

Apresentações orais

AO1

Data: 01/Agosto
Horário: 14:00 - 16:00
Local: DFI, sala 02
Grupo de trabalho: Produção e Caracterização de Materiais
Coordenador: Prof. Marcelo A. Macêdo

Produção e Caracterização de Materiais

1. IMPORTÂNCIA DOS FENÔMENOS LUMINESCENTES PARA O ESTUDO DA PRÉ-HISTÓRIA SERGIPANA, José Osman dos Santos, José Fernandes de Lima, Mário Ernesto Giroldo Valerio
2. PRODUÇÃO DE FILMES FINOS DOPADOS COM TERRAS RARAS PARA APLICAÇÃO EM DOSÍMETROS TERMOLUMINESCENTES DE RADIAÇÃO, Paulo J. R. Montes, Mário G. Valerio, Marcelo A. Macêdo
3. CARACTERIZAÇÃO POR TERMOLUMINESCÊNCIA DA CÊRAMICA DE GERMANATO DE BISMUTO ($\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$), Ronaldo S. Silva, Zélia S. Macedo, Antonio C. Hernandez, Mário Ernesto G. Valério
4. EMISSION SPECTRA OF THERMOLUMINESCENCE OF QUARTZ AT LOW TEMPERATURES, A J J Santos, J F de Lima and M E G Valerio
5. USO DA TÉCNICA DE TERMOLUMINESCÊNCIA PARA O CONTROLE DE QUALIDADE DE PASTAS CIMENTADAS ESPECIAIS, B. F. Santos Jr, M. E. G. Valério, E. F. S. Vieira, A. R. Cestari, C. R. Miranda, A. C. F. Conceição
6. PREPARAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE FILMES FINOS SOL-GEL DE ÓXIDO DE ESTRÔNCIO A PARTIR DA ÁGUA DE COCO, Edjane Rocha dos Santos, Marcelo Andrade Macêdo
7. FILME FINO DE Cr_2O_3 NA PRESENÇA DO GÁS CO_2 , Ramires M. Silva, Marcelo A. Macêdo
8. ESTUDO DE XRD E SXS DE FILMES FINOS $\text{Li}_x\text{Mn}_2\text{O}_4$, Cristiano T. de Meneses, Marcelo A. Macêdo, Flávio C. Vicentin, José Marcos Sasaki

AO2

Data: 01/Agosto
Horário: 14:00 - 16:00
Local: DFI, sala 06
Grupos de trabalho: Física Estatística e Teoria da Matéria Condensada, Simulação Computacional de Materiais
Coordenador: Prof. Cláudio A. Macêdo

Física Estatística e Teoria da Matéria Condensada

1. SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DO MODELO DE HATSUGAI-KOHMOTO, Francisco A. G. Almeida e Cláudio A. Macedo
2. SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DO MODELO DE HUBBARD COM DUAS BANDAS, Rodrigo de Farias Gomes, Cláudio A. Macêdo
3. PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DO MODELO DE STONER, Clélio B. C. Gomes e Cláudio A. Macêdo
4. ANÁLISE DO MÉTODO DE MONTE-CARLO APLICADO AO MODELO DE HUBBARD, Samuel R. Oliveira Neto, André M. C. Souza
5. PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DO SmB_6 , Cláudio A. Macedo e André M. C. Souza
6. PONTOS DE INTERSEÇÃO EM CURVAS DE CALOR ESPECÍFICO NO MODELO DE HUBBARD, A.M.C. Souza e C. A. Macêdo

Simulação Computacional de Materiais

7. MODELAGEM COMPUTACIONAL DOS SISTEMAS LiMAlF_6 ($M = \text{Ca}$ ou Sr) DOPADOS COM ÍONS DE TERRAS RARAS, Mário E. G. Valerio, Jomar B. Amaral
8. ESTUDOS DE SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA FASE CRISTALINA DE MOLÉCULAS ORGÂNICAS BIOLÓGICAMENTE ATIVAS, Marcelo L. dos Santos, Ledjane S. Barreto, Luís E. Almeida

A03

Data: 01/Agosto
Horário: 16:30 - 18:00
Local: DFI, sala 02
Grupos de trabalho: Produção e Caracterização de Materiais, Física de Partículas e Campos, Física Matemática
Coordenador: Prof. Washington F. Chagas Filho

Produção e Caracterização de Materiais

1. MECANISMOS DE POLARIZAÇÃO E DESPOLARIZAÇÃO NO BaF_2 DOPADO COM METAIS DIVALENTES, Ana Gardênia S Mangueira, Mario E G Valerio, Jose F Lima, Sonia L Baldochi, Spero P Morato, N D Vieira Junior
2. PRODUÇÃO DE CALCITA SINTÉTICA PURA E DOPADA POR DIFUSÃO EM GEL, Tatiana Santos de Araujo, Mário Ernesto Giroldo Valerio

Física de Partículas e Campos

3. ENIGMA DA GRAVIDADE QUÂNTICA, Mário Everaldo de Souza

4. EXTENSÃO DA INVARIÂNCIA DE POINCARÉ EM TEORIAS DE PARTÍCULAS BOSÔNICAS RELATIVÍSTICAS, Gilberto Nascimento Santos Filho*, Washington Figueiredo Chagas Filho
5. HAMILTONIZAÇÃO DE UMA PARTICULA RELATIVISTICA COM SPIN 1/2 EM ESPAÇO TEMPO DE DIMENSÃO 2+1, Alyson Paulo Santos, Stoian Ivanov Zlatev

Física Matemática

6. EXTENSÕES UNIVERSAIS E ÁLGEBRAS ASSOCIATIVAS, A B Yanovski

AO4

Data: 01/Agosto
Horário: 16:30 - 18:00
Local: DFI, sala 06
Grupos de trabalho: Física Atômica e Molecular, Física Computacional
Coordenador: Prof. Everton G. de Santana

Física Atômica e Molecular

1. FUNÇÕES DE ONDA E ENERGIAS DO ÁTOMO DE OURO OBTIDAS ATRAVÉS DE UM ESQUEMA DIRAC-HARTREE-FOCK, André Oliveira Silva, Osmar S. Silva Jr.
2. PARÂMETROS DE ORIENTAÇÃO E ALINHAMENTO PARA A EXCITAÇÃO DE ESTADOS $2,3 \ ^3P$ DO HÉLIO POR IMPACTO DE ELÉTRONS EM ENERGIAS INTERMEDIÁRIAS, Márcia C. L. Moreira, Osmar S. Silva Jr.
3. PARÂMETROS POLARIZABILIDADE DE DIPOLO E RAIOS DE CORTE PARA O POTENCIAL ATÔMICO DO ÁTOMO DE MAGNÉSIO, Marcos Hernani S. Santos, Osmar S. Silva Jr.
4. ORBITAIS MOLECULARES PARA O CH_2 VIA GAMESS, Marcelo P. Guimarães, Osmar S. Silva Jr.

Física Computacional

5. SIMETRIA EM IMAGENS, Christiane Lima Santos, José Antônio Ferreira Leite
6. PROGRAMA EGSAJPO QUE AJUSTA PONTOS EXPERIMENTAIS POR UM POLINÔMIO DE GRAU REAL, Everton Gomes de Santana

Apresentações em painéis

Data: 02/Agosto
Horário: 14:00 - 15:00
Local: Hall da Reitoria
Grupos de trabalho: Biofísica e Física Médica, Ensino de Física, Física Atômica e

Molecular, Física Computacional, Produção e Caracterização de Materiais
Coordenadora: Profa. Divanizia do Nascimento Souza

Biofísica e Física Médica

1. A RADIOTERAPIA EM SERGIPE, Katiucia da Silva Santana, Mario Ernesto Giroldo Valerio, Divanizia do Nascimento Souza

Ensino de Física

2. OS CONCEITOS DE FÍSICA ESTUDADOS NO ENSINO FUNDAMENTAL NA VISÃO DOS ALUNOS DE PEDAGOGIA E FÍSICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE, Suzana Arleno Souza Santos, Tiago Nery Ribeiro, Divanizia do Nascimento Souza
3. AVALIAÇÃO DOS CURSOS DE FÍSICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE, Luiz G. de Azevedo, Osmar S. Silva Jr.
4. OLIMPÍADA BRASILEIRA DE FÍSICA: ÊNFASE NOS RESULTADOS DO ESTADO DE SERGIPE, Selma Rozane Vieira

Física Atômica e Molecular

5. RELAÇÃO ENTRE AS ONDAS PARCIAIS E A AMPLITUDE DE ESPALHAMENTO ELÉTRON-ÁTOMO, Tiago Souza Araujo, Osmar S. Silva Jr.

Física Computacional

6. PROGRAMA EGSAJFU QUE AJUSTA PONTOS EXPERIMENTAIS PELA FUNÇÃO $Y(X) = A(1) + A(2) F(X) + A(3) G(X) + A(4) H(X) + \dots$, Everton Gomes de Santana
7. AVALIAÇÃO DE ROTINAS COMPUTACIONAIS PARA O CÁLCULO DE FUNÇÕES DE BESSEL ESFÉRICAS E FUNÇÕES COULOMBIANAS, Everton G. de Santana, Osmar S. Silva Jr.

Produção e Caracterização de Materiais

8. TERMOLUMINESCÊNCIA DA JADE, PRIMEIRAS ANÁLISES, Cinthia Marques Sousa de Magalhães, Adeilson Pessoa de Melo, Divanizia do Nascimento Souza
9. ESTUDO DAS PROPRIEDADES TERMOLUMINESCENTES DE COMPÓSITOS A BASE DE VIDROS E MICROCRISTAIS PARA APLICAÇÃO EM DOSÍMETROS TERMOLUMINESCENTES, Adolfo Mendonça Barros, Mário Ernesto Giroldo Valério, José Fernandes de Lima

ENSEF-2002

VII Encontro Sergipano de Física



01 e 02 de Agosto de 2002
Universidade Federal de Sergipe
Campus Universitário
São Cristóvão, SE

Apoio: UFS, DATAPEL, FABISE

Apresentação

O Encontro Sergipano de Física (ENSEF) vem se realizando desde 1990 no Departamento de Física (DFI) da Universidade Federal de Sergipe (UFS), objetivando motivar os estudantes para a pesquisa e o ensino de física, motivar e atualizar os professores do ensino médio da área de Física, divulgar resultados recentes de pesquisas em física e em áreas interdisciplinares afins, assim como divulgar os cursos de graduação em Física da UFS (Licenciatura em Física Diurno e Noturno, Bacharelado em Física Diurno, Física Médica Diurno) e pós-graduação (Mestrado em Física).

Como o ano de 2002 é um tanto simétrico, o tema simetrias foi o escolhido para este ENSEF. Convidamos palestrantes de outras Instituições de Ensino Superior. Em particular, destacamos a presença do Prof. Dr. Marco Lima, da UNICAMP, que atendeu a nosso chamado para dar um impulso inicial à nova linha de pesquisa do Grupo de Física Atômica / UFS, espalhamento de elétrons por moléculas. Não menos importante, atendendo à inúmeras solicitações de estudantes, principalmente de Licenciatura, convidamos o Prof. Jenner Bastos, da UFAL, e a Profa. Divanízia Souza, do Departamento de Educação / UFS para falar sobre ensino de física e filosofia da ciência. Vários outros professores do DFI, de outros Departamentos e Instituições proferirão palestras convidadas sobre temas atuais de pesquisa em Física. Estudantes de iniciação científica, de mestrado e outros pesquisadores apresentarão trabalhos, em seções orais e de painéis. São 52 trabalhos, ao todo, apresentados no ENSEF-2002. Neste ano, ofertamos alguns mini-cursos que visam aprofundar o conhecimento em algumas áreas: supersimetria, para estudantes que se motivam pela área de partículas e teoria de campos, espalhamentos elétron-molécula, para os pesquisadores de física atômica e molecular, e radioterapia, que atende aos alunos do recém-criado curso de Física Médica.

Na verdade, não se trata apenas de *um* curso novo. O DFI tem feito um esforço para otimizar e, tanto quanto possível, aumentar sua oferta. Criou-se o curso noturno de Licenciatura. O DFI envolveu-se com o PQD, qualificando professores de física do interior do Estado. Foi criado o curso de Física Médica. Com isso, o número médio de alunos matriculados nos cursos de Física passou de 160, no final dos anos 90, para 400 alunos, segundo dados recentes do Sistema Acadêmico. Isto sem falar no Mestrado em Física, curso a nível de Pós-Graduação, que tem envolvido mais estudantes a cada ano. Com certeza, vivemos uma nova fase do Departamento de Física, e é exatamente nesse contexto que se insere o Encontro Sergipano, como atividade relevante, que devemos continuar nos esforçando por oferecer com periodicidade anual.

Aproveitamos a oportunidade para agradecer o apoio do DFI, NPGFI, PROEX, DATAPEL e FABISE. Agradecemos também o auxílio de editoração do CEAV/UFS, e a todos os colegas, funcionários e estudantes que nos ajudaram na organização e divulgação do evento, em especial aos Profs. Selma, Flávio, Fernando Miguel e Luiz Gonzaga, bem como à Gineilda.

Desejamos que o ENSEF-2002 seja bastante proveitoso e motivador para todos!

Osmar S. Silva Jr.
Coordenador do ENSEF-2002

Conteúdo

Apresentação

Conteúdo

Programação

Resumos das palestras

Resumos das apresentações orais

Resumos das apresentações em painéis

Resumos dos mini-cursos

Índice de autores(?)

Programação

A programação do ENSEF-2002, esquematizada no quadro abaixo, consiste em palestras, apresentações orais e em painéis. Como complemento ao ENSEF, foram ofertados três mini-cursos.

