principais: preparação, envio e recepção. Na etapa de preparação, o estado quântico da partícula A é preparado em um estado específico que se deseja teletransportar para a partícula B. Na etapa de envio, é realizada uma medição conjunta entre a partícula A e uma partícula auxiliar C, e os resultados da medição são enviados para a partícula B através de um canal clássico. Finalmente, na etapa de recepção, a partícula B aplica uma série de operações quânticas com base nas informações recebidas para reconstruir o estado quântico original. Após a implementação, diversas simulações são executadas, variando parâmetros como o tipo de estado quântico inicial, o grau de emaranhamento entre as partículas, e a presença de erros na comunicação clássica. Os resultados são analisados e discutidos, evidenciando como o teleporte quântico é um processo eficiente e robusto, mesmo diante de imperfeições na transmissão de informações. Por fim, são apresentadas as conclusões do trabalho, destacando a importância do teleporte quântico como uma ferramenta poderosa na computação e comunicação quântica. Além disso, são apontadas possíveis extensões

da simulação e futuros aprimoramentos, como a consideração de sistemas com múltiplas partículas emaranhadas e a implementação de correções de erros quânticos.

Palavras-chave: Teleporte Quântico, Computação Quântica, Simulação em Python, Emaranhamento Quântico, Criptografia Quântica.

P06 **ANÁLISE ESPECTRAL DA COMPOSIÇÃO QUÍMICA DE METEOROS INCIDENTES NO HEMISFÉRIO SUL**

Matheus Agenor Gomes da Costa¹;Rodolfo Langhi¹

¹ Universidade Estadual Paulista

Enquanto as partículas de poeira interplanetária podem ser estudadas in situ por detectores de poeira de espaçonaves ou coletas de material na estratosfera, a única maneira de estudar meteoroides individuais de dimensões milimétricas a centimétricas é observando sua interação com a atmosfera terrestre. O estudo da espectroscopia de meteoros pode ser usado como uma ferramenta poderosa para comparar as abundâncias químicas entre correntes de meteoros e seus corpos parentais, usando a análise do espectro de luz de meteoros para deduzir as abundâncias químicas elementares em meteoroides. Infelizmente, no Brasil, não temos uma grande adesão dos pesquisadores neste tema e por este motivo o trabalho desenvolvido pode ser considerado pioneiro. Para esta pesquisa, foi instalada uma estação de monitoramento em vídeo de meteoros, como as usadas pela BRAMON (Brazilian Meteor Observation Network) no âmbito do projeto PATRICIA (PATRulhamento Investigativo do Céu por Imageamento Automático de meteoros), com uma rede de difração acoplada à câmera, de modo que a captura de um meteoro possa revelar o espectro do seu rastro. Para a captura foi usada uma câmera de vigilância Samsung modelo SCB 2000 e uma rede de difração de 500 linhas/mm. Para o monitoramento, usamos o software UFOCapture e UFOAnalyzer disponibilizados pela BRAMON e para a análise dos registros em vídeo, foi usado o software Real-time Spectroscopy (Rspec), para auxiliar nas análises da composição química dos meteoros incidentes registrados pela nossa estação de patrulhamento. Em nossa estação, a câmera fica ativa sem parar; quando um movimento é detectado pela câmera ela começa a

capturar o vídeo; o software responsável por esta operação é o UFO-Capture. Quando ele detecta um meteoro, ou movimento qualquer, a câmera captura um vídeo e separa um frame em formato de fotografia para que se facilite a análise dos dados. Ainda, para estimar a magnitude de um meteoro, faz-se comparação com a magnitude de uma estrela conhecida, e adotamos este método nas análises que fazemos e faremos. No dia 02 de janeiro de 2023, às 6:53 (UTC), a câmera do vinculada ao presente Projeto fez a captura de um meteoro relativamente brilhante. Por meio desta captura, e com o auxílio do software Rspec, foi possível fazer uma análise do espectro emitido pela ablação do meteoro, e estudando os picos de intensidade, foi possível descobrir a composição química do meteoro. Observamos a presença de Ferro, Cromo, Cálcio, Níquel, Magnésio, Nitrogênio e Oxigênio, todos em suas formas neutras, exceto pelo Nitrogênio, que foi encontrado em sua forma ionizada.

ANÁLISE DO PROCESSO DE APRENDIZAGEM DA DISCIPLINA DE FÍSICA PELOS DISCENTES DO ENSINO MÉDIO NO CENTRO DE ENSINO GRAÇA ARANHA

P07

Pedro Henrique Ferreira Fister¹, Fabiano Sousa Lira ¹

¹ Universidade Estadual da Região Tocantina do Maranhão

A dificuldade na matéria de Física é muito recorrente e deve-se fazer uma análise e buscar entender os obstáculos que os alunos enfrentam para compreender os conceitos dessa disciplina. Alguns desafios enfrentados pelos alunos incluem, possivelmente, a falta de compreensão dos princípios básicos, a dificuldade em visualizar conceitos abstratos, a falta de aplicação prática da matéria e a inadequação do método de ensino. A falta de compreensão dos princípios básicos é um problema comum, já que muitos alunos geralmente não têm uma base sólida em Matemática e Ciências, o que dificulta o entendimento de conceitos mais complexos. A dificuldade em visualizar conceitos abstratos também é um problema, já que muitos conceitos físicos são difíceis de se imaginar ou visualizar. Partindo disso, a pesquisa objetiva realizar um levantamento das possíveis dificuldades que o aluno encontra na

matéria de Física, e com base na teoria construtivista de David Ausubel. Assim, a pesquisa terá caráter quali-quantitativo pautada em um levantamento bibliográfico e, para compor a metodologia, será realizada uma pesquisa no CEGA, localizado no município de Imperatriz - MA. Após a análise e o entendimento dos resultados será proposta a utilização da teoria de aprendizagem proposta por David Ausubel, no qual ele enfatiza a importância de relacionar novos conceitos com os conhecimentos prévios dos alunos para que o aprendizado seja significativo.