Programação do ENSEF-2002 **01 e 02 / Agosto / 2002**

Horário	1º /Agosto	2/Agosto
8:00-8:30	Distribuição Pastas (Auditório Reitoria)	
8:30-9:00	Abertura (Auditório Reitoria)	
9:00-10:00	Palestra P01 (Auditório Reitoria)	Palestra P05 (Auditório Reitoria)
10:00-10:30	Intervalo	Intervalo
10:30-11:00	Palestra P02 (Auditório Reitoria)	Palestra P06 (Auditório Reitoria)
11:00-11:30	Palestra P03 (Auditório Reitoria)	Palestra P07 (Auditório Reitoria)
11:30-12:00	Palestra P04 (Auditório Reitoria)	Palestra P08 (Auditório Reitoria)
14:00-15:00	Apresentações Orais AO1 (DFI sala 02) AO2 (DFI sala 06)	Apresentações em Painel (Hall Reitoria)
15:00-15:30		Palestra P9 (Auditório Reitoria)
15:30-16:00		Palestra P10 (Auditório Reitoria)
16:00-16:30	Intervalo	Intervalo
16:30-17:00	Apresentações Orais AO3 (DFI sala 02) AO4 (DFI sala 06)	Palestra P11 (Auditório Reitoria)
17:00-17:30		Palestra P12 (Auditório Reitoria)
17:30-18:00		Premiações e Encerramento

Palestras

- P01. Explorando simetrias em problemas de mecânica quântica, Prof. Marco Aurélio P. Lima (UNICAMP)
- P02. Aplicação de técnicas de absorção de raios-X no estudo de materiais magnéticos, Prof. Flávio Vicentin (DFI/UFS e LNLS/Campinas)
- P03. Supersimetria: uma das idéias fundamentais da nossa física do século XXI, Prof. Fernando M. P. Chaves (DFI/UFS)
- P04. A física no ensino médio das escolas de Sergipe, Profa. Divanísia Souza (DED/UFS)

- P05. Alguns problemas epistemológicos suscitados pela teoria quântica, Prof. Jenner Bastos (UFAL)
- P06. Simetria na origem molecular da vida: quiralidade, Prof. Frederico Cunha (DFI/UFS)
- P07. Transições de fases em sistemas magnéticos, Profa. Selma R. Vieira (DFI/UFS)
- P08. Simetrias do espaço-tempo, Prof. Washington Chagas Filho (DFI/UFS)
- P09. Grupo de renormalização no espaço real: abordagens a sistemas magnéticos desordenados, Prof. Douglas Albuquerque (DMA/UFS)
- P10. O estado da arte no cálculo de propriedades estruturais e eletrônicas de sólidos, Prof. Luiz A. T. Javier (DFI/UFS)
- P11. Simulação de defeitos e parâmetros de campo cristalino: previsão de novos materiais fotônicos? Prof. Marcos A. C. Santos (UESB)
- P12. O mundo dos materiais magnéticos, Prof. Cláudio A. Macêdo (DFI/UFS)

Apresentações orais

AO1

Data: 01/Agosto
Horário: 14:00 - 16:00
Local: DFI, sala 02
Grupo de trabalho: Produção e Caracterização de Materiais
Coordenador: Prof. Marcelo A. Macêdo

Produção e Caracterização de Materiais

9. IMPORTÂNCIA DOS FENÔMENOS LUMINESCENTES PARA O ESTUDO DA PRÉ-HISTÓRIA SERGIPANA, José Osman dos Santos, José Fernandes de Lima, Mário Ernesto Giroldo Valerio
10. PRODUÇÃO DE FILMES FINOS DOPADOS COM TERRAS RARAS PARA APLICAÇÃO EM DOSÍMETROS TERMOLUMINESCENTES DE RADIAÇÃO, Paulo J. R. Montes, Mário G. Valerio, Marcelo A. Macêdo
11. CARACTERIZAÇÃO POR TERMOLUMINESCÊNCIA DA CÊRAMICA DE GERMANATO DE BISMUTO ($\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$), Ronaldo S. Silva, Zélia S. Macedo, Antonio C. Hernandez, Mário Ernesto G. Valério
12. EMISSION SPECTRA OF THERMOLUMINESCENCE OF QUARTZ AT LOW TEMPERATURES, A J J Santos, J F de Lima and M E G Valerio
13. USO DA TÉCNICA DE TERMOLUMINESCÊNCIA PARA O CONTROLE DE QUALIDADE DE PASTAS CIMENTADAS ESPECIAIS, B. F. Santos Jr, M. E. G. Valério, E. F. S. Vieira, A. R. Cestari, C. R. Miranda, A. C. F. Conceição
14. PREPARAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE FILMES FINOS SOL-GEL DE ÓXIDO DE ESTRÔNCIO A PARTIR DA ÁGUA DE COCO, Edjane Rocha dos Santos, Marcelo Andrade Macêdo
15. FILME FINO DE Cr_2O_3 NA PRESENÇA DO GÁS CO_2 , Ramires M. Silva, Marcelo A. Macêdo
16. ESTUDO DE XRD E SXS DE FILMES FINOS $\text{Li}_x\text{Mn}_2\text{O}_4$, Cristiano T. de Meneses, Marcelo A. Macêdo, Flávio C. Vicentin, José Marcos Sasaki

AO2

Data: 01/Agosto
Horário: 14:00 - 16:00
Local: DFI, sala 06
Grupos de trabalho: Física Estatística e Teoria da Matéria Condensada, Simulação Computacional de Materiais
Coordenador: Prof. Cláudio A. Macêdo

Física Estatística e Teoria da Matéria Condensada

9. SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DO MODELO DE HATSUGAI-KOHMOTO, Francisco A. G. Almeida e Cláudio A. Macedo
10. SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DO MODELO DE HUBBARD COM DUAS BANDAS, Rodrigo de Farias Gomes, Cláudio A. Macêdo
11. PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DO MODELO DE STONER, Clélio B. C. Gomes e Cláudio A. Macêdo
12. ANÁLISE DO MÉTODO DE MONTE-CARLO APLICADO AO MODELO DE HUBBARD, Samuel R. Oliveira Neto, André M. C. Souza
13. PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DO SmB_6 , Cláudio A. Macedo e André M. C. Souza
14. PONTOS DE INTERSEÇÃO EM CURVAS DE CALOR ESPECÍFICO NO MODELO DE HUBBARD, A.M.C. Souza e C. A. Macêdo

Simulação Computacional de Materiais

15. MODELAGEM COMPUTACIONAL DOS SISTEMAS LiMAlF_6 (M = Ca ou Sr) DOPADOS COM ÍONS DE TERRAS RARAS, Mário E. G. Valerio, Jomar B. Amaral
16. ESTUDOS DE SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA FASE CRISTALINA DE MOLÉCULAS ORGÂNICAS BIOLÓGICAMENTE ATIVAS, Marcelo L. dos Santos, Ledjane S. Barreto, Luís E. Almeida

AO3

Data: 01/Agosto
Horário: 16:30 - 18:00
Local: DFI, sala 02
Grupos de trabalho: Produção e Caracterização de Materiais, Física de Partículas e Campos, Física Matemática
Coordenador: Prof. Washington F. Chagas Filho

Produção e Caracterização de Materiais

7. MECANISMOS DE POLARIZAÇÃO E DESPOLARIZAÇÃO NO BaTiF_3 DOPADO COM METAIS DIVALENTES, Ana Gardênia S Mangueira, Mario E G Valerio, Jose F Lima, Sonia L Baldochi, Spero P Morato, N D Vieira Junior

8. PRODUÇÃO DE CALCITA SINTÉTICA PURA E DOPADA POR DIFUSÃO EM GEL, Tatiana Santos de Araujo, Mário Ernesto Girolto Valerio

Física de Partículas e Campos

9. ENIGMA DA GRAVIDADE QUÂNTICA, Mário Everaldo de Souza
10. EXTENSÃO DA INVARIÂNCIA DE POINCARÉ EM TEORIAS DE PARTÍCULAS BOSÔNICAS RELATIVÍSTICAS, Gilberto Nascimento Santos Filho*, Washington Figueiredo Chagas Filho
11. HAMILTONIZAÇÃO DE UMA PARTICULA RELATIVISTICA COM SPIN 1/2 EM ESPAÇO TEMPO DE DIMENSÃO 2+1, Alyson Paulo Santos, Stoian Ivanov Zlatev

Física Matemática

12. EXTENSÕES UNIVERSAIS E ÁLGEBRAS ASSOCIATIVAS, A B Yanovski

AO4

Data: 01/Agosto
Horário: 16:30 - 18:00
Local: DFI, sala 06
Grupos de trabalho: Física Atômica e Molecular, Física Computacional
Coordenador: Prof. Everton G. de Santana

Física Atômica e Molecular

7. FUNÇÕES DE ONDA E ENERGIAS DO ÁTOMO DE OURO OBTIDAS ATRAVÉS DE UM ESQUEMA DIRAC-HARTREE-FOCK, André Oliveira Silva, Osmar S. Silva Jr.
8. PARÂMETROS DE ORIENTAÇÃO E ALINHAMENTO PARA A EXCITAÇÃO DE ESTADOS $2,3 \ ^3P$ DO HÉLIO POR IMPACTO DE ELÉTRONS EM ENERGIAS INTERMEDIÁRIAS, Márcia C. L. Moreira, Osmar S. Silva Jr.
9. PARÂMETROS POLARIZABILIDADE DE DIPOLO E RAIOS DE CORTE PARA O POTENCIAL ATÔMICO DO ÁTOMO DE MAGNÉSIO, Marcos Hernani S. Santos, Osmar S. Silva Jr.
10. ORBITAIS MOLECULARES PARA O CH_2 VIA GAMESS, Marcelo P. Guimarães, Osmar S. Silva Jr.

Física Computacional

11. SIMETRIA EM IMAGENS, Christiane Lima Santos, José Antônio Ferreira Leite
12. PROGRAMA EGSAJPO QUE AJUSTA PONTOS EXPERIMENTAIS POR UM POLINÔMIO DE GRAU REAL, Everton Gomes de Santana

Apresentações em painel

AP

Data: 02/Agosto
Horário: 14:00 - 15:00 horas
Local: Hall da Reitoria
Grupos de trabalho: Biofísica e Física Médica, Ensino de Física, Física Atômica e Molecular, Física Computacional, Produção e Caracterização de Materiais
Coordenadora: Profa. Divanizia do Nascimento Souza

Biofísica e Física Médica

10. A RADIOTERAPIA EM SERGIPE, Katiucia da Silva Santana, Mario Ernesto Giroldo Valerio, Divanizia do Nascimento Souza

Ensino de Física

11. OS CONCEITOS DE FÍSICA ESTUDADOS NO ENSINO FUNDAMENTAL NA VISÃO DOS ALUNOS DE PEDAGOGIA E FÍSICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE, Suzana Arleno Souza Santos, Tiago Nery Ribeiro, Divanizia do Nascimento Souza
12. AVALIAÇÃO DOS CURSOS DE FÍSICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE, Luiz G. de Azevedo, Osmar S. Silva Jr.
13. OLIMPÍADA BRASILEIRA DE FÍSICA: ÊNFASE NOS RESULTADOS DO ESTADO DE SERGIPE, Selma Rozane Vieira

Física Atômica e Molecular

14. RELAÇÃO ENTRE AS ONDAS PARCIAIS E A AMPLITUDE DE ESPALHAMENTO ELÉTRON-ÁTOMO, Tiago Souza Araujo, Osmar S. Silva Jr.

Física Computacional

15. PROGRAMA EGSAJFU QUE AJUSTA PONTOS EXPERIMENTAIS PELA FUNÇÃO $Y(X) = A(1) + A(2) F(X) + A(3) G(X) + A(4) H(X) + \dots$, Everton Gomes de Santana
16. AVALIAÇÃO DE ROTINAS COMPUTACIONAIS PARA O CÁLCULO DE FUNÇÕES DE BESSEL ESFÉRICAS E FUNÇÕES COULOMBIANAS, Everton G. de Santana, Osmar S. Silva Jr.

Produção e Caracterização de Materiais

17. TERMOLUMINESCÊNCIA DA JADE, PRIMEIRAS ANÁLISES, Cinthia Marques Sousa de Magalhães, Adeilson Pessoa de Melo, Divanizia do Nascimento Souza
18. ESTUDO DAS PROPRIEDADES TERMOLUMINESCENTES DE COMPÓSITOS A BASE DE VIDROS E MICROCRISTAIS PARA APLICAÇÃO

EM DOSÍMETROS TERMOLUMINESCENTES, Adolfo Mendonça Barros, Mário Ernesto Giroldo Valério, José Fernandes de Lima

Programação dos mini-cursos
(29, 30 e 31 / Julho / 2002)

Local: Departamento de Física (salas 02 ou 06)

Horários: cursos pela manhã: das 8:00 às 12:00 horas
cursos pela tarde: das 14:00 às 18:00 horas

MC1. Espalhamentos de elétrons e pósitrons por moléculas: da descrição do alvo à dinâmica de colisões (Prof. Marco A. Lima, UNICAMP). Obs.: apenas para aprovados em Estrutura da Matéria A.

(Tardes)

MC2. Radioterapia: serviços, equipamentos e fontes (Profa. Divanília Souza, DED/UFS)

(Manhãs)

MC3. Supersimetria (Profs. Fernando Chaves, DFI, Stoian Zlatev, DMA/UFS)

(Manhãs)

ENSEF-2002

VII Encontro Sergipano de Física



01 e 02 de Agosto de 2002
Universidade Federal de Sergipe
Campus Universitário
São Cristóvão, SE

Apoio: UFS, DATAPEL, FABISE

Introdução

O Encontro Sergipano de Física (ENSEF) vem se realizando desde 1990 no Departamento de Física (DFI) da Universidade Federal de Sergipe (UFS), objetivando motivar os estudantes para a pesquisa e o ensino de física, motivar e atualizar os professores do ensino médio da área de Física, divulgar resultados recentes de pesquisas em física e em áreas interdisciplinares afins, assim como divulgar os cursos de graduação em Física da UFS (Licenciatura em Física Diurno e Noturno, Bacharelado em Física Diurno, Física Médica Diurno) e pós-graduação (Mestrado em Física).

Como o ano de 2002 é um tanto simétrico, o tema simetrias foi o escolhido para este ENSEF. Convidamos palestrantes de outras Instituições de Ensino Superior. Em particular, destacamos a presença do Prof. Dr. Marco Lima, da UNICAMP, que atendeu a nosso chamado para dar um impulso inicial à nova linha de pesquisa do Grupo de Física Atômica / UFS, espalhamento de elétrons por moléculas. Não menos importante, atendendo à inúmeras solicitações de estudantes, principalmente de Licenciatura, convidamos o Prof. Jenner Bastos, da UFAL, e a Profa. Divanízia Souza, do Departamento de Educação / UFS para falar sobre ensino de física e filosofia da ciência. Vários outros professores do DFI, de outros Departamentos e Instituições proferirão palestras convidadas sobre temas atuais de pesquisa em Física. Estudantes de iniciação científica, de mestrado e outros pesquisadores apresentarão trabalhos, em seções orais e de painéis. Neste ano, ofertamos alguns mini-cursos que visam aprofundar o conhecimento em algumas áreas: supersimetria, para estudantes que se motivam pela área de partículas e teoria de campos, espalhamentos elétron-molécula, para os pesquisadores de física atômica e molecular, e radioterapia, que atende aos alunos do recém-criado curso de Física Médica.

Na verdade, não se trata apenas de *um* curso novo. O DFI tem feito um esforço para otimizar e, tanto quanto possível, aumentar sua oferta. Criou-se o curso noturno de Licenciatura. O DFI envolveu-se com o PQD, qualificando professores de física do interior do Estado. Foi criado o curso de Física Médica. Com isso, o número médio de alunos matriculados nos cursos de Física passou de 160, no final dos anos 90, para 400 alunos, segundo dados recentes do Sistema Acadêmico. Isto sem falar no Mestrado em Física, curso a nível de Pós-Graduação, que tem envolvido mais estudantes a cada ano. Com certeza, vivemos uma nova fase do Departamento de Física, e é exatamente nesse contexto que se insere o Encontro Sergipano, como atividade relevante, que devemos continuar nos esforçando por oferecer com periodicidade anual.

Aproveitamos a oportunidade para agradecer o apoio do DFI, NPGFI, DATAPEL e FABISE. Agradecemos também o auxílio de editoração do CEAV/UFS, e a todos os colegas, funcionários e estudantes que nos ajudaram na organização e divulgação do evento, em particular aos Profs. Fernando Miguel, Flávio, Selma e Luiz Gonzaga, e à Gineilda.

Desejamos que o ENSEF-2002 seja bastante proveitoso e motivador para todos!

Osmar S. Silva Jr.
Coordenador do ENSEF-2002

Programação

Programação dos mini-cursos

29, 30 e 31 de julho / 2002

Local: Departamento de Física (salas 02 ou 06)

Horários: cursos pela manhã: das 8:00 às 12:00 horas

cursos pela tarde: das 14:00 às 18:00 horas

MC1. Espalhamentos de elétrons e pósitrons por moléculas: da descrição do alvo à dinâmica de colisões (Prof. Marco A. Lima, UNICAMP). Obs.: apenas para aprovados em Estrutura da Matéria A.