P08 **Studies on the reactivity of (TiO₂)_n clusters, n=1-10.**

Letícia Carolaine Silva Faria¹

¹ Instituto Tecnológico de Aeronáutica

The search for highly stable molecules/clusters is of great interest in the development of nanodevices. Nowadays, clusters with few atoms and highly tunable magnetic and electronic properties can be synthesised on a laboratory scale. With the aim of developing TiO₂ clusters as photocatalysts for CO₂ reduction, the present study carries out a survey of the properties of small aggregates of titanium dioxide. Local reactivity parameters are analysed for each of the Ti atoms present in the clusters, selected on the basis of the localities of maximum and minimum adsorption. In order to qualitatively evaluate these localities, an analysis of their potential interaction energies with carbon dioxide was carried out. The reactivity parameters studied included the relative electrophilicity indices (\pm), which estimate the ability of a molecule to act as an electrophile through a balance between its ability to donate or accept electrons. In addition, the Fukui indices, which serve as local parameters for the electrophilic tendencies of each atom in the cluster, were studied. The calculations were carried out using the Density Functional Theory (DFT) method within the B3LYP approximation, using the 6-31G(d) People basis set. We observed a remarkable stability in the clusters of (TiO₂)₄ and (TiO₂)₇, classifying them as magic numbers according to the global and local parameters, and these show agreement with the adsorption energy, since being structures with less reactivity, they present a low adsorption energy with CO₂.

Estudo ab initio da presença de éxcitons-polaritons hiperbólicos em materiais anisotrópicos bidimensionais.

P09

Diana Maria Navroski Thomen¹, Andrey Chaves², André Chaves¹,
Lara Teles¹

¹ Instituto Tecnológico de Aeronáutica, ² Universidade Federal do Ceará

A obtenção do primeiro material bidimensional (2D), o grafeno, desencadeou inúmeras pesquisas envolvendo outros materiais 2D. Dentre os materiais que possuem sua estrutura em camadas, um que vem ganhando grande destaque recentemente é o fosforeno, obtido a partir do Fósforo Negro (BP). Juntamente com suas propriedades eletrônicas únicas, o fosforeno é um dos exemplos mais proeminentes de materiais anisotrópicos, considerando apenas as coordenadas no plano. Essa anisotropia é frequentemente refletida nas propriedades ópticas do material, resultando em estados plamônicos com diferentes frequências para polarizar a luz, considerando cada direção e, assim, tem-se a dispersão de um plasmon-polariton na forma hiperbólica. Polaritons hiperbólicos no plano, naturais em materiais em camadas, já foram estudados e demonstrados em MoO₃ e WTe₂, que são baseados em ressonâncias de fônon e plasmon, respectivamente. Em trabalhos experimentais recentes, foi previsto que a monocamada de BP hospeda naturalmente éxciton-polaritons hiperbólicos, o que abriu uma nova perspectiva de polaritons hiperbólicos naturais no plano, baseados em éxcitons[1]. No entanto, a literatura ainda carece de estudos sobre esse tema, levando em consideração o ponto de vista teórico dos cálculos ab initio. Neste trabalho foram estudadas 5 estruturas de fosforeno, sendo elas a monocamada e os quatro tipos de bicamada. Todos os cálculos foram realizados usando o VASP (Vienna Ab initio Simulation Package). As estruturas de bandas foram calculadas usando os métodos DFT e HSE06. As propriedades ópticas foram obtidas usando o método GW+BSE, para que fosse possível simular a interação elétron-buraco. Como resultados, a priori foram realizados cálculos de DFT e HSE para analisar o comportamento eletrônico e óptico das estruturas mencionadas. Estas análises iniciais foram compatíveis com dados encontrados na literatura. Na sequência foram realizadas as análises de função dielétrica com a presença de éxcitons em monocamada de fósforo negro. A partir destas foi observado fortes indícios de que o fosforeno hospeda naturalmente um éxciton-polariton

hiperbólico (HEP). Esses indícios ficaram evidentes ao avaliar o pico negativo nas respostas da parte real da função dielétrica, avaliando as duas direções no plano. Após isso, foram analisadas as respostas ópticas dos vários tipos de empilhamento de bicamadas e notou-se que esse efeito pode ser controlado ao trocar o tipo de empilhamento. Ainda, neste trabalho, foi avaliado outras formas de controlar este efeito, assim foi estudado o comportamento da bicamada do tipo AB com aplicação de strain na direção perpendicular ao plano, sendo que esta análise possibilitou visualizar que a aplicação de strain é capaz de mover os picos das respostas ópticas. Desta forma, foi observado também que o efeito de HEP pode ser manipulado, o que indica versatilidade em possíveis aplicações. Os resultados obtidos abrem caminhos para estudos de sistemas anisotrópicos e suas propriedades ópticas, usando métodos matemáticos como o BSE para simular o comportamento excitônico nessas estruturas.

References 1. Franjie Lei, et al, Nature Communication 12, 5628 (2021) 2. L. G. Ferreira, et al, Phys. Rev. B 78, 125116 (2008); ibid AIP Adv. 1032119 (2011)

CARÁTER RADICALAR E AROMATICIDADE DE ACENOS SUBSTITUÍDOS

P10

Kássio Henrique Souza Silveira^{1,2}, Chagas, Júlio Cesar Verli¹; Santos, Luan G. F. dos¹; Machado, Francisco Bolivar Correto¹