(Tardes)

MC2. Radioterapia: serviços, equipamentos e fontes (Profa. Divanízia Souza, DED/UFS)

(Manhãs)

MC3. Supersimetria (Profs. Fernando Chaves, DFI, Stoian Zlatev, DMA/UFS)

(Manhãs)

Programação do ENSEF-2002

01 e 02 de agosto / 2002

Horário	1º /Agosto	2/Agosto
8:00-8:30	Distribuição Pastas (Auditório Reitoria)	
8:30-9:00	Abertura (Auditório Reitoria)	
9:00-10:00	Palestra 1 (Auditório Reitoria)	Palestra 5 (Auditório Reitoria)
10:00-10:30	Intervalo	Intervalo
10:30-11:00	Palestra 2 (Auditório Reitoria)	Palestra 6 (Auditório Reitoria)
11:00-11:30	Palestra 3 (Auditório Reitoria)	Palestra 7 (Auditório Reitoria)
11:30-12:00	Palestra 4 (Auditório Reitoria)	Palestra 8 (Auditório Reitoria)
14:00-15:00	Apresentações Orais	Apresentações em Painel
15:00-15:30	AO1 (DFI sala 02)	Palestra 9 (Auditório Reitoria)
15:30-16:00	AO2 (DFI sala 06)	Palestra 10 (Auditório Reitoria)
16:00-16:30	Intervalo	Intervalo
16:30-17:00	Apresentações Orais	Palestra 11 (Auditório Reitoria)
17:00-17:30	AO3 (DFI sala 02)	Palestra 12 (Auditório Reitoria)
17:30-18:00	AO4 (DFI sala 06)	Premiações e Encerramento

Palestras

- P01. Explorando simetrias em problemas de mecânica quântica, Prof. Marco Aurélio P. Lima (UNICAMP)
- P02. Aplicação de técnicas de absorção de raios-X no estudo de materiais magnéticos, Prof. Flávio Vicentin (DFI/UFS e LNLS/Campinas)
- P03. Supersimetria: uma das idéias fundamentais da nossa física do século XXI, Prof. Fernando M. P. Chaves (DFI/UFS)
- P04. A física no ensino médio das escolas de Sergipe, Profa. Divanísia Souza (DED/UFS)
- P05. Alguns problemas epistemológicos suscitados pela teoria quântica, Prof. Jenner Bastos (UFAL)
- P06. Simetria na origem molecular da vida: quiralidade, Prof. Frederico Cunha (DFI/UFS)
- P07. Transições de fases em sistemas magnéticos, Profa. Selma R. Vieira (DFI/UFS)
- P08. Simetrias do espaço-tempo, Prof. Washington Chagas Filho (DFI/UFS)
- P09. Grupo de renormalização no espaço real: abordagens a sistemas magnéticos desordenados, Prof. Douglas Albuquerque (DMA/UFS)
- P10. O estado da arte no cálculo de propriedades estruturais e eletrônicas de sólidos, Prof. Luiz A. T. Javier (DFI/UFS)
- P11. Simulação de defeitos e parâmetros de campo cristalino: previsão de novos materiais fotônicos? Prof. Marcos A. C. Santos (UESB)
- P12. O mundo dos materiais magnéticos, Prof. Cláudio A. Macêdo (DFI/UFS)

Apresentações orais

Ensino de Física
Física Atômica e Molecular
Física Computacional
Física de Partículas e Campos
Física Estatística e Teoria da Matéria Condensada
Física Matemática
Produção e Caracterização de Materiais
Simulação Computacional de Materiais

Data: 1º agosto
Horário: 14:00 - 16:00
Local: Departamento de Física, sala 02
Grupos de trabalho:
Coordenador: Prof.

Data: 1º agosto
Horário: 14:00 - 16:00
Local: Departamento de Física, sala 06
Grupos de trabalho:
Coordenador: Prof.

Data: 1º/agosto
Horário: 14:00 - 16:00
Local: Departamento de Física, Mini-Auditório do CCET
Grupos de trabalho:
Coordenador: Prof.

Data: 1º/agosto
Horário: 16:30 - 18:00
Local: Departamento de Física, sala 02
Grupos de trabalho:
Coordenador: Prof.

Data: 1º/agosto
Horário: 16:30 - 18:00
Local: Departamento de Física, sala 06
Grupos de trabalho:
Coordenador: Prof.

Apresentações em painel

Data: 02/agosto
Horário: 14:00 - 15:00
Local: Hall da Reitoria
Grupos de trabalho: Biofísica e Física Médica, Ensino de Física, Física Atômica e Molecular, Física Computacional, Produção e Caracterização de Materiais
Coordenador: Prof.

Resumos das palestras

EXPLORANDO SIMETRIAS EM PROBLEMAS DE COLISÕES QUÂNTICAS

Marco A. P. Lima
Instituto de Física "Gleb Wataghin", - UNICAMP
13083-970, Campinas, São Paulo, Brasil

As seções de choque de espalhamento de elétrons de baixa energia por moléculas são importantes para a modelagem de ambientes de descarga (plasmas de baixa temperatura). As colisões entre elétrons e moléculas do plasma geram espécies altamente reativas, como radicais, íons e átomos, que podem iniciar processos químicos como corrosão, polimerização, diamantização, nitretação, etc. A modelagem numérica

dos chamados plasmas frios depende do conhecimento destas seções de choque. Alguns destes dados não podem ser obtidos experimentalmente e precisam ser calculados. A demanda computacional para cálculos de espalhamento de elétrons de baixa energia por moléculas poliatômicas (a partir de primeiros princípios) é muito grande. Tal demanda cresce rapidamente com o número de elétrons do alvo, pois colisões de baixa energia exigem uma descrição apropriada de efeitos de polarização (distorção da nuvem eletrônica) e de acoplamento entre canais de colisão (as moléculas podem sofrer excitações rotacionais, vibracionais e/ou eletrônicas durante o processo de colisão). Para o espalhamento de elétrons por moléculas, o método Multicanal de Schwinger (SMC) com Pseudopotenciais (Bettega et al., Phys. Rev. A **47**, 1111 (1993)) tem sido aplicado para um grande número de alvos pesados, tais como CF₄, CCl₄, SiCl₄, SiBr₄ and SiI₄, CH₂Cl₂, CH₃Cl, CFCI₃, CF₂Cl₂ e CF₃Cl (e.g. Varella et al., Phys. Rev. A **60**, 3684 (1999)). Apesar do uso de pseudopotenciais ter permitido estudos de colisões de elétrons contra alvos grandes, a maioria destes cálculos está restrita à aproximação de alvo congelado (aproximação estático-troca). Cálculos mais sofisticados, incluindo acoplamento de canais abertos e fechados foram feitos para sistemas relativamente pequenos (por exemplo, Na₂, de Natalense et al., Phys Rev. Lett. **81**, 3832 (1998)). Para o espalhamento de pósitrons (a “antimatéria” do elétron) por moléculas, cálculos com o Método Multicanal de Schwinger (Germano et al. Phys. Rev. A **47**, 1111 (1993); da Silva et al. Phys. Rev. A **49**, R1527 (1994)) de seções de choque e de parâmetros que propiciam estudos de aniquilação de pares elétron-pósitron (tipo matéria-antimatéria) durante a colisão, envolvem dificuldades ainda maiores. Isto porque a descrição das forças de correlação-polarização para energias baixas exige um grande número de funções de base (configurações eletro-positrônicas), mesmo para sistemas leves. Nesta palestra revisaremos nosso progresso recente na solução destes problemas (Azevedo et al., Phys. Rev. A **63**, 62703 (2001), e Varella et al., Phys Rev. A **63**, 52705 (2001)), com ênfase em como explorar simetrias do problema quântico de colisões, e como isso permite a simplificação destas soluções e a obtenção de resultados com boa concordância com medidas experimentais.

APLICAÇÃO DE TÉCNICAS DE ABSORÇÃO DE RAIOS-X NO ESTUDO DE MATERIAIS MAGNÉTICOS

F.C. Vicentin

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe
e Laboratório Nacional de Luz Síncrotron

A espectroscopia de absorção de raios-X (XAS: X-ray Absorption Spectroscopy) corresponde à medida da seção de choque para a absorção de fótons pelos elétrons de camadas internas. Devido à sua seletividade atômica, ela permite a investigação da ordem estrutural local em torno de um dado átomo em uma matriz complexa, a determinação da sua estrutura eletrônica e, devido à abertura proporcionada pelas propriedades de polarização bem definidas da luz síncrotron, o conhecimento da sua estrutura anisotrópica, tanto geométrica quanto magnética. Essa quantidade de informações é obtida pela combinação de estudos próximos à borda de absorção (XANES: X-ray Absorption Near Edge Structure) e da estrutura fina oscilatória estendida a centenas de elétrons-volt acima da borda (EXAFS: Extended X-ray Absorption Fine Structure). Esta técnica está intimamente ligada às fontes síncrotron devido à necessidade de um espectro contínuo de luz policromática. Além disto, as propriedades de polarização circular possibilitam o estudo do dicroísmo circular

magnético de raios-X (XMCD: X-ray Magnetic Circular Dichroism), fornecendo informações sobre o magnetismo local em torno de um determinado elemento químico.

SUPERSIMETRIA: UMA DAS IDÉIAS FUNDAMENTAIS DA NOVA FÍSICA DO SÉCULO XXI

Fernando Miguel P. Chaves

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

As simetrias têm desempenhado um papel fundamental na Física. À cada simetria corresponde uma grandeza conservada, e a busca de leis de conservação e de grandezas conservadas, tem sido, a partir da síntese da primeira grande contradição de filosofia, qual seja, a contradição entre o Uno imóvel de Parmênides e o universo multifacetado e em constante mutação de Heráclito, o fio condutor da elaboração da filosofia natural (a Física) no ocidente. A supersimetria é uma simetria muito especial entre as partículas que obedecem (no universo conceitual da Mecânica Quântica) à estatística de Fermi-Dirac, os fermions, e partículas que obedecem à estatística de Bose-Einstein, os bosons. Supõe-se que a cada partícula fermiônica do Modelo Padrão, como elétron, muon, tau, etc, corresponde um parceiro bosônico com características físicas análogas mas com spin inteiro: selétron, o smuon, o stau. Da mesma forma à cada boson do Modelo Padrão, como o foton e os bosons Z e W, corresponde um parceiro de spin fracionário: o fotino, o zino e o wino. Neste trabalho procuramos mostrar como esta idéia tem sido valiosa em vários contextos da Física - o estabelecimento de uma teoria quântica de gravitação (supergravidade), a formulação da Física de Higgs, a explicação da matéria escura do Universo, e a teoria de cordas (supercordas).

A FÍSICA NO ENSINO MÉDIO DAS ESCOLAS DE SERGIPE

Divanizia do Nascimento Souza

Departamento de Educação, Universidade Federal de Sergipe

O número de licenciados em física lecionando no Ensino Médio das escolas de Sergipe sempre esteve abaixo do necessário. Nas escolas deste Estado esta disciplina é de responsabilidade de professores com formações diversas; além dos licenciados em física, são professores dessa disciplina graduandos e graduados de vários cursos. Atualmente, este quadro apresenta uma tendência à mudanças; com a formação de uma quantidade maior de estudantes nos cursos regulares de Licenciatura em Física e também com a graduação de profissionais que já atuam na educação pública por meio do Projeto de Qualificação Docente (PQD). A formação de professores de física pelo PQD pode alterar significativamente o quadro referente ao ensino desta disciplina nas escolas do interior do Estado, onde a ausência de licenciados é ainda mais crítica. Tanto na capital quanto no interior, as atividades desta disciplina limitam-se, normalmente, às salas de aula, com a utilização de poucos recursos didáticos. Poucas escolas possuem laboratórios com experimentos de física, as que possuem laboratórios melhor equipados são as federais e algumas particulares. Algumas escolas públicas estaduais possuem laboratórios móveis contendo módulos com experimentos para apresentações nas salas de aula. As feiras de ciências

representam um momento importante de divulgação da física, porque durante suas realizações são apresentados experimentos variados sobre fenômenos que são estudados quase sempre de forma teórica durante o restante do ano letivo. Nos últimos anos, a participação de escolas particulares e públicas, principalmente federais, na Olimpíada Brasileira de Física tem despertado o interesse de professores para uma melhor condução desta disciplina. O quadro atual e perspectivas do ensino de física nas escolas de Sergipe serão apresentados nesta palestra

ALGUNS PROBLEMAS EPISTEMOLÓGICOS SUSCITADOS PELA TEORIA QUÂNTICA

Jenner Bastos
UFAL

SIMETRIA NA ORIGEM MOLECULAR DA VIDA: QUIRALIDADE

Frederico G. C. Cunha
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Um dos grandes dilemas filosóficos de todos os tempos se encontra na discussão da origem da existência, e mais particularmente, da vida. O papel da ciência neste campo se limita à proposição de teorias e busca de confirmações experimentais para as mesmas. Evidências de evolução darwiniana direcionam esta pesquisa para a busca de formas de vida mais simples, as quais poderiam ser os primeiros ancestrais das modernas formas de vida. Por um outro lado, as evidências existentes sobre a atmosfera pré-biótica apontam para a possibilidade de formação de complexas moléculas orgânicas anteriores ao aparecimento da vida. Uma lacuna se apresenta então entre formas moleculares complexas e conjuntos de formas moleculares, organizadas, e com vida. O processo de organização que levou à formação das primeiras proteínas e cadeias nucleotídicas exigiu a seleção entre estas formas moleculares daquelas que apresentam a correta simetria, ou quiralidade. Exploraremos o papel de superfícies no processo de seleção de formas moleculares homquirais que podem ter propiciado o substrato para a formação da vida. Para este fim é utilizado o microscópio de tunelamento de elétrons, uma poderosa ferramenta de análise superficial com resolução molecular.

TRANSIÇÕES DE FASE EM SISTEMAS MAGNÉTICOS

Selma Rozane Vieira
Departamento de Física – Universidade de Sergipe

Uma transição de fase é caracterizada por singularidades nas suas funções termodinâmicas: energia livre e derivadas correspondentes com, por exemplo, magnetização e susceptibilidade. Transições de fase onde as primeiras derivadas dos potenciais termodinâmicos variam descontinuamente chama-se transição de fase de primeira ordem. Quando as segundas derivadas (isto é, as funções respostas) variam descontinuamente ou são divergentes, enquanto as primeiras derivadas são contínuas, a

transição é dita de segunda ordem. Trataremos, basicamente, de propriedades termodinâmicas em sistemas magnéticos nas vizinhanças de uma temperatura crítica T_c (de uma transição de segunda ordem) – fenômeno crítico. O ponto central da teoria dos fenômenos críticos diz respeito aos expoentes críticos. A idéia fundamental, amparada por evidências experimentais, é que tais expoentes não dependem do material (ou sistema) específico e sim: da dimensionalidade espacial do sistema; da dimensão e simetria do parâmetro de ordem e do alcance das interações responsáveis pelo comportamento físico do sistema. O conjunto dos expoentes críticos de um sistema obedece a regras bem definidas estabelecidas pela termodinâmica, as chamadas desigualdades entre expoentes. Sob condições muito especiais estas desigualdades tornam-se igualdades estritas (hipóteses de escalas ou hiperescala). Apresentaremos alguns exemplos de transições de primeira e segunda ordens em sistemas magnéticos ordenados e desordenados.

SIMETRIAS DO ESPAÇO-TEMPO

Washington Chagas Filho

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

A origem da massa contida em uma partícula elementar permanece ainda como um dos mistérios da Física contemporânea. Mecanismos quânticos de geração de massa através de processos dinâmicos de quebra de simetria contribuem parcialmente para a elucidação deste mistério, mas apenas nos casos em que uma simetria local está disponível para sofrer uma possível quebra dinâmica. Neste trabalho mostramos inicialmente que uma tal simetria existe no funcional de ação que descreve uma partícula relativística sem massa. A quebra dinâmica desta simetria pode, em princípio, gerar a massa da partícula. Mostramos também como a presença desta simetria abre a possibilidade de estendermos a álgebra das transformações no espaço-tempo de Minkowski.

GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO NO ESPAÇO REAL: ABORDAGENS A SISTEMAS MAGNÉTICOS DESORDENADOS

Douglas F. de Albuquerque

Departamento de Matemática, Universidade Federal de Sergipe

Durante muitos anos os estudos realizados para tratar os materiais encontrados na natureza utilizaram-se da conceituação idealizada do modelo mais simples do estado da matéria condensada, ou seja, o cristal ideal, concebido como tendo estrutura perfeita e íntegra simetria translacional. Contudo, a idealização simplificada dos sólidos mostra-se inadequada, mesmo para alguns materiais cristalinos reais simples, tais como ligas metálicas, soluções sólidas semicondutoras, semicondutores dopados, dentre outros. Nestes materiais a periodicidade em sua estrutura atômica coexiste com defeitos e com estados de não-equilíbrio de uma grande parte de seus constituintes (partículas e centros atômicos). De uma maneira geral, nos sólidos encontrados na natureza, ou ainda, nos cristais cuidadosamente preparados em laboratórios, a distribuição espacial dos centros atômicos, ou potenciais localizados, não forma uma estrutura cristalina que possa ser considerada rigorosamente perfeita. Em um grande número de situações reais, estes centros atômicos se encontram distribuídos em todo material de maneira completamente aleatória. Em particular, um significativo aumento do entendimento no comportamento

dos fenômenos coletivos que ocorre nos materiais magnéticos são provenientes do estudo dos sistemas magnéticos que exibem desordem. A diluição magnética é uma técnica usualmente empregada para descrever o comportamento de materiais magnéticos desordenados. Esta técnica tem atraído a atenção de diversos pesquisadores, tanto experimentais quanto teóricos, durante os últimos anos. Dentro deste contexto, pretende-se apresentar os aspectos fenomenológicos do grupo de renormalização no espaço real (GRER) os quais tem sido utilizados largamente na literatura e fornecidos resultados quantitativos e qualitativamente importantes para o estudo de uma grande variedade de comportamentos críticos de sistemas clássicos e quânticos de redes de spins. Em particular, pretende-se estender os resultados dos modelos puros e desordenados de sistemas de spins de Ising encontrado sob diferentes abordagens fenomenológicos das teorias de GR.

O ESTADO DA ARTE NO CÁLCULO DE PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E ELETRÔNICAS DE SÓLIDOS

Luis Alberto Terrazos Javier

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Devido a grande importância tecnológica dos materiais (metais, semicondutores, isolantes.), intimamente ligada a revolução tecnológica do século XX, estes são os materiais mais estudados tanto do ponto de vista experimental como teórico. E essa importância tem um reflexo grande na área de estrutura eletrônica. A resolução da equação de Khon- Shan baseado no formalismo do funcional da densidade resolve o problema de muitos corpos na aproximação de um corpo. Essa equação se resolve utilizando os métodos ab-initio atuais (LAPW, LMTO, FHI, Siesta) que forma o “ estado da arte” para o calculo da estrutura eletrônica de sólidos e assim podemos prever as propriedades estruturais (parâmetros de rede, relaxação estrutural..) e eletrônicas (densidade de estados, densidade eletrônica, estrutura de bandas) com uma grande precisão. Podemos obter os parâmetros hiperfinos (o deslocamento isomérico, campo hiperfino, o gradiente de campo elétrico) e as propriedades magnéticas (momento magnético). Será apresentada de uma forma simples e clara os mecanismos que levam a obtenção dessas propriedades e parametros.

SIMULAÇÃO DE DEFEITOS E PARÂMETROS DE CAMPO CRISTALINO: PREVISÃO DE NOVOS MATERIAIS FOTÔNICOS?

Marcos Antonio Couto dos Santos, DEBI/UESB

Mário Ernesto Giroldo Valerio, DFI/UFS

A implantação de íons luminescentes em matrizes cristalinas isolantes tem sido usada para incrementar a tecnologia laser e de cintiladores. Os estudos, geralmente experimentais, buscam a preparação e dopagem de novas matrizes cristalinas, que atinjam rendimentos quânticos cada vez mais expressivos. Por outro lado, estudos de simulação fenomenológica usam as posições experimentais dos níveis energia dos íons Ln^{3+} em cristais, para simular as funções de onda dos autoestados e reproduzir algumas propriedades magneto-ópticas. No entanto, as simulações não têm considerado a distorção causada na vizinhança do sítio tornado opticamente ativo pela dopagem. Várias são as razões para haver distorção: diferença entre as nuvens eletrônicas, entre as valências e entre os tamanhos dos íons substituintes e substituídos. Introduzir estas

diferenças através de potenciais de interação (Buckingham e harmônico), leva a novas posições dos primeiros vizinhos do sítio luminescente. Naturalmente, isto altera a simetria local e, conseqüentemente, o esquema de níveis de energia e suas autofunções. Calculando os chamados parâmetros de campo cristalino, podemos identificar a simetria local, antes e depois de considerar as distorções. Conhecendo a estrutura da matriz não dopada, poderemos prever a nova simetria local e, conseqüentemente, a potencial aplicação do cristal como novo material fotônico.

CNPq-FAPES

O MUNDO DOS MATERIAIS MAGNÉTICOS

Cláudio A. Macêdo

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Existem evidências que sustentam que os chineses já usavam a bússola antes de 2500 a. C. O poder da magnetita em atrair o ferro consta dos escritos de Tales de Mileto (640 a 548 a.C.). O fenômeno que a magnetita pode induzir o ferro a adquirir poder atrativo foi mencionado por Sócrates (470 a 399 a. C.). Assim, o magnetismo permanente e o magnetismo induzido representam duas das primeiras descobertas científicas da humanidade. Contudo, o único interesse real em magnetismo na antiguidade parece ter sido o concernente com seu uso na construção da bússola. A descoberta dos pólos magnéticos só ocorreu por volta de 1269 d. C. e a investigação quantitativa das forças entre os pólos magnéticos apenas foi iniciada por Coulomb (1736-1806). Nos últimos duzentos anos, grande esforço científico foi empregado na determinação das propriedades magnéticas dos materiais. Um aspecto característico dos avanços conseguidos até o momento é a descoberta da existência de quatorze tipos diferentes de ordem magnética em sólidos. Os tipos de magnetismo conhecidos são: *diamagnetismo*, *ferromagnetismo*, *antiferromagnetismo*, *paramagnetismo*, *ferrimagnetismo*, *ferromagnetismo incipiente*, *metamagnetismo*, *superparamagnetismo*, *speromagnetismo*, *asperomagnetismo*, *sperimagnetismo*, *vidro de spin*, *helimagnetismo* e *mictomagnetismo*. Sob o aspecto tecnológico os materiais magnéticos são classificados em três grandes tipos: *magnetos duros*, *magnetos moles* e *de gravação magnética*. São materiais magnéticos que sustentam o armazenamento de dados computacionais, as telecomunicações, os equipamentos eletrônicos e os equipamentos industriais modernos. O mercado de materiais magnéticos movimenta o equivalente a dezenas de bilhões de dólares por ano. As aplicações envolvem a produção anual de cerca de duas centenas de milhões de *drives* de disco rígido e de várias centenas de milhões de motores elétricos com magnetos permanentes. As aplicações tecnológicas estão sendo fortemente expandidas com a contribuição da *nanotecnologia* e com a emergência da área de *eletrônica de spin*. Toda a produção tecnológica atual é centrada no uso de cerca de doze variedades de compostos magnéticos, porém existe uma intensa busca de novos materiais magnéticos com propriedades especiais desejáveis para futuros desenvolvimentos tecnológicos. A pesquisa teórica e experimental das propriedades magnéticas dos materiais continua intensa e desafiadora.

RESUMOS

Palestras convidadas

EXPLORANDO SIMETRIAS EM PROBLEMAS DE COLISÕES QUÂNTICAS

Marco A. P. Lima

Instituto de Física "Gleb Wataghin", - UNICAMP

13083-970, Campinas, São Paulo, Brasil

As seções de choque de espalhamento de elétrons de baixa energia por moléculas são importantes para a modelagem de ambientes de descarga (plasmas de baixa temperatura). As colisões entre elétrons e moléculas do plasma geram espécies altamente reativas, como radicais, íons e átomos, que podem iniciar processos químicos como corrosão, polimerização, diamantização, nitretação, etc. A modelagem numérica dos chamados plasmas frios depende do conhecimento destas seções de choque. Alguns destes dados não podem ser obtidos experimentalmente e precisam ser calculados. A demanda computacional para cálculos de espalhamento de elétrons de baixa energia por moléculas poliatômicas (a partir de primeiros princípios) é muito grande. Tal demanda cresce rapidamente com o número de elétrons do alvo, pois colisões de baixa energia exigem uma descrição apropriada de efeitos de polarização (distorção da nuvem eletrônica) e de acoplamento entre canais de colisão (as moléculas podem sofrer excitações rotacionais, vibracionais e/ou eletrônicas durante o processo de colisão). Para o espalhamento de elétrons por moléculas, o método Multicanal de Schwinger (SMC) com Pseudopotenciais (Bettega et al., Phys. Rev. A**47**, 1111 (1993)) tem sido aplicado para um grande número de alvos pesados, tais como CF₄, CCl₄, SiCl₄, SiBr₄ and SiI₄, CH₂Cl₂, CH₃Cl, CFCI₃, CF₂Cl₂ e CF₃Cl (e.g. Varella et al., Phys. Rev. A**60**, 3684 (1999)). Apesar do uso de pseudopotenciais ter permitido estudos de colisões de elétrons contra alvos grandes, a maioria destes cálculos está restrita à aproximação de alvo congelado (aproximação estático-troca). Cálculos mais sofisticados, incluindo acoplamento de canais abertos e fechados foram feitos para sistemas relativamente pequenos (por exemplo, Na₂, de Natalense et al., Phys Rev. Lett. **81**, 3832 (1998)). Para o espalhamento de pósitrons (a “antimatéria” do elétron) por moléculas, cálculos com o Método Multicanal de Schwinger (Germano et al. Phys. Rev. A**47**, 1111 (1993); da Silva et al. Phys. Rev. A**49**, R1527 (1994)) de seções de choque e de parâmetros que propiciam estudos de aniquilação de pares elétron-pósitron (tipo matéria-antimatéria) durante a colisão, envolvem dificuldades ainda maiores. Isto porque a descrição das forças de correlação-polarização para energias baixas exige um grande número de funções de base (configurações eletro-positrônicas), mesmo para sistemas leves. Nesta palestra revisaremos nosso progresso recente na solução destes problemas (Azevedo et al., Phys. Rev. A**63**, 62703 (2001), e Varella et al., Phys Rev. A**63**, 52705 (2001)), com ênfase em como explorar simetrias do problema quântico de colisões, e como isso permite a simplificação destas soluções e a obtenção de resultados com boa concordância com medidas experimentais.

APLICAÇÃO DE TÉCNICAS DE ABSORÇÃO DE RAIOS-X NO ESTUDO DE MATERIAIS MAGNÉTICOS

F.C. Vicentin

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe
e Laboratório Nacional de Luz Síncrotron

A espectroscopia de absorção de raios-X (XAS: X-ray Absorption Spectroscopy) corresponde à medida da seção de choque para a absorção de fótons pelos elétrons de camadas internas. Devido à sua seletividade atômica, ela permite a investigação da ordem estrutural local em torno de um dado átomo em uma matriz complexa, a determinação da sua estrutura eletrônica e, devido à abertura proporcionada pelas propriedades de polarização bem definidas da luz síncrotron, o conhecimento da sua estrutura anisotrópica, tanto geométrica quanto magnética. Essa quantidade de informações é obtida pela combinação de estudos próximos à borda de absorção (XANES: X-ray Absorption Near Edge Structure) e da estrutura fina oscilatória estendida a centenas de elétrons-volt acima da borda (EXAFS: Extended X-ray Absorption Fine Structure). Esta técnica está intimamente ligada às fontes síncrotron devido à necessidade de um espectro contínuo de luz policromática. Além disto, as propriedades de polarização circular possibilitam o estudo do dicroísmo circular magnético de raios-X (XMCD: X-ray Magnetic Circular Dichroism), fornecendo informações sobre o magnetismo local em torno de um determinado elemento químico.

SUPERSIMETRIA: UMA DAS IDÉIAS FUNDAMENTAIS DA NOVA FÍSICA DO SÉCULO XXI

Fernando Miguel P. Chaves

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

As simetrias têm desempenhado um papel fundamental na Física. À cada simetria corresponde uma grandeza conservada, e a busca de leis de conservação e de grandezas conservadas, tem sido, a partir da síntese da primeira grande contradição de filosofia, qual seja, a contradição entre o Uno imóvel de Parmenides e o universo multifacetado e em constante mutação de Heráclito, o fio condutor da elaboração da filosofia natural (a Física) no ocidente. A supersimetria é uma simetria muito especial entre as partículas que obedecem (no universo conceitual da Mecânica Quântica) à estatística de Fermi-Dirac, os fermions, e partículas que obedecem à estatística de Bose-Einstein, os bosons. Supõe-se que a cada partícula fermiônica do Modelo Padrão, como elétron, muon, tau, etc, corresponde um parceiro bosônico com características físicas análogas mas com spin inteiro: selétron, o smuon, o stau. Da mesma forma à cada boson do Modelo Padrão, como o foton e os bosons Z e W, corresponde um parceiro de spin fracionário: o fotino, o zino e o wino. Neste trabalho procuramos mostrar como esta idéia tem sido valiosa em vários contextos da Física - o estabelecimento de uma teoria quântica de gravitação (supergravidade), a formulação da Física de Higgs, a explicação da matéria escura do Universo, e a teoria de cordas (supercordas).

A FÍSICA NO ENSINO MÉDIO DAS ESCOLAS DE SERGIPE

Divanizia do Nascimento Souza

Departamento de Educação, Universidade Federal de Sergipe

O número de licenciados em física lecionando no Ensino Médio das escolas de Sergipe sempre esteve abaixo do necessário. Nas escolas deste Estado esta disciplina é de responsabilidade de professores com formações diversas; além dos licenciados em física, são professores dessa disciplina graduandos e graduados de vários cursos. Atualmente, este quadro apresenta uma tendência à mudanças; com a formação de

uma quantidade maior de estudantes nos cursos regulares de Licenciatura em Física e também com a graduação de profissionais que já atuam na educação pública por meio do Projeto de Qualificação Docente (PQD). A formação de professores de física pelo PQD pode alterar significativamente o quadro referente ao ensino desta disciplina nas escolas do interior do Estado, onde a ausência de licenciados é ainda mais crítica. Tanto na capital quanto no interior, as atividades desta disciplina limitam-se, normalmente, às salas de aula, com a utilização de poucos recursos didáticos. Poucas escolas possuem laboratórios com experimentos de física, as que possuem laboratórios melhor equipados são as federais e algumas particulares. Algumas escolas públicas estaduais possuem laboratórios móveis contendo módulos com experimentos para apresentações nas salas de aula. As feiras de ciências representam um momento importante de divulgação da física, porque durante suas realizações são apresentados experimentos variados sobre fenômenos que são estudados quase sempre de forma teórica durante o restante do ano letivo. Nos últimos anos, a participação de escolas particulares e públicas, principalmente federais, na Olimpíada Brasileira de Física tem despertado o interesse de professores para uma melhor condução desta disciplina. O quadro atual e perspectivas do ensino de física nas escolas de Sergipe serão apresentados nesta palestra

ALGUNS PROBLEMAS EPISTEMOLÓGICOS SUSCITADOS PELA TEORIA QUÂNTICA

Jenner Bastos
UFAL

SIMETRIA NA ORIGEM MOLECULAR DA VIDA: QUIRALIDADE

Frederico G. C. Cunha
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Um dos grandes dilemas filosóficos de todos os tempos se encontra na discussão da origem da existência, e mais particularmente, da vida. O papel da ciência neste campo se limita à proposição de teorias e busca de confirmações experimentais para as mesmas. Evidências de evolução darwiniana direcionam esta pesquisa para a busca de formas de vida mais simples, as quais poderiam ser os primeiros ancestrais das modernas formas de vida. Por um outro lado, as evidências existentes sobre a atmosfera pré-biótica apontam para a possibilidade de formação de complexas moléculas orgânicas anteriores ao aparecimento da vida. Uma lacuna se apresenta então entre formas moleculares complexas e conjuntos de formas moleculares, organizadas, e com vida. O processo de organização que levou à formação das primeiras proteínas e cadeias nucleotídicas exigiu a seleção entre estas formas moleculares daquelas que apresentam a correta simetria, ou quiralidade. Exploraremos o papel de superfícies no processo de seleção de formas moleculares homoquirais que podem ter propiciado o substrato para a formação da vida. Para este fim é utilizado o microscópio de tunelamento de elétrons, uma poderosa ferramenta de análise superficial com resolução molecular.