¹ Instituto Tecnológico de Aeronáutica, ² Instituto Federal de São Paulo

Estudos apontam o potencial de poliacenos para aplicação como semicondutores orgânicos, a partir do desenvolvimento de uma nova geração de dispositivos fotovoltaicos e transistores de grande importância para a indústria aeroespacial [1]. A estabilidade destes sistemas está fortemente associada à aromaticidade. Os compostos aromáticos orgânicos têm com seu arquétipo estrutural e eletrônico a molécula de benzeno [2] e podem ser classificados como aromáticos, não-aromáticos e anti-aromáticos por diversos tipos de descritores baseados em propriedades específicas [3]. Métodos computacionais de estrutura eletrônica são uma ferramenta importante para caracterizar estruturas moleculares, e em particular, no caso dos poliacenos obtém-se informações importantes como densidade eletrônica, índices de aromaticidade, gaps de

energia e caracterização dos estados fundamentais e excitados, entre outras propriedades. O presente estudo, focou no estudo de alguns acenos, benzeno, naftaleno e antraceno, tanto no estado pristino, como em derivados obtidos pela substituição de dois átomos de hidrogênio por dois átomos de oxigênio. Propriedades de estabilidade, aromaticidade e caráter radicalar destas estruturas foram analisadas visando possíveis aplicações e sínteses. Estes estudos foram realizados primeiramente otimizando as geometrias do estado fundamental de simetria singleto e, em seguida, realizando cálculos pontuais do estado excitado de simetria de spin tripleto para calcular o gap singleto-tripletto. Para tal utilizou-se o método da teoria do funcional de densidade (DFT), UB97XD com o conjunto de funções base def2-TZVP. A aromaticidade foi caracterizada usando o descritor geométrico HOMA (Harmonic Oscillator Model of Aromaticity) [4], e o caráter radical através do cálculo do número de elétrons desemparelhados pelo método Fractional Occupation Number Weighted Electron Density (FOD) [5]. Estes resultados foram calculados e analisados pelos softwares Orca, Gaussian 09 e Multwfn. Os principais resultados mostram que é possível modular os acenos tanto para se obter maior ou menor estabilidade, como a aromaticidade e o caráter radicalar. Verificou-se que no caso do antraceno, a substituição na posição para no anel central aumenta a estabilidade. Outras substituições levam para gaps dentro da região visível, e assim, os sistemas substituídos podem ser classificados como semicondutores, isolantes ou condutores. (Agradecimentos: FAPESP, CNPq, ITA e IFSP).

Referências Bibliográficas:

- [1] BENDIKOV, M.; DUONG H. M.; STARKEY, K.; HOUK, K. N.; CARTER, E. A.; WUDL, F. Oligoacenes: theoretical prediction of open-shell singlet diradical ground states. *J Am Chem Soc.* v. 126 n. 24 p. 7416-7, 2004.
- [2] OLIVEIRA, K. T. Estudos sintéticos e teóricos sobre anulenos e baquenolidas. Tese (Doutorado) - Universidade de São Paulo, Brasil, 2006.
- [3] PINHEIRO, M.; DAS, A.; AQUINO, A. J. A.; LISCHKA, H.; MACHADO, F. B. C. Interplay between aromaticity and radicaloid character in nitrogen-doped oligoacenes revealed by high-level multi-reference methods. *The Journal of Physical Chemistry A*, v. 122, n.

49, p. 9464-9473, 2018.

[4] KRYGOWSKI, T. M.; CYRANSKY, M. K. Structural Aspects of Aromaticity. *Chem. Rev.* v. 101, n. 5, p. 1385-1420, 2001.

[5] BAUER, C. A.; HANSEN, A.; GRIMME, S. The Fractional Occupation Number Weighted Density as a Versatile Analysis Tool for Molecules with a Complicated Electronic Structure. *Chem. Eur. J.* v. 23, n. 25, p. 6150-6164, 2017.

Emissores Quânticos em Materiais Anisotrópicos: Efeitos de Acoplamento com modos de superfície

P11

Ana Beatriz Monteiro dos Santos¹, Filho, M. G. F. L¹; da Costa, D. R²; Chaves, A. J. C¹.

¹ Instituto Tecnológico de Aeronáutica, ² Universidade Federal do Ceará

Um dos objetivos da fotônica quântica integrada é interfacear qubits estacionários, utilizados em computação quântica, com fótons como qubits mensageiros, cuja meta é obter conectividade escalável de nós quânticos. Um dos principais ingredientes em sistemas de comunicação quântica são fontes de fótons únicos, que podem ser conseguidos através de emissores quânticos (EQs). [1,2] Um conjunto de materiais promissores para esse campo são os materiais bidimensionais, como dicalcogenetos de metais de transição ou nitretos de boro, cujos defeitos atuam como EQs. Esses EQs podem ter sua taxa de emissão modificada como consequência do Efeito Purcell quando acoplados com modos de cavidades e guias de onda em circuitos fotônicos. [3, 4] Nesse trabalho, propomos que modos de superfície de plasmon-polaritons em materiais anisotrópicos, como o fósforo negro, podem aumentar a taxa de emissão de fótons únicos de emissores quânticos. Como resultado preliminar, mostraremos, a partir da função Loss calculada utilizando o formalismo da matriz de transferência, os modos de superfície de plasmon-polaritons em heteroestruturas contendo fósforo negro com diferentes espessuras.

Referências:

[1] H. Z. J. Zeng, M. A. P. Ngyuen, X. Ai, A. Bennet, A. S. Solnstev, A. Laucht, A. Al-Juboori, M. Toth, R. P. Mildren, R. Malaney, and I. Aharonovich. *Optics Letters* 47(7), 1673 (2022);

[2] T. Gao, M. von Helversen, C. Antón-Solanas, C. Schneider, e T.

- Heinde. npj 2D Materials and Applications 7(1), 4 (2023);
- [3] H. Iwase, D. Englund, and J. Vučković. Optics Express 18(16), 16546 (2010);
- [4] B. Romeira e A. Fiore. IEEE Journal of Quantum Electronics 54(2), 1 (2018).
-

Computational Study of Substituents Effects on Pincer Ligands for CO₂ hydrogenation

P12

Ana Beatriz Rocha Guimarães¹; Braga, Ataulpa ¹

¹ Universidade de São Paulo

The conversion of CO₂ into higher value-added compounds such as oxygenated molecules (alcohols, carboxylic acids, and esters) is of significant financial, environmental, and industrial interest while representing a challenge for catalysis. The most significant difficulty is the optimal integration of the catalytic functionalities for the molecular hydrogen activation and CO₂ hydrogenation, linked to the stability of the catalyst. PNP-type pincer ligands have attracted significant attention for their ability to support highly active catalysts through a wide variety of transformations. Therefore this study aims to investigate the use of a PNP pincer ligand to support a Ruthenium catalyst for CO₂ hydrogenation using DFT calculations to elucidate reaction mechanisms. Furthermore, 9 different substituents (varying between electron donor and withdrawing groups) were employed to investigate their electronic effects on the catalytic activity. The electron donor substituents presented the best results, minimizing the transition state energy for the limiting step.