TRANSIÇÕES DE FASE EM SISTEMAS MAGNÉTICOS

Selma Rozane Vieira

Departamento de Física – Universidade de Sergipe

Uma transição de fase é caracterizada por singularidades nas suas funções termodinâmicas: energia livre e derivadas correspondentes com, por exemplo, magnetização e susceptibilidade. Transições de fase onde as primeiras derivadas dos potenciais termodinâmicos variam descontinuamente chama-se transição de fase de primeira ordem. Quando as segundas derivadas (isto é, as funções respostas) variam descontinuamente ou são divergentes, enquanto as primeiras derivadas são contínuas, a transição é dita de segunda ordem. Trataremos, basicamente, de propriedades termodinâmicas em sistemas magnéticos nas vizinhanças de uma temperatura crítica T_c (de uma transição de segunda ordem) – fenômeno crítico. O ponto central da teoria dos fenômenos críticos diz respeito aos expoentes críticos. A idéia fundamental, amparada por evidências experimentais, é que tais expoentes não dependem do material (ou sistema) específico e sim: da dimensionalidade espacial do sistema; da dimensão e simetria do parâmetro de ordem e do alcance das interações responsáveis pelo comportamento físico do sistema. O conjunto dos expoentes críticos de um sistema obedece a regras bem definidas estabelecidas pela termodinâmica, as chamadas desigualdades entre expoentes. Sob condições muito especiais estas desigualdades tornam-se igualdades estritas (hipóteses de escalas ou hiperescala). Apresentaremos alguns exemplos de transições de primeira e segunda ordens em sistemas magnéticos ordenados e desordenados.

SIMETRIAS DO ESPAÇO-TEMPO

Washington Chagas Filho

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

A origem da massa contida em uma partícula elementar permanece ainda como um dos mistérios da Física contemporânea. Mecanismos quânticos de geração de massa através de processos dinâmicos de quebra de simetria contribuem parcialmente para a elucidação deste mistério, mas apenas nos casos em que uma simetria local está disponível para sofrer uma possível quebra dinâmica. Neste trabalho mostramos inicialmente que uma tal simetria existe no funcional de ação que descreve uma partícula relativística sem massa. A quebra dinâmica desta simetria pode, em princípio, gerar a massa da partícula. Mostramos também como a presença desta simetria abre a possibilidade de estendermos a álgebra das transformações no espaço-tempo de Minkowski.

GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO NO ESPAÇO REAL: ABORDAGENS A SISTEMAS MAGNÉTICOS DESORDENADOS

Douglas F. de Albuquerque

Departamento de Matemática, Universidade Federal de Sergipe

Durante muitos anos os estudos realizados para tratar os materiais encontrados na natureza utilizaram-se da conceituação idealizada do modelo mais simples do estado da matéria condensada, ou seja, o cristal ideal, concebido como tendo estrutura perfeita e

íntegra simetria translacional. Contudo, a idealização simplificada dos sólidos mostra-se inadequada, mesmo para alguns materiais cristalinos reais simples, tais como ligas metálicas, soluções sólidas semicondutoras, semicondutores dopados, dentre outros. Nestes materiais a periodicidade em sua estrutura atômica coexiste com defeitos e com estados de não-equilíbrio de uma grande parte de seus constituintes (partículas e centros atômicos). De uma maneira geral, nos sólidos encontrados na natureza, ou ainda, nos cristais cuidadosamente preparados em laboratórios, a distribuição espacial dos centros atômicos, ou potenciais localizados, não forma uma estrutura cristalina que possa ser considerada rigorosamente perfeita. Em um grande número de situações reais, estes centros atômicos se encontram distribuídos em todo material de maneira completamente aleatória. Em particular, um significativo aumento do entendimento no comportamento dos fenômenos coletivos que ocorre nos materiais magnéticos são provenientes do estudo dos sistemas magnéticos que exibem desordem. A diluição magnética é uma técnica usualmente empregada para descrever o comportamento de materiais magnéticos desordenados. Esta técnica tem atraído a atenção de diversos pesquisadores, tanto experimentais quanto teóricos, durante os últimos anos. Dentro deste contexto, pretende-se apresentar os aspectos fenomenológicos do grupo de renormalização no espaço real (GRER) os quais tem sido utilizados largamente na literatura e fornecidos resultados quantitativos e qualitativamente importantes para o estudo de uma grande variedade de comportamentos críticos de sistemas clássicos e quânticos de redes de spins. Em particular, pretende-se estender os resultados dos modelos puros e desordenados de sistemas de spins de Ising encontrado sob diferentes abordagens fenomenológicas das teorias de GR.

O ESTADO DA ARTE NO CÁLCULO DE PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E ELETRÔNICAS DE SÓLIDOS

Luis Alberto Terrazos Javier

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Devido a grande importância tecnológica dos materiais (metais, semicondutores, isolantes.), intimamente ligada a revolução tecnológica do século XX, estes são os materiais mais estudados tanto do ponto de vista experimental como teórico. E essa importância tem um reflexo grande na área de estrutura eletrônica. A resolução da equação de Khon- Shan baseado no formalismo do funcional da densidade resolve o problema de muitos corpos na aproximação de um corpo. Essa equação se resolve utilizando os métodos ab-initio atuais (LAPW, LMTO, FHI, Siesta) que forma o “estado da arte” para o calculo da estrutura eletrônica de sólidos e assim podemos prever as propriedades estruturais (parâmetros de rede, relaxação estrutural..) e eletrônicas (densidade de estados, densidade eletrônica, estrutura de bandas) com uma grande precisão. Podemos obter os parâmetros hiperfinos (o deslocamento isomérico, campo hiperfino, o gradiente de campo elétrico) e as propriedades magnéticas (momento magnético). Será apresentada de uma forma simples e clara os mecanismos que levam a obtenção dessas propriedades e parametros.

SIMULAÇÃO DE DEFEITOS E PARÂMETROS DE CAMPO CRISTALINO: PREVISÃO DE NOVOS MATERIAIS FOTÔNICOS?

Marcos Antonio Couto dos Santos, DEBI/UESB

Mário Ernesto Giroldo Valerio, DFI/UFS

A implantação de íons luminescentes em matrizes cristalinas isolantes tem sido usada para incrementar a tecnologia laser e de cintiladores. Os estudos, geralmente experimentais, buscam a preparação e dopagem de novas matrizes cristalinas, que atinjam rendimentos quânticos cada vez mais expressivos. Por outro lado, estudos de simulação fenomenológica usam as posições experimentais dos níveis energia dos íons Ln^{3+} em cristais, para simular as funções de onda dos autoestados e reproduzir algumas propriedades magneto-ópticas. No entanto, as simulações não têm considerado a distorção causada na vizinhança do sítio tornado opticamente ativo pela dopagem. Várias são as razões para haver distorção: diferença entre as nuvens eletrônicas, entre as valências e entre os tamanhos dos íons substituintes e substituídos. Introduzir estas diferenças através de potenciais de interação (Buckingham e harmônico), leva a novas posições dos primeiros vizinhos do sítio luminescente. Naturalmente, isto altera a simetria local e, conseqüentemente, o esquema de níveis de energia e suas autofunções. Calculando os chamados parâmetros de campo cristalino, podemos identificar a simetria local, antes e depois de considerar as distorções. Conhecendo a estrutura da matriz não dopada, poderemos prever a nova simetria local e, conseqüentemente, a potencial aplicação do cristal como novo material fotônico.

CNPq-FAPES

O MUNDO DOS MATERIAIS MAGNÉTICOS

Cláudio A. Macêdo

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Existem evidências que sustentam que os chineses já usavam a bússola antes de 2500 a. C. O poder da magnetita em atrair o ferro consta dos escritos de Tales de Mileto (640 a 548 a.C.). O fenômeno que a magnetita pode induzir o ferro a adquirir poder atrativo foi mencionado por Sócrates (470 a 399 a. C.). Assim, o magnetismo permanente e o magnetismo induzido representam duas das primeiras descobertas científicas da humanidade. Contudo, o único interesse real em magnetismo na antiguidade parece ter sido o concernente com seu uso na construção da bússola. A descoberta dos pólos magnéticos só ocorreu por volta de 1269 d. C. e a investigação quantitativa das forças entre os pólos magnéticos apenas foi iniciada por Coulomb (1736-1806). Nos últimos duzentos anos, grande esforço científico foi empregado na determinação das propriedades magnéticas dos materiais. Um aspecto característico dos avanços conseguidos até o momento é a descoberta da existência de quatorze tipos diferentes de ordem magnética em sólidos. Os tipos de magnetismo conhecidos são: *diamagnetismo*, *ferromagnetismo*, *antiferromagnetismo*, *paramagnetismo*, *ferrimagnetismo*, *ferromagnetismo incipiente*, *metamagnetismo*, *superparamagnetismo*, *speromagnetismo*, *asperomagnetismo*, *sperimagnetismo*, *vidro de spin*, *helimagnetismo* e *mictomagnetismo*. Sob o aspecto tecnológico os materiais magnéticos são classificados em três grandes tipos: *magnetos duros*, *magnetos moles* e *de gravação magnética*. São materiais magnéticos que sustentam o armazenamento de dados computacionais, as telecomunicações, os equipamentos eletrônicos e os equipamentos industriais modernos. O mercado de materiais magnéticos movimentava o equivalente a dezenas de bilhões de dólares por ano. As aplicações envolvem a produção anual de cerca de duas centenas de milhões de *drives* de disco rígido e de várias centenas de milhões de motores elétricos com magnetos permanentes. As aplicações tecnológicas estão sendo fortemente expandidas com a contribuição da *nanotecnologia* e com a

emergência da área de *eletrônica de spin*. Toda a produção tecnológica atual é centrada no uso de cerca de doze variedades de compostos magnéticos, porém existe uma intensa busca de novos materiais magnéticos com propriedades especiais desejáveis para futuros desenvolvimentos tecnológicos. A pesquisa teórica e experimental das propriedades magnéticas dos materiais continua intensa e desafiadora.

Mini-cursos

MC1

ESPALHAMENTO DE ELÉTRONS E PÓSITRONS POR MOLÉCULAS: DA DESCRIÇÃO DO ALVO À DINÂMICA DE COLISÕES

Marco A. P. Lima

Instituto de Física "Gleb Wataghin", UNICAMP

13083-970, Campinas, São Paulo, Brasil

O objetivo do curso é apresentar uma teoria de colisões quântica capaz de tratar o problema de muitos corpos inerente ao processo de colisões de elétrons (e pósitrons) de baixa energia com moléculas. O conteúdo do curso envolve: (i) apresentar as técnicas utilizadas para a descrição do alvo (método Hartree-Fock, e de Interação de Configurações); (ii) elaborar e resolver o problema quântico do espalhamento de partículas por potenciais (desenvolver a linguagem e apresentar estratégias de solução) e (iii) apresentar detalhadamente o Método Multicanal de Schwinger para o espalhamento de elétrons (e pósitrons) de baixa energia por moléculas. Nossa intenção é que no final do curso o aluno tenha uma boa visão de uma técnica moderna para resolver problemas relativamente complexos de mecânica quântica de colisões. Pré-requisito: noções elementares de mecânica quântica.

MC2

RADIOTERAPIA – SERVIÇOS, EQUIPAMENTOS E FONTES

Divanizia do Nascimento Souza

Departamento de Educação, Universidade Federal de Sergipe

A radioterapia é uma das três principais modalidades de tratamento de câncer. Quase sempre, a possibilidade de preservação do órgão a ser tratado é o principal fator de escolha desta modalidade de tratamento. A história da radioterapia é recente, iniciando-se logo após a descoberta dos raios X em 1895 por Roentgen. O início da radioterapia no Brasil foi em 1901, no Rio Grande do Sul, com a utilização de um aparelho de raios X para tratamento de um tumor de pele. Em meados da década de 50 do século XX foram instaladas as primeiras unidades de cobalto 60 no Brasil, em hospitais do Rio de Janeiro e São Paulo. As atividades de Física Médica no Brasil iniciaram no ano de 1956, quando o serviço de radioterapia do Instituto Nacional do Câncer no Rio de Janeiro contratou o primeiro físico. Neste mesmo ano foram fundados o Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, com a Divisão de Física na Saúde, e a Comissão Nacional de Energia Nuclear. Em 1969 foi criada a Associação Brasileira de Física Médica. O primeiro acelerador linear do Brasil foi instalado em 1972, no Hospital Alemão Oswaldo Cruz, em São Paulo. Atualmente, o principal objetivo dos estudos referentes à radioterapia é o desenvolvimento de técnicas e equipamentos que permitam a liberação

de doses altas de radiação no volume a ser tratado, mantendo-se as doses nos tecidos vizinhos em valores tão baixos quanto possível. Com a constante modernização das técnicas e equipamentos utilizados nesta área, tem crescido a necessidade de profissionais especializados, físicos, médicos e técnicos. Os serviços de radioterapia mais modernos dispõem, além de aceleradores lineares e unidades de cobalto, de unidades de braquiterapia de alta taxa de dose e de tomógrafos computadorizados com interface para o planejamento. Estes serviços podem realizar tratamentos radioterápicos de alta complexidade. Neste mini-curso serão apresentados os principais equipamentos, técnicas, normas e unidades utilizados em radioterapia.

MC3

SUPERSIMETRIA

Stoian I. Zlatev

Departamento de Matemática, Universidade Federal de Sergipe

“A proposta da supersimetria é tão bonita, que a Natureza não pode se recusar a aceitá-la.” A supersimetria é a “última simetria”. Ela confunde bósons e férmions, simetrias do espaço – tempo e simetrias, chamadas “internas”. Ao contrário às outras idéias (as simetrias “locais”, chamadas simetrias de gauge, por exemplo), que influenciaram o desenvolvimento da Física Teórica nas últimas décadas, a supersimetria não se baseava em uma matemática já desenvolvida, mas criou sua própria matemática. Pretendemos dar uma introdução aos princípios e alguns conceitos básicos da supersimetria. Como ilustrações usaremos modelos supersimétricos na Mecânica Quântica (não-relativística e relativística). O programa do mini-curso: (1) Simetrias; (2) Grupos e Álgebras de Lie, (3) Superálgebras, (4) Spinors, (5) Supersimetrias Físicas, (6) Mecânica Quântica Supersimétrica de Partículas.

Resumos das apresentações orais

As apresentações orais de trabalhos por pesquisadores ligados ao DFI serão realizadas na tarde do dia 1º/Agosto, nas salas 02 e 06 do Departamento de Física. Haverá quatro seções ao todo, duas (ocorrendo em paralelo) entre 14:00 e 16:00 horas, e duas simultâneas entre 16:30 e 18:00 horas. Cada apresentador disporá de um tempo da ordem de 15 minutos.

AO1

Data: 01/Agosto
Horário: 14:00 - 16:00
Local: DFI, sala 02
Grupo de trabalho: Produção e Caracterização de Materiais
Coordenador: Prof. Marcelo A. Macêdo

Produção e Caracterização de Materiais

IMPORTÂNCIA DOS FENÔMENOS LUMINESCENTES PARA O ESTUDO DA PRÉ-HISTÓRIA SERGIPANA

José Osman dos Santos, José Fernandes de Lima, Mário Ernesto Girolto Valerio
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

A luminescência é um fenômeno caracterizado pela emissão de luz a partir de um material, geralmente, isolante ou semicondutor, quando o mesmo absorve, previamente, energia de uma fonte de radiação externa. O comprimento de onda da luz emitida é característico da substância luminescente e não da radiação incidente. Usualmente, os estudos do fenômeno luminescente estão relacionados com a emissão de luz na região do visível, porém outros comprimentos de onda podem estar presentes no espectro de emissão da substância. Estes fenômenos luminescentes têm sido empregados em diversas áreas do conhecimento humano, como biologia, ciências de materiais, química, dentre outras. Porém, na Física estes fenômenos luminescentes têm sido utilizados intensamente, tanto na questão da caracterização de materiais, como no que se refere às suas aplicações tecnológicas, como por exemplo na datação de vestígios arqueológicos e geológicos de vários materiais. A datação por luminescência é uma alternativa ao radiocarbono quando nenhum material orgânico (osso, semente, madeira, etc.) está disponível, ou se a idade prevista exceder os limites de datação do radiocarbono (aproximadamente 50.000 anos). A datação por luminescência pode ser aplicada para estabelecer a idade de locais arqueológicos ou geológicos, datando cerâmicas, rochas (sujeitas a aquecimento), determinados solos ou sedimentos. O princípio da datação luminescente está fundamentado no fato de que a intensidade de emissão luminescente a partir de um dado vestígio cresce com a dose de radiação recebida pelo material. Neste trabalho serão apresentados os últimos resultados das datações termoluminescentes efetuadas nos sítios arqueológicos de Xingó, situados ao noroeste do estado de Sergipe. Estes resultados têm mostrado que os métodos empregados para datação de vestígios cerâmicos, no LPCM/DFI/UFS, apresentam uma grande potencialidade para determinar a cronologia dos sítios da região, assim contribuindo para a determinação da dinâmica de ocupação da região no passado.

PRODUÇÃO DE FILMES FINOS DOPADOS COM TERRAS RARAS PARA APLICAÇÃO EM DOSÍMETROS TERMOLUMINESCENTES DE RADIAÇÃO

Paulo J. R. Montes, Mário G. Valerio, Marcelo A. Macêdo
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Este trabalho está sendo desenvolvido no LPCM (Laboratório de Preparação e Caracterização de Materiais - UFS) e tem como objetivo associar nossa capacidade para produção de filmes finos com o estudo dos materiais termoluminescentes. Os filmes finos foram produzidos a partir da deposição de filmes óxidos em substratos de vidro e de aço inox através de um processo sol-gel utilizando a técnica “dip coating”. Foram produzidos filmes finos com 1 e 5 camadas a partir das soluções de $Y(NO_3)_3 \cdot 6H_2O$ (nitrato de ítrio) e $Y(NO_3)_3 \cdot 6H_2O$ dopada com neodímio através do Nd_2O_3 (óxido de neodímio) com ácido nítrico. Para todos os filmes, as soluções de partida foram produzidas utilizando-se água de coco como solvente. A sensibilidade à radiação gama (γ), alfa (α) e beta (β) dos substratos (vidro e aço inox) e dos filmes finos, produzidos com uma camada nestes substratos, foi investigada através da termoluminescência (TL).

Foram feitas medidas de radioluminescência das amostras submetidas à radiação beta (β). Foi observado que tanto os substratos quanto os filmes, com uma camada, de Y_2O_3 são sensíveis aos três tipos de radiação, sendo que para o sistema filme+substrato a intensidade das curvas de TL é maior, indicando que o filme parece possuir um sinal de TL próprio, que somado com a contribuição do substrato resulta em um sinal de TL mais intenso, comparando com o sinal apenas do substrato.

CARACTERIZAÇÃO POR TERMOLUMINESCÊNCIA DA CÊRAMICA DE GERMANATO DE BISMUTO ($Bi_4Ge_3O_{12}$)

Ronaldo S. Silva*, Zélia S. Macedo*, Antonio C. Hernandez**,
Mário Ernesto G. Valério*

*Universidade Federal de Sergipe, Departamento de Física, C. P.: 353; 49100-000 São Cristóvão, SE

**Universidade de São Paulo, Instituto de Física de São Carlos, Grupo Crescimento de Cristais e Materiais Cerâmicos. C. P.: 369; 13560-970 São Carlos, SP

Germanato de Bismuto ($Bi_4Ge_3O_{12}$ ou BGO) é um material cintilador com importantes aplicações comerciais e industriais, dentre elas podemos citar: Blocos Detetores em Tomografia por Emissão de Positrons e em Física de alta energia. Normalmente são produzidos pela técnica de Czochralski. Neste trabalho investigamos o potencial das cerâmicas de BGO como um detector de radiação. As vantagens de se usar cerâmica no lugar do monocristal são: a simplificada rota de produção e a facilidade de se produzir cerâmicas com diversas formas e tamanhos. Foram estudadas 4 tipos de amostras: monocristal, pó calcinado, cerâmica sinterizada no forno e cerâmica sinterizada a laser. A sinterização a laser de materiais cerâmicos é uma nova técnica implantada recentemente no GCCMC – IFSC – USP que tem se mostrado bastante eficiente na produção de BGO, produzindo cerâmicas com alta densidade relativa e boa transparência. O pó de BGO foi obtido por reação de estado sólido e caracterizado por difração de raio-x e termoluminescência (TL). Para as medidas de TL, as amostras foram irradiadas com raios β do $^{90}Sr/Y$ com uma dose de 1600GY a uma taxa de 0,45Gy/min, ou com radiação UV da lâmpada de Hg. A curva de TL de todas as amostras estudadas, irradiadas com radiação β ou UV, apresentaram o mesmo conjunto de picos centrados em torno de 75, 102 e 147°C. Os valores de ordem cinética e energia de cada pico também foram medidos.

EMISSION SPECTRA OF THERMOLUMINESCENCE OF QUARTZ AT LOW TEMPERATURES

A J J Santos, J F de Lima and M E G Valerio

Laboratório de Preparação e Caracterização de Materiais,
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe,
49.100-000, S. Cristóvão, SE, BRAZIL

We investigated the spectrum of TL at low and high temperature of Brazilian natural quartz samples. The samples were submitted to different thermal treatments and exposed to beta radiation ($^{90}Sr/^{90}Y$) at room temperature followed by a illumination with UV light, from a Hg lamp, at $-260^\circ C$. The TL readout were performed from $-260^\circ C$ up to room temperature (rate: $20^\circ C/min$), and from room temperature up to $450^\circ C$ (rate: $6^\circ C/s$). The spectra were measured from 280 to 600 nm in steps of 10 nm. The spectra

of treated samples revealed that the emission band of the peaks at low temperature is very similar to the emission bands of the peaks at high temperature, suggesting that the mechanism and the emission centers that generates the TL peaks at high temperatures are similar to the one ones that generates the peaks at low temperatures.

USO DA TÉCNICA DE TERMOLUMINESCÊNCIA PARA O CONTROLE DE QUALIDADE DE PASTAS CIMENTADAS ESPECIAIS

B. F. Santos Jr¹(*), M. E. G. Valério¹, E. F. S. Vieira², A. R. Cestari², C. R. Miranda³,
A. C. F. Conceição³

¹ Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

² Departamento de Química, Universidade Federal de Sergipe

³ Petrobrás

Neste trabalho empregou-se a técnica de termoluminescência (TL) na caracterização de pastas especiais para operações de cimentação em poços de petróleo. Seguindo as normas da American Petroleum Institute (API), moldes cúbicos das pastas de cimento contendo diferentes aditivos foram curados durante trinta dias. As medidas de termoluminescência, que consistem na captação de luz estimulada termicamente de um determinado material, foram realizadas desde a temperatura ambiente até 360°C, seguindo um programa de aquecimento linear. A posição e intensidades dos picos TL indicam os tipos e quantidades de defeitos opticamente ativos presentes nos minerais e são utilizados para monitorar os processos físico-químicos que acompanham as reações que ocorrem nas diversas etapas da preparação das pastas. Na pasta básica, contendo cimento, água e sílica, observaram-se picos de TL a 275 e 315°C. Nas pastas contendo agentes sililantes ramificados como aditivos, observou-se que esses sinais desapareceram. Essa supressão está associada a um aumento na resistência térmica e mecânica das pastas aditivadas, como comprovado anteriormente por ensaios de termogravimetria e de resistência à compressão. Dessa forma, a técnica de TL pode ser utilizada como uma nova ferramenta para caracterizar pastas cimentadas, que apresentem estabilidades termo-mecânicas maiores que as pastas convencionais (não-aditivadas).

Palavras Chave: termoluminescência, pastas de cimento, minerais

(*) bfsantos@fisica.ufs.com.br

PREPARAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE FILMES FINOS SOL-GEL DE ÓXIDO DE ESTRÔNCIO A PARTIR DA ÁGUA DE COCO

Edjane Rocha dos Santos, Marcelo Andrade Macêdo.

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Os problemas de corrosão nos poços bombeados da bacia SEAL devido a ação do gás CO₂ são de grande preocupação da PETROBRAS, pois estes tem ocasionado uma perda de milhares de dólares por ano. Este trabalho tem o objetivo de mostrar os primeiros resultados de uma das rotas possíveis de se minimizar o referido problema: revestir o aço com óxido de estrôncio. Os filmes foram preparados através da mistura da água de coco com o Sr(NO₃)₂ (nitrato de estrôncio) na concentração de 0,5 mol/litro. Eles foram depositados via técnica “dip-coating” do tipo batelada dividida em cinco estágios: imersão, retirada, deposição, drenagem e evaporação. A velocidade de decomposição foi de 10cm/min e o substrato usado foi o aço. Inicialmente foi realizado um tratamento

a 100 ° C por 30 min e depois um tratamento térmico final a 500, 600 e 700° C por 10 min. Os resultados demonstraram que os filmes tiveram uma boa aderência e com uma superfície lisa livre de rachaduras. Estes filmes serão caracterizados via difração de raio-X para determinação das fases cristalinas e do tamanho dos grãos e medidas da taxa de corrosão em soluções de NaCl de concentrações de 0,1, 0,5, 1, 2 e 3% na presença do gás CO₂.

O FILME FINO DE Cr₂O₃ NA PRESENÇA DO GÁS CO₂

Ramires M. Silva, Marcelo A. Macêdo

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Este trabalho trata de uma pesquisa que busca minimizar os principais problemas de corrosão de origem química e mecânica, que se apresentam nos poços de produção de petróleo da bacia SEAL, a fim de reduzir seus custos operacionais que chega a ser em torno de U\$ 723.000,00 anuais. Um dos meios para minimizar o efeito corrosivo do CO₂ é revestir as peças metálicas afetadas pela corrosão com camadas de óxido. Resultados preliminares indicam que o Cr₂O₃ pode ser um bom candidato para este fim, pois este apresentou uma boa aderência ao aço. Para obtenção de tal filme foi utilizada uma solução de Cr(NO₃)₃.9H₂O (nitrato de cromo) em água de coco; depositada sobre o substrato de aço (usado pela PETROBRÁS); secado à 100 °C e depois densificado à 500, 600, 700 e 800 °C por 1 min e 15 min. O comportamento anticorrosivo foi analisado via as técnicas de raios-X, microscopia de força atômica e potenciodinâmica. Os resultados revelaram uma alta cristalinidade com formação de domínios revestindo toda a superfície do aço. A taxa de corrosão relativa teve uma redução do fator de 5 após o aço ser revestido pelos filmes em um eletrólito de 3% NaCl sob um fluxo de 0,25 litro/min do gás CO₂.

ESTUDO DE XRD E SXS DE FILMES FINOS Li_xMn₂O₄

Cristiano T. de Meneses, Marcelo A. Macêdo, Flávio C. Vicentini

Laboratório de Preparação e Caracterização de Materiais,

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

José Marcos Sasaki

Departamento de Física, Universidade Federal de Ceará

Os filmes finos de LiMn₂O₄ tem ganhado atenção de diversos pesquisadores nas últimas décadas por ser o material mais promissor para produção de cátodo de baterias recarregáveis de íons de lítio. Mas para formar a estrutura desejada, não é tão fácil devido o Mn ter vários números de oxidação. O estudo em experimentos de XRD (difratometria de raios-X) e SXS (espectroscopia de absorção de raios-X moles) é extrema importância para detectar as propriedades eletrônicas de filmes finos Li_xMn₂O₄. Neste trabalho preparou-se filmes finos de Li_xMn₂O₄ pela dissolução de cloreto de manganês em água de coco processada, variando a dopagem do Li com valores de x entre 0 e 2,0. Os filmes foram preparados pelo método de dip-coating em substrato de platina e lâmina de microscópio e mergulhado no sol a uma velocidade 10cm/min, sendo em seguida tratados termicamente a 100 °C por 15 minutos para a retirada da água e densificado a 500 °C por 15 minutos. Após repetir o mesmo processo por 5 vezes, foi realizado uma densificação final por 120 minutos em diferentes temperaturas acima de 500 °C. As Medidas de SXS foram realizadas no LNLS em Campinas através

das técnicas de absorção de raios-X e as medidas de XRD foram realizadas no Laboratório de Espalhamento de Luz do Departamento de Física da UFC. Foram estudadas as bordas K e L_{2,3} do oxigênio e manganês, respectivamente, assim como as estruturas eletrônicas do óxido de manganês litiado de cada amostra através de XRD. Resultados preliminares de SXS nas amostras de x=0 mostram que nas bordas L_{2,3} do Mn e K do oxigênio existe uma transição de intensidade entre 500 °C e 800 °C, mostrando a formação provavelmente de uma estrutura com fase metaestável. Na temperatura de 500 °C a fase encontrada foi a do Mn₃O₄, à 620 °C formou-se a fase do metaestável Mn₅O₈ e a 800 °C observou-se novamente a mesma estrutura da temperatura de 500 °C. Já a análise de difratometria de raios-X revela a formação do óxido de manganês litiado juntamente com a fase Mn₃O₄ a partir de x=0,9 e é prevenida quando x=2,0. (CAPES-UFS,CNPq)

AO2

Data: 01/Agosto
Horário: 14:00 - 16:00
Local: DFI, sala 06
Grupos de trabalho: Física Estatística e Teoria da Matéria Condensada, Simulação Computacional de Materiais
Coordenador: Prof. Cláudio A. Macêdo

Física Estatística e Teoria da Matéria Condensada

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DO MODELO DE HATSUGAI-KOHMOTO

Francisco A. G. Almeida e Cláudio A. Macedo
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

O modelo de Hatsugai-Kohmoto representa um sistema magnético de elétrons itinerantes que inclui classes infinitas de interação. O modelo mostra efeitos muito importantes de sistemas de muitos corpos em geral. Neste trabalho implementamos um programa de simulação para o modelo de Hatsugai-Kohmoto unidimensional, utilizando o método de Monte Carlo quântico. O procedimento usado é o de Metropolis. Considera-se que as partículas estejam se movendo de um estado para outro; se a variação de energia ΔE for menor ou igual a zero o novo estado é aceito, mas se ΔE for maior que zero calcula-se então a probabilidade de transição com o valor de ΔE . A seguir é gerado um número aleatório uniformemente distribuído entre 0 e 1. De posse desse número aleatório, nós comparamos com a probabilidade de transição; se o número for menor ou igual, então o novo estado é aceito, se não, continua com seu valor antigo. Este procedimento é repetido até que um número conveniente de configuração seja obtida. Determinamos a energia média, calor específico e a magnetização em função da temperatura, para diversos valores de interação e de campo magnético. Os resultados da simulação obtidos para campo magnético nulo, estão consistentes com os resultados obtidos por outros métodos já conhecidos na literatura. Os cálculos da magnetização e todos os demais resultados obtidos com a aplicação de campo magnético são inéditos. (FAP-SE)

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DO MODELO DE HUBBARD COM DUAS BANDAS

Rodrigo de Farias Gomes, Cláudio A. Macêdo
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

A determinação das propriedades termodinâmicas dos metais de transição do grupo do ferro, que são sistemas magnéticos itinerantes com fortes correlações eletrônicas se estendendo por cinco bandas de energia, têm se constituído ao longo dos últimos setenta anos em um dos problemas mais desafiadores para a física estatística. O modelo de Hubbard foi criado para investigar as propriedades magnéticas de sistemas de elétrons correlacionados em bandas estreitas do tipo que ocorre nos metais de transição. Os estudos do modelo de Hubbard para uma única banda de energia têm sido objeto de milhares de trabalhos científicos nos últimos anos, porém a investigação para duas ou mais bandas de energia não tem recebido da comunidade de física estatística a atenção que a relevância e a complexidade do problema exige. Neste trabalho, consideramos o modelo de Hubbard para sistemas com uma e duas bandas. Desenvolvemos um programa computacional para calcular, no ensemble canônico, a dependência com a temperatura da energia média, entropia, calor específico e susceptibilidade magnética. O programa, escrito em FORTRAN, gera a matriz do operador hamiltoniano e, utilizando a técnica de diagonalização direta, determina os autovetores e autovalores desse operador. A seguir, são calculadas as diversas propriedades termodinâmicas em função da temperatura. Por razões computacionais, a simulação atualmente é limitada a sistemas com no máximo 8 sítios porém, os dados obtidos podem ser extrapolados para sistemas maiores contribuindo, assim, para o entendimento de sistemas reais. Nossos resultados mostram-se consistentes com os disponíveis na literatura, o que explicita a potencialidade do programa computacional desenvolvido para estudo de sistemas magnéticos itinerantes finitos.

PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DO MODELO DE STONER

Clélio B. C. Gomes e Cláudio A. Macêdo
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

O modelo de Stoner foi criado para explicar o mecanismo microscópico que determinam as propriedades termodinâmicas magnéticas de sistemas com uma banda estreita de energia eletrônica do tipo da existente nos metais de transição do grupo do ferro. O modelo considera o metal como um sistema de N elétrons em uma banda de energia parcialmente preenchida. Neste trabalho, desenvolvemos um estudo detalhado da técnica de campo médio aplicado ao modelo de Stoner considerando diversas formas de bandas eletrônicas. Obtivemos as relações matemáticas gerais da magnetização espontânea e da susceptibilidade magnética em função da temperatura para diferentes parâmetros do campo molecular e diferentes formas de bandas de energia eletrônica. Particularmente, analisamos cuidadosamente a temperatura de Curie, que é a temperatura em que o sistema sofre uma transição de fase, passando de uma fase ferromagnética para uma fase paramagnética. Determinamos graficamente a relação da temperatura de Curie em função do parâmetro que determina a forma da banda eletrônica. Identificamos o efeito nas propriedades termodinâmicas dos sistemas como decorrência do uso de formas diferentes das densidades de estados eletrônicos. Constatamos que a temperatura de Curie cresce sistematicamente com o crescimento da energia de interação e verificamos, também, que a temperatura de Curie cresce quando

o valor do parâmetro que determina a forma da banda eletrônica cresce entre zero e um determinado valor crítico, permanecendo constante a partir desse valor crítico.
(FAP-SE)

ANÁLISE DO MÉTODO DE MONTE-CARLO APLICADO AO MODELO DE HUBBARD

Samuel R. Oliveira Neto, André M. C. Souza
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

O método de Monte-Carlo quântico é feito a partir de uma formulação discreta da integral funcional da função de partição. Usando a transformação de Hubbard-Stratonovich discreta, a interação fermion-fermion é eliminada com a introdução de campos locais auxiliares. Estes campos admitem valores binários, tipo spins de Ising ($s = \pm 1$). Desta forma, a função de partição passa a ser escrita como um traço sobre funções dos novos campos, e o traço sobre os spins de Ising é feito usando o método de Monte-Carlo clássico com o uso do algoritmo de banho térmico. No caso do preenchimento da banda eletrônica for diferente do meio-cheio, termos da função de partição podem assumir valores negativos. A saída usual deste problema é considerar o módulo do valor negativo no cálculo das médias termodinâmicas. Isto traz consequências que até o presente não estão bem estabelecidas. Neste trabalho, estudamos a energia média e a susceptibilidade magnética do modelo de Hubbard para uma cadeia de seis sítios aplicando o método de Monte-Carlo quântico e comparamos sua solução com a obtida pelo método da diagonalização direta, que é exata neste limite. Observamos que os resultados do método de Monte-Carlo pioram em relação ao cálculo exato quanto mais nos afastamos da banda meio-cheia, nas regiões de baixas temperaturas e altos valores da interação local entre elétrons.

PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DO SmB₆

Cláudio A. Macedo e André M. C. Souza
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

O fenômeno de flutuação de valência ocorre em compostos de terras raras em que a proximidade do nível $4f$ da energia de Fermi leva a instabilidades na configuração de carga e nos momentos magnéticos. O semicondutor SmB₆ é um desses compostos. Nos últimos anos, incessantes esforços de pesquisa procuram desenvolver, ainda sem sucesso, uma teoria que explique todas as propriedades deste composto com um modelo físico unificado. O modelo de Falicov-Kimball considera os efeitos da interação elétron-buraco tendo em vista que no SmB₆ os íons Sm²⁺ ($4f^6$) são ionizados termicamente para produzir os íons Sm³⁺ ($4f^5$) e os elétrons de condução. Apresentamos neste trabalho um estudo computacional da dependência com a temperatura do calor específico e da susceptibilidade magnética do SmB₆, na região de temperaturas baixas, seguindo o modelo de Falicov-Kimball, mas tomando em conta os momentos magnéticos localizados devido aos spins $4f^5$. Empregamos o método de cálculo por diagonalização exata de pequenos *clusters* com a aplicação do ensemble grande canônico e de procedimentos de extrapolação para cadeias infinitas. Nossos resultados mostram uma curva de calor específico em temperaturas baixas que é muito similar a da forma da curva experimental do SmB₆, isto é, um máximo largo próximo a 40 K e um coeficiente de calor específico linear. Obtivemos a susceptibilidade magnética adicionando à curva

da susceptibilidade calculada, utilizando o modelo de Falicov-Kimball, com as contribuições para susceptibilidade originadas dos spins $4f^5$. A concordância com os dados experimentais na região de temperaturas examinadas, isto é, entre 0 e 40 K, é muito boa. A comparação dos comportamentos do calor específico e da susceptibilidade, obtidos neste trabalho, com os dados experimentais, evidenciam que a dinâmica fermiônica representada pelo modelo de Falicov-Kimball expressa uma parte importante das propriedades termodinâmicas magnéticas do SmB_6 . (FAP-SE)

PONTOS DE INTERSEÇÃO EM CURVAS DE CALOR ESPECÍFICO NO MODELO DE HUBBARD

A.M.C. Souza e C. A. Macêdo

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

A literatura revela um grande número de materiais em que as curvas de calor específico versus temperatura, quando representadas para diferentes valores de uma segunda variável termodinâmica, cruzam-se em um ou até dois valores bem definidos de temperatura não nulos. Investigamos o fenômeno de pontos de interseção em curvas de calor específico, em função da temperatura, para o modelo de Hubbard unidimensional e assimétrico. O modelo de Hubbard assimétrico é estudado através do método da diagonalização exata em cadeias finitas e em seguida é utilizada a técnica de extrapolação para a cadeia infinita. Foi definida uma região onde ocorrem os pontos de interseção em função da interação local dos elétrons (U) e a da magnitude relativa (R) das integrais de transferência dos elétrons de spin up e down. Observamos que na região onde há pontos de interseção as curvas do calor específico apresentam apenas um pico, enquanto que quando não há interseção as curvas apresentam dois picos, indicando uma associação entre a ocorrência dos pontos de interseção e a localização gradual dos férmions. (FAP-SE)

Simulação Computacional de Materiais

MODELAGEM COMPUTACIONAL DOS SISTEMAS LiMAlF_6 ($M = \text{Ca}$ ou Sr) DOPADOS COM ÍONS DE TERRAS RARAS

Mário E. G. Valerio, Jomar B. Amaral

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

As técnicas de modelagem computacional estão agora presentes nas Ciências do estado sólido e molecular. Uma grande variedade de ferramentas está disponível, variando desde modelagem de potenciais interatômicos que permitem uma rápida e eficiente modelagem das estruturas incluindo um grande número de átomos, até modelagem da estrutura eletrônica, magnética e suas propriedades. Vários pacotes computacionais foram desenvolvidos por diferentes pesquisadores para aplicações em simulações estruturais e envolvendo defeitos pontuais, o GULP (General Utility Lattice Program) desenvolvido por J. Gale, tem demonstrado ser o programa mais flexível e mais confiável e que tem sido usado por um maior número de pesquisadores. Utilizando o GULP as estruturas do LiCaAlF_6 (LiCAF), LiSrAlF_6 (LiSAF) e alguns fluoretos são analisadas e modeladas. Potenciais interiônicos são ajustados para dados experimentais e estes potenciais resultantes são usados para calcular os defeitos. As energias de formação dos defeitos são obtidas e usadas para prever os tipos de desordem intrínseca.

A busca por um laser do estado sólido eficiente com boa emissão na região ultravioleta tem resultado no crescimento e desenvolvimento de cristais como o LiCAF e o LiSAF. O sucesso ou não do laser depende basicamente da dopagem do cristal com qualquer íon em especial neste caso os terras raras (RE^{3+}); seu campo; tamanho e carga do sítio designado para substituição; como também sutis detalhes levando em conta a interação da impureza com a rede cristalina do cristal. Cristais e sistemas moleculares e amorfos contendo íons RE^{3+} são atualmente aplicados em vários domínios, desde a conhecida tecnologia laser até contrastes usados em análises médicas do corpo humano, passando por dispositivos moleculares conversores de luz (LCMD) e supercondutores, o que atesta a importância da aplicação destes íons na vida social e do investimento de tempo e recursos para estudar sistemas contendo íons RE^{3+} .

ESTUDOS DE SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA FASE CRISTALINA DE MOLÉCULAS ORGÂNICAS BIOLÓGICAMENTE ATIVAS

Marcelo L. dos Santos, Ledjane S. Barreto, Luís E. Almeida
Departamento de Química, Universidade Federal de Sergipe

Moléculas orgânicas são geralmente volumosas e se agrupam irregularmente, resultando em sistemas cristalinos de baixa simetria. No complexo mundo das moléculas orgânicas e cristais orgânicos encontram-se as porfirinas, que são compostos coloridos devido ao sistema de elétrons altamente conjugados. As porfirinas são sensíveis ao meio em que se encontram, podendo alterar propriedades estruturais e eletrônicas. Elas compreendem uma classe importante de moléculas presentes em muitos sistemas biológicos. Como exemplo, podemos citar aquelas que constituem os sítios ativos de numerosas hemoproteínas; estão presentes também no citocromo e na clorofila. A modelagem da fase cristalina da porfirina base livre foi realizada no programa de simulação computacional GULP (General Utility Lattice Program) que utiliza técnicas de simulação estática e dinâmica molecular. Para modelar as forças atuantes entre as moléculas da porfirina foram utilizados pares potenciais de dois e três corpos. Foram construídas curvas para as interações átomo-átomo, que foram utilizadas no ajuste dos parâmetros potenciais. A análise das populações de Mulliken foi utilizada para descrever a distribuição de carga na porfirina. Os estudos de dinâmica molecular permitiram um melhor refinamento dos parâmetros potenciais. A partir dos potenciais otimizados foi obtida uma boa concordância entre os parâmetros cristalográficos calculados e experimentais da porfirina base livre.

AO3

Data: 01/Agosto
Horário: 16:30 - 18:00
Local: DFI, sala 02
Grupos de trabalho: Produção e Caracterização de Materiais, Física de Partículas e Campos, Física Matemática
Coordenador: Prof. Washington F. Chagas Filho

Produção e Caracterização de Materiais

MECANISMOS DE POLARIZAÇÃO E DESPOLARIZAÇÃO NO BaLiF₃ DOPADO COM METAIS DIVALENTES

Ana Gardênia S Mangueira, Mario E G Valerio, Jose F Lima, Sonia L Baldochi, Spero P Morato, N D Vieira Junior

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

O presente trabalho é mais um em uma série de trabalhos dedicados ao estudo das propriedades dos defeitos induzidos pela presença de metais divalentes no BaLiF₃ através de diferentes técnicas experimentais. No presente trabalho estamos estudando os mecanismos de polarização e despolarização induzidos pelo Ni²⁺ e Pb²⁺ no BaLiF₃ através das técnicas de Correntes de Polarização e Despolarização Estimuladas Termicamente (TSPC e TSDC, respectivamente). O BaLiF₃ é um cristal iônico de estrutura conhecida como perovskita invertida com os cátions Ba²⁺ e o Li⁺ e os íons F⁻ ocupando sítios de simetria Oh e D_{4h} respectivamente. O conhecimento da estrutura dos defeitos intrínsecos e os gerados por impurezas neste material é de grande importância no que se refere a aplicação em lasers e dispositivos ópticos. As amostras foram crescidas pela técnica de Czochralski em atmosfera dinâmica hidrofúorante. As medidas de TSPC e TSDC estão sendo realizadas segundo um ciclo térmico que se inicia com a TSPC, com tensões de polarização de até 1100V entre temperatura próxima ao N₂ líquido até 350K com um programa de aquecimento linear, seguida de um resfriamento rápido com o campo aplicado e uma posterior medida de TSDC até 450K segundo um mesmo programa de aquecimento da TSPC. Os resultados obtidos indicam que as relaxações podem ser devidas a mecanismos dipolares. (LPCM - UFS)

PRODUÇÃO DE CALCITA SINTÉTICA PURA E DOPADA POR DIFUSÃO EM GEL

Tatiana Santos de Araujo, Mário Ernesto Giroldo Valerio

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Cristais de calcita têm aplicações famosas em instrumentos ópticos e tecnologia de laser; e como as fontes de espécies naturais parece estar diminuindo, um interesse especial está ligado a todos os métodos de crescer o material artificialmente. Tanto os materiais naturais como sintéticos apresentam propriedades de caráter tecnológico, no entanto o estudo destas propriedades depende fortemente da quantidade e principalmente dos tipos de “imperfeições” presentes na estrutura do material. Entende-se por imperfeição, tudo que seja diferente do arranjo cristalino “normal” ou “perfeito” da estrutura do sólido em questão. O interesse no conhecimento cada vez maior das propriedades termoluminescentes da calcita é devido ao fato de que as medidas de termoluminescência (TL) permitem a datação de formações geológicas e de fósseis. A calcita é um material birrefringente, o que permite a sua utilização em dispositivos ópticos, e apresenta bandas de absorção na região do infravermelho, o que tem chamado a atenção dos pesquisadores para a possibilidade de se produzir lasers. Um grupo pertencente ao LPCM do Departamento de Física da UFS vem trabalhando a fim de explicar o mecanismo de TL da calcita, pois como sabemos o fenômeno vem sendo largamente utilizado em datação arqueológica e na dosimetria de radiação. Propõe-se investigar a possibilidade de produção de calcita de boa qualidade óptica e de dimensões apropriadas para aplicações tecnológicas. Vem sendo utilizado nesta pesquisa o método da difusão e crescimento em gel. Visto que esta técnica tem mostrado bons resultados na maioria dos casos. No presente estágio do trabalho obteve-

se cristais de calcita de até 850 μm de diâmetro médio, caracterizados via microscopia óptica.