Moiré Excitons in Biased Twisted Bilayer Graphene under Pressure

P13

Victor Gabriel Morele Duarte¹; Costa, Diego²; Peres, Nuno³; Teles, Lara¹; Chaves, André¹

¹Instituto Tecnológico de Aeronáutica, ²Universidade Federal do Ceará, ³ Universidade do Minho

Using a tight-binding model, we report that under high pressure, twisted graphene can open a gap, that can be further enhanced by the presence of a layer bias. The valley edges are located between the M and K points of the superlattice Brillouin Zone, with the band-gap reaching values up to 100 meV. Using the Semiconductor Bloch Equations formalism, we obtain an enhancement of the bandgap due to the electron-electron interaction. From the solution of the corresponding Bethe-Salpeter equation, we show that this system support highly anisotropic Moiré Excitons whose electrons and holes are strongly hybridized between different layers. The optical spectra reveal a rich quantity of absorption peaks.

Trigonal warping effect on the zitterbewegung of wave packet propagation in bilayer graphene

P14

Sergio Levy Nobre dos Santos¹, Milton, João¹; Chaves, André²; Peeters, François³; Rabelo, Diego¹

¹ Universidade Federal do Ceará - UFC, ² Instituto Tecnológico da Aeronautica - ITA, ³ University of Antwerp - UA

Analyzing the low-energy band structure of AB-stacked bilayer graphene, one notices the presence of three Dirac mini-cones around the K or K valleys [3,4], whose physical reason is linked to the well-known trigonal warping effect. This effect is responsible for band structure asymmetry and implies a non-zero Berry curvature with opposite signs in the two inequivalent valleys when the time-reversal symmetry is preserved, i.e. $\Omega(\mathbf{K}) = \Omega(\mathbf{K}')$, which in turn leads to a transversal anomalous velocity for the charge carrier dynamics. In this context, we theoretically investigate the time evolution of a Gaussian wavepacket in order to verify the role of the trigonal warping in the wave packet dynamics propagating in a bilayer graphene sample. Expectation values of the position (x, y) of center-of-mass and the total probability densities of

the wave packet are numerically calculated by solving the time-dependent Schrödinger equation using a numerical framework based on the split-operator technique within the Dirac approach for bilayer graphene continuum Hamiltonian taking into account the effects mentioned above due to the skew interlayer hoppings. Transient spatial oscillations due to the effect known as zitterbewegung [1,2] are discussed for different initial pseudospin polarizations, wave packet widths, initial wave packet energies and momenta.

[1] - S. M. Cunha , D. R. da Costa , G. O. de Sousa , A. Chaves , J. M. Pereira and G. A. Farias. Phys. Rev. B, 99:235424, (2019).

[2] - I. R. Lavor, D. R. da Costa, A. Chaves, S. H. R Sena, G. A. Farias, B. Van Duppen and F. M. Peeters. Journal of Physics: Condensed Matter, 33(9):095503, (2020).

[3] - A. Knothe and V. Fal'ko. Phys. Rev. B, 98:155435, (2018).

[4] - E. McCann and M. Koshino. Reports on Progress in Physics, 76(5):056503, (2013)

Astrofísica no Novo Ensino Médio: Uma abordagem prática da Matéria Escura no contexto de uma disciplina eletiva

P15

Matheus Agenor Gomes da Costa¹, André Luís Gazoto Niemeyer²,
Lincon Rodrigo Alves Pereira², José Brás Barreto de Oliveira¹

¹Universidade Estadual Paulista, ²Escola Estadual José Aparecido Guedes de Azev

Os conteúdos de física trabalhados no ensino médio têm sua base pautada principalmente nos tópicos de física clássica (GARCIA, 2015), apesar de ser amplamente consolidado a importância de se ensinar tópicos de Física Moderna e Contemporânea (FMC) nos anos finais da educação básica. Ostermann e Moreira (2001) defendem que é perfeitamente possível ensinar FMC no ensino médio (EM), tanto quantitativa quanto qualitativamente, pois os alunos são capazes de assimilar esse tipo de conteúdo. Oliveira et al. (2007) ainda mostram que muitas vezes, a falta de abordagem de conteúdos de FMC no EM se dá pela falta de tempo dos professores para preparar aulas, e em alguns casos

pela falta de interesse em abordar esses temas. Nas últimas décadas, os avanços científicos e tecnológicos vêm despertando nos jovens olhares mais atentos sobre temas relacionados às ciências. Contudo, o ensino de ciências, em particular a física, não tem acompanhado esse desenvolvimento e se torna cada vez mais distante no que diz respeito à pesquisa científica mais moderna (OLIVEIRA; VIANA; GERBASSI, 2007). Pereira e Ostermann (2009), realizaram um levantamento bibliográfico de 102 artigos publicados entre 2001 e 2006 em revistas de ensino de ciências, nacionais e internacionais. Ao dividir os trabalhos em 4 categorias, sendo elas; bibliografia de consulta para professores, propostas didáticas testadas em sala de aula, levantamento de concepções e análise curricular. Em seu levantamento, obtiveram 52 trabalhos, referindo-se a bibliografia de consulta para professores e 50 trabalhos divididos nas outras categorias. Constataram por meio disso, que apesar de ser observado um aumento em trabalhos referentes a resultados de pesquisa, a maioria ainda se refere a bibliografia de consulta, e embora haja um volume apreciável de propostas didáticas, há poucos trabalhos sobre a construção de conhecimento do aluno em sala de aula. Tendo isto em mente, nosso Objetivo Geral foi desenvolvimento e aplicação uma atividade para complementar o ensino, visando a formação de alunos do ensino médio através do estabelecimento de relações sociais entre os alunos, salientando a importância do trabalho em equipe e a colaboração no desenvolvimento científico ao executarem em conjunto uma atividade que aborda aspectos da História da Ciência (HC) e Natureza da Ciência (NdC), desenvolvimento da ciência moderna, no âmbito do tópico principal e a interdisciplinaridade da física com a astronomia e matemática ao calcularem a quantidade de Matéria Escura presente em uma estrela.. Para isto aplicamos uma atividade na qual os alunos deveriam calcular a massa de uma estrela considerando a existência de Matéria Escura.

Tailoring quantum emission through Purcell effect engineering using plasmon-polaritons

P16

Leonardo Lugarini¹, J. C. Chaves, André¹

¹Instituto Tecnológico de Aeronáutica

Quantum emitters are at the heart of quantum communication, helping in fields like cybersecurity with quantum key distribution for quantum cryptography applications, also they are important in fields like remote sense and DNA sensing. A way of increasing the decay rate of quantum emitters is through the Purcell effect, i.e., changing the dielectric environment. Here, we will explore the coupling of the quantum emitter with surface plasmon-polaritons, that are located in the interface between a dielectric and a metal. These modes, hybrids of electromagnetic fields and matter degrees of freedom, also happen in bidimensional materials, such as graphene (single layer sheet of carbon atoms) or black phosphorus (anisotropic semiconductor). Here we will compare the Purcell effect due to plasmon-polaritons in a typical metal and graphene, showing the great promise that 2D materials have in enhancing quantum emitters.

Características do modelo LArQL e suas perspectivas

P17

Valéria Cristina Souza do Vale¹, Marinho, Franciole¹

¹Instituto Tecnológico de Aeronáutica

A quantificação adequada da produção de cargas elétricas e luz de cintilação provocadas pela passagem de partículas relativísticas carregadas em argônio líquido é um procedimento crucial para a descrição adequada da operação de experimentos em Câmaras de Projeção Temporal de Argônio Líquido (Liquid-Argon Time Projection Chambers - LArTPCs) dedicados à física de neutrinos. Apresentaremos neste trabalho as principais características e as perspectivas para o aprimoramento do modelo fenomenológico LArQL, proposto para oferecer uma expressão de anticorrelação adequada entre a produção Q de cargas livres e L de luz de cintilação. Ambas quantidades possuem uma dependência entre a energia depositada por unidade de comprimento ($\frac{dE}{dx}$) e o campo elétrico (ϵ) aplicado no volume criogênico. Este modelo, para determinar Q e L, utiliza-se do número médio do total de

quanta produzidos, de um fator de recombinação proveniente do modelo de Birks (de forma a considerar as cargas de escape em regiões de baixa intensidade do campo elétrico) um fator de correção $f_{\text{corr}}(\epsilon, \frac{dE}{dx})$ dependente de um termo Wion para denotar a energia média dispendida a cada separação iônica.

P18 Effect of the precursors flow in the film growth of Al₂O₃ deposited by atomic layer deposition using TMA and water

Júlia Karnopp¹, Azevedo, Nilton ¹; Sagás, Julio C. ², Pessoa, Rodrigo S. ¹

¹Instituto Tecnológico de Aeronáutica. ² Universidade do Estado de Santa Catarina

Thin films are widely used to modify the materials surface properties. Among the vapor phase deposition methods is atomic layer deposition (ALD). This technique consists of layer-by-layer deposition through self-saturating chemisorption of precursors. The ALD operates in cycles. For Al_2O_3 deposition, each cycle consists of exposing the substrate to a metallic precursor, purging, surface oxidation by an oxidizing precursor, and purging again. Alumina, Al_2O_3 , deposition using trimethylaluminum (TMA) and water is one of the most studied ALD processes. Experimental and theoretical works have been developed to study the Al_2O_3 deposition and the effect of the process parameters. However, the impact of precursor flow rate has not yet been investigated. In this work, the effect of TMA and H_2O flow rate was study. For it, a kinetic model was used with the objective of studying the chemical mechanisms that occur during the deposition. The simulations results were compared to experimental results. The results showed that increasing the TMA precursor flow the GPC (growth per cycle) increased and saturated. But, for H_2O pulse, the effect observed was opposite. With the simulations results showed the saturation behavior for both precursors. Increasing the flow, more precursor molecules can react of the surface but when there are not more available sites in surface to react the process saturated.

The Application of Surface-Wave Argon Plasma Jet in Plasma Activated Water Production

P19

Michaela Shiotani Marcondes¹, Lima, Luan¹; Miranda, Felipe²;
Koga-Ito, Cristiane²; Pessoa, Rodrigo¹

¹Instituto Tecnológico de Aeronáutica. ²Universidade Estadual Paulista

The study focuses on the analysis of plasma-activated water (PAW) using the Surfatron, an electromagnetic field applicator producing surface-wave discharges in dielectric tubes. PAW holds significant potential in fields like biomedicine and agriculture due to its cost-effectiveness. Using the Surfatron coupled with argon gas, we studied various parameters such as reflected powers, temperature changes, and water pH alongside volume loss during activation. The experiments consistently used a heat flow of 70W, revealing a stabilization pattern over 5 minutes. Findings indicate a relationship between pH levels and volume losses when water is activated using the Surfatron. Specifically, the 20mL water sample displayed the lowest pH and highest volume reduction, while the 35mL sample showed the least volume loss with the highest pH. The consistent distance between the activation source and the sample remained unchanged, ensuring the study's accuracy. The results offer deep insights into plasma-activated water and its potential applications.

Monitoring Plasma-Activated Water Parameters Over Several Weeks

P20

Luan Gonçalves de Lima¹, Shiotani, Michaela¹; Miranda, Felipe²;
Koga-Ito, Cristiane²; Pessoa, Rodrigo¹

¹Instituto Tecnológico de Aeronáutica. ²Universidade Estadual Paulista

Cold plasma offers an innovative, non-thermal, chemical-free, and environmentally sustainable approach to water activation. This study delves into the formation and properties of Plasma-Activated Water (PAW), which exhibits unique chemical alterations due to its acidic environment, notably in its redox potential, conductivity, and the creation of reactive oxygen and nitrogen species (RONS). By leveraging a surface-wave argon plasma jet, we activated deionized water for distinct intervals, and systematically tracked variations in pH, conductivity, and total dissolved salts over four weeks. Our findings highlight

that while the pH of PAW remains fairly constant, its conductivity and dissolved salt content show marked increases. Moreover, intriguing oscillatory patterns in RONS, discerned through UV-visible spectroscopy, suggest potential recombination of reactive species. PAW's distinct chemical composition and behavior underscore its promising applications in diverse areas such as microbial disinfection, agriculture, and plasma catalysis.

Modeling the magnetic field of magnetron sputtering systems

P21

Luiz Eduardo Prince Goehr¹, Alfaro, Francisco^{1,2}; Sagás, Julio César²; Duarte, Diego Alexandre¹

¹Universidade Federal de Santa Catarina, ² Universidade do Estado de Santa Catarina

Deposition by the magnetron sputtering technique consists of obtaining thin films through a metallic or insulating target being sputtered by ions produced at low pressure plasmas. The aim of the magnetron is to trap free electrons by Lorentz forces near to the target surface, contributing to increase the plasma ionization, sputtering rate and, as consequence, the film deposition rate, where the magnetic field in this device is commonly produced by a set of permanent magnets located behind the target. Past works showed the possibility to control the magnetic field geometry through an electromagnet placed inside the magnetron, which allowed a more precise control of the particles bombarding the growing film and its overall properties [1, 2]. Thus, this work investigates the computational modeling of a circular magnetron composed of permanent magnets and an electromagnet positioned around the central magnet, with the electric current of the coil varying between zero and 15 A. The device, developed in SolidWorks, for targets with a diameter of 4 inches, is 130 mm in diameter and 46 mm in height. The magnetic field (modulus and components) was investigated at a distance of 4 mm from the surface of a titanium target with COMSOL Multiphysics software as a function of the electric current in the coil and the material used for the magnetron body, where ferromagnetic ($\mu_r = 1000$) and non-magnetic steels ($\mu_r = 1$) were evaluated. The data show the increase of the magnetic field in the center of the magnetron from 35.2 to 73.3 mT after applying 15 A

to the electromagnet, considering the body produced in ferromagnetic steel, with the radius of the maximum parallel component of the magnetic field being shifted from 16.1 to 19.6 mm, contributing to the enlargement of the erosion zone and, as consequence, the increase of the target time life. The simulation of the magnetron with ferromagnetic steel, and no coil current, shows a slightly greater intensity for the central magnetic field (35.2 mT) in comparison with the device manufactured with non-magnetic steel (34.1 mT) due to the directing of the field lines toward the surface of the target caused by the ferromagnetic steel. Other effects, such as, the shift of the maximum parallel component of the magnetic field, as well as, the increasing or decreasing of this component by changing the material of the magnetron body, are negligible.

Acknowledgments: The authors thank CNPq for the financial support (grants 307408/2021-3 and 406376/2022-0). References:

[1] D. A. Duarte et al. *Revista Brasileira de Aplicações de Vácuo*, 27 (2008) 91.

[2] D. A. Duarte et al. *European Physical Journal Applied Physics*, 52 (2010) 31001.

The effects of the reactor geometry and the use of cosolvents in the biodiesel synthesis by a plasma-assisted catalytic route

P22

Júlia de Rezende Mattos¹, M. O. Palm¹, L. Y. Pavani¹, D. A. Duarte¹, R. C. Catapan¹

¹Universidade Federal de Santa Catarina

The increasing social and technological development, coupled with the growing global population, has led to a substantial demand for energy. Consequently, the search for alternative sources of energy, ones that are cleaner and renewable, has escalated in recent years. Within this context, biodiesel has been utilized in addition to or as a substitute for diesel in transportation and energy generation sectors worldwide, with the aim of minimizing environmental impacts. Biodiesel is commonly created by a process called transesterification, in which oil reacts with methanol to produce biodiesel and glycerol as products. An excess of alcohol is used in this process to boost the biodiesel production.

Routes that use the association between plasmas and catalysts can increase the levels of conversion and production of biodiesel. Plasma reactors employ electric fields to generate particle collisions within the reaction medium, resulting in a large amount of active substances. This speeds up the reaction process and boosts its effectiveness, all while maintaining room temperature. These techniques are now becoming notable in fuel synthesis because the electric discharges occurring within the liquid lead to cavitation, a phenomenon that aids in bettering the movement of reactants and enhancing mass transfer. Thus, the main objective of the project is the synthesis of biodiesel, using a plasma reactor, from the transesterification reaction of soybean oil and methanol at the molar ratio of 1:6 molar, with different experimental mixtures of catalysts, acids or basics, and acetone as emulsifier. The experiments were carried out with a plasma reactor consisting of a glass bottle associated with two electrodes, an external electrode composed of a 5mm spacing metal mesh, and an internal electrode composed of a stainless steel bar in the center. An AC autotransformer was used connected to a transformer to provide a high operational voltage (17 kV and 50 mA maximum peak) operating at 60 Hz. Applying different voltages, the transesterification process is initiated. After the reaction, the generated products move to the decanting step, where depending on the proportions placed, can vary between a few hours to a few days. With the division of the visible phases, one can remove glycerol, which by having a density higher than that of biodiesel is concentrated at the bottom of the decanter. Thus, the washing step consists of neutralizing the solution according to the catalyst used in order to produce salt and water, washing and separating the components that are not desired in the solution. After the washing step, the residues are removed and decanted again. Then the solution goes to the drying step, in an oven at approximately 105°C, in order to eliminate water atoms and remaining residues, for approximately one day. Therefore, the product is forwarded for analysis in order to define the percentage of biodiesel found [1]. In the context of the vertical reactor, the methanol passed quickly through the reactor due to the difference of density with the oil, which limited the time available for interaction between the substances. Adding acetone resulted in forming an emulsion, which increased contact between

the substances involved. The incorporation of acetone as cosolvents has been explored as a viable approach to enhance the mass transfer between oil and methanol, as well as to optimize biodiesel production through various plasma reactor configurations. On the other hand, the horizontal plasma reactor demonstrated improved mass transfer between the reactants even without acetone. While in the reaction using the vertical reactor, an ester content of 60.7% was achieved with acetone as an emulsifier, in the reaction using the horizontal reactor, an ester content of 57.9% was obtained without the use of acetone. In both experiments, 15.6 kV of voltage, 0.1% catalyst, and 30 minutes of residence time were applied. The presence of acetone has downsides like higher production expenses and makes the purification step of the product more complicated. Initial findings indicated that altering the catalyst concentration between 0.1 to 0.5% led to changes in the ester content. Two tests were conducted at a voltage of 15,6kV, a residence time of 15 minutes, and with the reactor oriented horizontally. The ester content results were 24 and 85% using 0.1 and 0.5% as catalysis mass content, respectively. Based on the setup and structure, the plasma reactor functions to enhance the movement of reactants during the transesterification process. The utilization of a horizontal reactor in plasma synthesis has emerged as a particularly appealing approach, as it eliminates the necessity for acetone to facilitate efficient mass transfer between the reacting substances. Furthermore, the impacts of plasma-applied voltage, reaction time, and catalyst concentration will be subjected to more extensive examination using a combination of experimental design and response surface methodology. Indeed, another highly interesting aspect of this new technology is the possibility of using residual oils as raw material for biodiesel production. Besides being more economical, this approach provides a suitable solution for the disposal of waste that is often inadequately discarded, causing harmful impacts on the local ecosystem. This demonstrates how technological innovation not only enhances industrial processes but can also have a significant positive impact on the sustainability and health of ecosystems.

Acknowledgments:

This work was funded by CNPq under the project 405818/2022 and by FUNDEP Rota2030, BMW Brazil Group, AVL South America and

Agora Tech Park under the project 27192*17.

References:

[1] M. O. Palm et al. “Plasma-Assisted Catalytic Route for Transesterification Reactions at Room Temperature”. *Fuel*, vol. 307, janeiro de 2022, p. 121740. DOI.org (Crossref), <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2021.121740>.

P23

Mass transfer between oil and methanol in the biodiesel production by DBD plasma assisted catalytic reactor

Lucas Yudi Pavani¹, Catapan, Rafael Camargo ¹; Palm, Maíra Oliveira ¹; Duarte, Diego Alexandre ¹; Mattos, Júlia de Rezende ¹.

¹Universidade Federal de Santa Catarina

Biodiesel is a fuel obtained through the transesterification reaction of a renewable oil, usually in the presence of a catalyst. However, due to the immiscibility of the reactants, mass transfer is reduced, consequently affecting the conversion rate. Conventional methods address this issue by combining heating with mechanical agitation, which makes the reactants miscible. Advanced methods, such as plasma, have been studied to achieve milder temperature conditions and reduced reaction time. This study aims to produce biodiesel from soybean oil using a catalytic route assisted by plasma and to find an optimal condition for mass transfer between the reactants. To achieve this, conditions that promote the formation of microemulsions between soybean oil and methanol are being analyzed. The emulsions underwent analysis using spectrophotometry, absorbance, and optical microscopy. The methodology involves a flow reactor constructed with a glass tubular reactor in which two electrodes are placed: an external stainless steel mesh and an internal cylindrical stainless steel electrode, both connected to a high-voltage source adjacent to a voltage regulator. The reactants are injected into the reactor using two syringe pumps, allowing control over the reactant ratio and flow rate. Various conditions are being tested, including voltage (0 to 15600 V), residence time (5 to 30 minutes), and catalyst concentration. The final products are analyzed using gas chromatography, and the emulsions are examined via optical microscopy. Emulsion and mass transfer assisted by

cold DBD plasma were confirmed through gas chromatography, with tests achieving 85% ester conversion. In the future, the replacement of the power source from a 60Hz frequency to a high frequency (2kHz – 30kHz) will be tested. Additionally, an analysis using fiber optic spectrometry will be conducted to understand the chemical species present during the reaction. Furthermore, characteristics of the emulsions such as zeta potential, contact angle, and surface tension will also be investigated.

Treatment of commercial fabric with a Conical-Shaped Atmospheric Pressure Plasma Jet

P24

Bruno Henrique da Silva Leal¹; Kodaira, Felipe ¹; Kostov, Konstantin ¹

¹Faculdade de Engenharia e Ciências de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista (FEG/UNESP)

The textile industry is one of the largest and most developed industries in the world, requiring constant updates and modernizations in various processes. One of the common and widespread practices in the industry is starching fabrics, which improves their resistance to friction and prevents unraveling of the textile structure. However, starch coating reduces the wettability of the textile fiber, making it difficult for subsequent finishing processes, such as painting. Typically, after the coating process, fabrics undergo further treatment to improve their wettability, aiding in the finishing processes of the textile production line. The study aimed to investigate the effect of atmospheric plasma generated by a conical-shaped atmospheric pressure plasma jet. Cotton (CO) and polyester (PES), the two most commonly used textile materials, were used to create fibers, with both fabrics constructed using the Oxford method and distinct compositions. The first fabric was made entirely of cotton, and the second was a blend of 33% cotton and 67% polyester. To analyze the physical and chemical changes caused by the treatment, several surface characterization methods were used, including the vertical wicking test, Fourier-transform infrared spectroscopy (ATR-FTIR) with attenuated total reflection, scanning electron microscopy (SEM), and X-ray photoelectron spectroscopy (XPS).

SURFACE MODIFICATION OF ALUMINUM ALLOY AA2024 BY PLASMA ELECTROLYTIC OXIDATION IN SODIUM TETRABORATE SOLUTION (Na₂B₄O₇)

P25

Rafael Resende Lucas¹; Rogério Pinto Mota¹

¹Faculdade de Engenharia e Ciências de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista (FEG/UNESP)

The 2024 aluminum alloy has excellent mechanical properties, when it presents T3 configuration (thermally solubilized and natural aging), causing precipitates of intermetallic phases, such as: Al-Cu-Mg (phase S) and Al₂Cu (phase θ), these cause increased mechanical strength, but make the alloy susceptible to localized corrosion, due to the formation of galvanic micro pairs [1]. Therefore, it becomes necessary to develop surface treatments, to reduce the rate of corrosion, the most commercial methods are anodizing and organic coatings, such as paints. Plasma Electrolytic Oxidation (PEO) is a surface treatment process by electrochemical conversion, that is, it develops on light alloys an oxide coating, with physical and chemical properties superior to the coating developed spontaneously. In addition to being a fast process, it is more efficient from an environmental point of view, by dispensing with the use of acidic solutions (hydrochloric acid, nitric, sulfuric, etc.) and carcinogens, such as hexavalent chromium [2, 3]. In this study, substrates (25x25x3 mm) of the aluminum alloy AA2024 were sanded with SiC sandpaper with particle size of 200, 400, 600 and 1000 mesh; Cleaned in ultrasonic vat in deionized water solution and neutral detergent for 15 minutes, then in isopropyl alcohol for 15 minutes, dried at room temperature and stored in petri dishes with soft paper. The experimental electrical system consists of a voltage variator (0 – 200 V), with voltage bending / rectifier system, with multimeters to monitor the applied potential and the current in the system over the treatment time. The surface treatment occurred in potentiostatic regime, with potential of 350 V (DC) for 300 seconds of immersion, the sample was connected in the positive pole (Anode) and in the negative pole a plate of AA1200 as cathode, the process occurred triplicate, in a solution of sodium tetraborate (Na₂B₄O₇ – 10g/L). After treatment, the samples were cleaned with deionized water and dried with a thermal blower. The morphological characterization of the treated substrates was performed under a scanning electron microscope

(SEM), model EVO LS15, from the manufacturer ZEISS, in secondary electron mode (BSE) at 2.5 kV. The thickness of the coating was performed by eddy current, measuring 10 times each sample, following the NBR 12610 standard. The surface morphology of the coatings presents a typical characteristic of PEO processes, with the presence of micro pores, being the result of discharge channels during the treatment of electrolytic plasma; micro cracks, due to the rapid cooling of molten oxide material in contact with liquid. The coatings presented thicknesses on average of 1.2 ± 0.4 μm , this thickness being more common with the applied electrical regime (DC), due to the formation of an electric double layer around the anode, making it difficult to pass more ions to the substrate to increase the thickness of the coating.

REFERENCES:

- [1] CHRISTUDASJUSTUS, J; VUKKUM, V; GUPTA, R. Evolution of surface film in AA2024-T3 after a long-term immersion in NaCl solution. *Corrosion Science* 215, 111056 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.corsci.2023.111056>.
 - [2] LUCAS, R. et al. Characterization of oxide coating grown by plasma electrolytic oxidation (PEO) at different times on aluminum alloy AA2024-T3. *MRS Communications* 12, 266–271 (2022). <https://doi.org/10.1557/s43579-022-00174-9>.
 - [3] LUCAS, R; SILVA, L; SANTOS, D. Morphological and chemical characterization of oxide films produced by plasma anodization of 5052 aluminum alloy in solution containing sodium silicate and sodium phosphate. *RBAV* 39, 33-41 (2020). <https://doi.org/10.17563/rbav.v39i1.1154>.
-

Índice de Autores

- Alfaro
Francisco, 40
- Andrade
M, 23
- Braga
Atualpa , 33
- Canal
Gustavo, 24
- Capaz
Rodrigo, 11
- Caramês
Thiago, 21
- Catapan
Rafael, 44
Rodrigo, 41
- Chagas
Júlio, 30, 32
- Chaves
Andrey, 29
André, 23, 29, 34, 37
- Costa
Diego, 34
Matheus, 26, 35
- Coutinho
Kaline, 17, 19
- Duarte
Diego, 40, 41, 44
Victor, 34
- Faria
Letícia, 28
- Fermino
Caetano, 21
- Ferrão
Luiz, 13
- Fister
Pedro, 27
- Freitas
Thiago , 21
- Gama
João Marcelo, 25
- Goehr
Luiz, 40
- Guimarães
Ana, 33
- Huguenin
José, 25
- Kodaira
Felipe, 45
- Koga-Ito
Cristiane, 39
- Kostov
Konstantin, 45
- Langhi
Rodolfo, 26
- Leal
Bruno, 45

Lima
 Luan, 39
 Lira
 Fabiano, 27
 Lucas
 Rafael, 46
 Lugarini
 Leonardo, 37
 Machado
 Francisco, 30, 32
 Mangili
 Angélico, 21
 Marinho
 Franciole, 37, 38
 Mattos
 Júlia, 41, 44
 Mendonça
 Maiara, 21
 Milton
 João, 23, 34
 Miranda
 Felipe, 39
 Mota
 Rogério, 46
 Niemeyer
 André, 35
 Nuno
 Peres, 34
 Oliveira
 José, 35
 Palm
 M, 41, 44
 Pavani
 Lucas, 41, 44
 Peeters
 François, 34
 Pereira
 Lincon, 35
 Pessoa
 Rodrigo, 39
 Pompéia
 Pedro, 13
 R
 Costa Filho, 23
 Rabelo
 Diego, 23, 34
 Roberto
 Marisa, 14, 24
 Sagás
 Júlio César, 40
 Santos
 Luan, 30, 32
 Sérgio, 23, 34
 Shiotani
 Michaela, 39
 Silveira
 Kássio, 30, 32
 Sobrinho
 Argemiro, 15
 Souza Filho
 Manoel, 21
 Teles
 Lara, 29, 34
 Thomen
 Diana, 29
 Vaccani
 Gustavo, 24
 Vale
 Valéria, 37, 38