Física de Partículas e Campos

O ENIGMA DA GRAVIDADE QUÂNTICA

Mário Everaldo de Souza

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

A teoria da relatividade geral de Einstein continua sendo um dos focos de atenção da física contemporânea. Durante os últimos 80 anos a teoria tem sido testada através de diversos experimentos no sistema solar e tem mostrado uma precisão enorme na descrição de vários fenômenos no nosso sistema solar. No entanto, a grande predição de Einstein, que são as ondas gravitacionais, ainda não foram detectadas na Terra, mesmo durante os momentos iniciais de supernovas próximas. E como consequência, o gráviton, o quantum gravitacional ainda não foi detectado. E assim, o campo gravitacional parece ser muito misterioso. No campo teórico da gravidade quântica tem havido um enorme esforço *matemático* na quantização do campo gravitacional, ou melhor, na quantização da teoria da relatividade geral, especialmente ligada à escala de Planck e à unificação das forças fundamentais. Fazendo uso da equação de Dirac, que pode seguramente ser usada no Universo presente, que é plano em larga escala, como as observações e medições têm demonstrado, este trabalho mostra que há, no caminho da quantização da gravidade, um enorme obstáculo teórico diretamente ligado a algumas propriedades *físicas* relativas à natureza intrínseca das partículas elementares que não tem sido levado em consideração e a não solução de tal obstáculo põe em cheque a própria idéia de quantização do campo gravitacional. Uma das consequências da não superação do obstáculo teórico é a explicação da não existência de ondas gravitacionais.

EXTENSÃO DA INVARIÂNCIA DE POINCARÉ EM TEORIAS DE PARTÍCULAS BOSÔNICAS RELATIVÍSTICAS

Gilberto Nascimento Santos Filho*, Washington Figueiredo Chagas Filho

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

A invariância conforme pode ter dois comportamentos bastante distintos dependendo de se a dimensão do espaço-tempo envolvido é igual ou maior que dois. Em um espaço-tempo plano com dimensão maior que dois a invariância conforme comporta-se como uma extensão da invariância de Poincaré de uma teoria de campo. Considerando transformações de escala e conforme das coordenadas no espaço-tempo como extensões da transformação de Poincaré, estudamos transformações de escala e conforme das coordenadas no espaço-tempo de partículas bosônicas relativísticas em uma formulação alternativa especial que é compatível com o limite de massa nula dessa teoria. Encontramos que a ação de uma partícula bosônica relativística com massa é invariante sob transformação de Poincaré, mas não é invariante sob transformações de escala e conforme das coordenadas no espaço-tempo. Além disso, mostramos que a ação de uma partícula bosônica relativística sem massa é invariante sob a transformação de Poincaré, transformação de escala e transformação conforme das coordenadas no espaço tempo. Mostramos também que as equações de movimento para uma partícula bosônica relativística sem massa permitem uma extensão de uma invariância de escala global da

ação da partícula bosônica relativística sem massa para uma invariância de escala local. Nosso ponto de vista é o de sistemas hamiltonianos vinculados.

(*) gfilhofisica@ig.com.br

HAMILTONIZAÇÃO DE UMA PARTICULA RELATIVISTICA COM SPIN 1/2 EM ESPAÇO TEMPO DE DIMENSÃO 2+1

Alyson Paulo Santos, Stoian Ivanov Zlatev
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

No tratamento teórico de processos com um único férmion (real ou virtual) os métodos de primeira quantização são frequentemente mais eficientes do que os métodos da teoria de campo, especificamente, na presença de um campo aplicado. Vários modelos pseudoclássicos de partículas com spin 1/2 após a quantização reproduzem o setor de uma única partícula da teoria de campo correspondente. Os modelos pseudoclássicos de partículas relativísticas são sistemas vinculados com um alto grau de complexidade. O modelo pseudoclássico, comumente usado, foi proposto por Berezin e Marinov. A busca de modelos pseudoclássicos alternativos foi motivada por certas características do modelo de Berezin-Marinov. Em particular, este último não reproduz em espaço tempo de dimensão ímpar após a quantização, uma teoria “mínima”. Um modelo alternativo, no qual nosso trabalho está centrado, foi proposto por Gitman. Construímos um conjunto de vínculos de segunda classe e efetuamos a hamiltonização do modelo.

Física Matemática

EXTENSÕES UNIVERSAIS E ÁLGEBRAS ASSOCIATIVAS

A B Yanovski*

Departamento de Matemática, Universidade Federal de Sergipe

Nós estamos considerando uma espécie de extensão de álgebras de Lie, introduzidas recentemente, que nós chamamos universais. Esta extensão aparece nas aplicações como resultado das tentativas para identificar as estruturas Hamiltonianas de alguns modelos de Hidrodinâmica como estruturas de Poisson-Lie sobre as co-álgebras de certos tipos de álgebras de Lie. Nós mostramos que as extensões universais na verdade não constituem um novo objeto, mas podem ser identificadas com produtos tensoriais de álgebras de Lie com álgebras associativas e comutativas. Aos dois principais tipos de extensões - semi-simples e solúveis, correspondem produtos tensoriais com álgebras que possuem unidade e álgebras sem unidade. A equivalência anunciada também implica uma equivalência entre as correspondentes co-homologias, responsáveis pelas extensões e explica as construções de funções centrais (funções de Casimir) recentemente publicadas. (*) E-mail: yanovski@ufs.br

AO4

Data: 01/Agosto

Horário: 16:30 - 18:00

Local: DFI, sala 06

Grupos de trabalho: Física Atômica e Molecular, Física Computacional

Física Atômica e Molecular

**FUNÇÕES DE ONDA E ENERGIAS DO ÁTOMO DE OURO OBTIDAS
ATRAVÉS DE UM ESQUEMA DIRAC-HARTREE-FOCK**

André Oliveira Silva, Osmar S. Silva Jr.

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Uma das técnicas disponíveis para uma melhor compreensão da estrutura interna dos átomos é a que envolve o espalhamento de diferentes partículas por alvos diversos, que nos fornece as seções de choque diferenciais, proporcionais à probabilidade de espalhamento das partículas para cada ângulo. Do ponto de vista teórico, é necessário descrever, antes de mais nada, o átomo contra o qual o elétron (ou outra partícula) irá se chocar, ou seja, determinar suas funções de onda e suas energias em diversos estados. Neste trabalho utilizamos e comparamos três métodos que nos fornecem tal descrição. Um dos métodos é o Hartree-Fock convencional, implementado pelo pacote computacional *ATSP* criado por C. Froese-Fischer e colaboradores, que resolve a equação de Schrödinger para o átomo. Este pacote permite também a inclusão de efeitos relativísticos através de perturbação em primeira ordem, isto é, o segundo método que usamos é do tipo Breit-Pauli. O terceiro método consiste num Dirac-Hartree-Fock, implementado pela rotina computacional *GRASP*² que resolve numericamente a equação de Dirac. Concentramo-nos em analisar o átomo de ouro, para o qual os erros em relação aos dados experimentais quando se utiliza um Hartree-Fock não-relativístico são muito grandes. Obtivemos e comparamos funções de onda atômicas e energias, para o estado fundamental e o primeiro excitado, pelos três métodos. As energias obtidas foram confrontadas com dados experimentais disponíveis, e desse modo pudemos avaliar qual dos três métodos apresenta menores erros.

**PARÂMETROS DE ORIENTAÇÃO E ALINHAMENTO PARA A EXCITAÇÃO
DE ESTADOS 2,3 ³P DO HÉLIO POR IMPACTO DE ELÉTRONS EM
ENERGIAS INTERMEDIÁRIAS**

Márcia C. L. Moreira, Osmar S. Silva Jr.

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

A análise da correlação angular e polarização do espalhamento elétron-fóton tem sido importante para o avanço do nosso conhecimento sobre os processos de excitação por impacto de elétron, não somente através de resultados experimentais, mas também através de trabalhos teóricos nessa área. As primeiras medidas de correlação angular do espalhamento elétron-fóton com excitação do estado singleto 2P do hélio foram realizadas a partir de 1973 por Eminyan *et al.*, e medidas de correlação do espalhamento elétron polarizado-fóton foram realizadas por Standage e Kleinpoppen em 1976. O estado final do átomo excitado pode ser caracterizado por parâmetros descrevendo as propriedades físicas da nuvem eletrônica excitada. Para excitações de estados ¹P e ³P, os parâmetros de coerência L_{\perp} e γ são suficientes para descrever o estado excitado completamente, a transferência do momento angular L_{\perp} descreve a dinâmica e o ângulo de alinhamento γ descreve a forma da nuvem eletrônica. Neste trabalho calculamos L_{\perp} e γ , parâmetros de alinhamento e orientação, quando o átomo de hélio é excitado a partir

do seu estado fundamental ao estado $2,3^3P$, com valores de energia do elétron incidente na faixa de energias intermediárias. Usando as aproximações FOMB e UFMB, fomos capazes de calcular os referidos parâmetros, e avaliar qual dessas aproximações apresenta melhor concordância com os dados experimentais.

PARÂMETROS POLARIZABILIDADE DE DIPOLO E RAIOS DE CORTE PARA O POTENCIAL ATÔMICO DO ÁTOMO DE MAGNÉSIO

Marcos Hernani S. Santos, Osmar S. Silva Jr.
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Nossa área de pesquisa é o espalhamento elétron-átomo. Para efetuar um tratamento teórico adequado deste tipo de colisão, é necessário fazer uma boa descrição de átomo alvo. É usual o emprego do método de Hartree-Fock fazendo uso da aproximação *frozen-core*. Calculamos, através desse método, as funções de ondas radiais e as energias para o estado fundamental e alguns estados excitados do átomo de magnésio. Entretanto, encontramos erros significativos entre as energias de excitação teóricas e experimentais. Para tentar diminuir tais erros, acrescentamos ao esquema Hartree-Fock o efeito de polarização do alvo via potencial semi-empírico, ajustando os parâmetros r_c (raio de corte) e α_d (polarizabilidade de dipolo). Pode-se obter, assim, novas funções de ondas, polarizadas, e novos valores de energias de excitação, com significativa redução do erro absoluto para as energias de excitação. Para determinar valores ótimos de r_c e α_d , mapeamos o erro absoluto, assim como o erro total, em função desses parâmetros. Com os valores desses parâmetros minimizando o erro absoluto, podemos efetuar o cálculo de *phase shifts* e ondas distorcidas, correspondentes à equação de Schrödinger para o elétron espalhado por um potencial atômico. Com isso, podemos tentar obter melhor descrição das funções radiais atômicas e seções de choque diferenciais de espalhamento de elétrons pelo átomo de magnésio que estejam em melhor acordo com os dados experimentais (PIBIC/CNPq-UFS).

ORBITAIS MOLECULARES PARA O CH₂ VIA GAMESS

Marcelo P. Guimarães, Osmar S. Silva Jr.
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Nossa área de pesquisa é o espalhamento de elétrons por moléculas. Para efetuar um tratamento teórico adequado deste tipo de colisão, é necessário fazer, antes, uma boa descrição do alvo, a nível de estrutura molecular. É usual o emprego do método de Hartree-Fock. Há vários *softwares* que implementam esse método para moléculas. Um deles, bastante usado por físicos moleculares e químicos teóricos é o GAMESS (*General Atomic and Molecular Electronic Structure System*), desenvolvido pelo grupo de M. Gordon, *Iowa University* (USA). Neste trabalho, instalamos o referido *software* no ambiente Linux, e efetuamos testes para conferir a confiabilidade da instalação. Usamos o sistema para obter orbitais moleculares para o metileno (CH₂), e correspondentes energias. Analisamos a convergência do método, partindo de várias configurações de *input*, para confirmar a otimização de geometria molecular. Comparamos os métodos UHF, RHF e ROHF na obtenção dos orbitais moleculares. Efetuamos otimização da distância intermolecular, partindo de várias configurações iniciais, para conferir a convergência do método Hartree-Fock implementado pelo GAMESS. Além do trabalho no sistema Unix, fizemos testes também no ambiente

Windows, com os executáveis pertinentes do GAMESS, confirmando nossos resultados anteriores. A instalação no ambiente Windows nos pareceu bem mais simples, e o pacote teve tempos de execução típicos equivalentes aos dos executáveis do Linux, pelo menos para as moléculas simples analisadas (H_3^+ , CH_2 , H_2).

Física Computacional

SIMETRIA EM IMAGENS

Christiane Lima Santos*, José Antônio Ferreira Leite*
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

As imagens presentes na natureza possuem características e propriedades primitivas, tais como bordas, linhas, curvas, rampas, sombras, etc. que são essenciais no estágio inicial da visão, seja esta biológica ou física. Porém, não existe uma definição exata dessas características nem uma forma perfeita de detecção, pois normalmente as imagens são altamente contaminadas com ruídos, de toda a espécie. O sistema visual dos mamíferos, e em particular dos humanos, é considerado um processador ótimo de imagem, sendo composto por diferentes canais, sintonizados para determinados valores de orientação, frequência, escala, simetria, etc.[CK66]. Vários estudos têm sido realizados para detectar estas particularidades, utilizando uma exata seleção da orientação, combinando diferentes operadores de simetria e o uso de diferentes escalas. Um exemplo é a aplicação de filtros de quadratura, que possuem *kernels* de simetria par e ímpar, relacionados pela transformada de Hilbert[FA91]. Esta função é formada por duas outras, complexas senoidais de Gabor. Suas simetrias detectam convenientemente diferentes particularidades, tais como linhas (função par) e bordas (função ímpar). Leite e Hancock [LH93,LH95a] apresentaram, em uma abordagem estatística, uma forma de combinação dos canais, baseada na distância de Mahalanobis, em um algoritmo de relaxação. Neste trabalho apresentamos dois tipos básicos de particularidades presentes em uma imagem, a borda e a linha, com as respectivas funções (filtros) usadas para suas detecções. Mostramos, para o caso da linha, que como o filtro utilizado deve possuir nível d.c. zero, ter simetria par e ser direcional, foi adotada a segunda derivada direcional da Gaussiana, pela simplicidade paramétrica [LH93,LH95a].

[CK66] – F. W. Campbell e J. J. Kulikowski. Orientational selectivity of the human visual system. *Journal of Physiology*, 187:437-445, 1966.

[FA91] – William T. Freeman e Edward H. Adelson. The design and use of steerable filters. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 13(9):891-906, 1991.

[LH93] – J. A. F. Leite e E. R. Hancock. Statistically combining and refining multi-channel information. *Progress in Image Analysis III-Editor: S. Impedovo*, 193-200, Set, 1993.

[LH95a] - J. A. F. Leite e E. R. Hancock. Statistical models for channel combination and selection. *IEEE Workshop on Nonlinear Signal and Image Processing*, 2:787-790, Jun, 1995.

(*) aguiachris@ig.com.br, jleite@fisica.UFS.br

PROGRAMA EGSAJPO QUE AJUSTA PONTOS EXPERIMENTAIS POR UM POLINÔMIO DE GRAU REAL

Everton Gomes de Santana

Analisando alguns programas que ajustam pontos experimentais por uma função polinomial, constatei que os expoentes da variável independente são inteiros positivos de valor máximo nove. Para levantar a limitação elaborei um programa em Qbasic, utilizando o método dos mínimos quadrados e resolvendo o sistema de equações pelo processo de eliminação de Gauss, que ajusta pontos por uma função polinomial cujos expoentes podem ser reais positivos ou negativos, podendo o polinômio ser incompleto, ou seja, quaisquer dos coeficientes podem ser colocados nulos, e o programa encontrará os outros coeficientes que melhor ajustam os pontos. A entrada pode ser por pontos ou pelos coeficientes do sistema de equações da matriz estendida, podendo-se escolher se é pelo teclado ou arquivo. Para entrada deve-se introduzir o número de pontos experimentais e o número de casas decimais desejados para visualização dos resultados e ainda deve-se introduzir o valor, do menor expoente, do maior expoente e do incremento do expoente. Se a entrada é por pontos deve-se optar se o polinômio é completo ou não, e se não, deve-se introduzir o número de coeficientes nulos e quais são eles, e se a entrada for pelos coeficientes do sistema introduz-se a ordem da matriz. Depois de executado o programa, se achar que o desvio padrão foi alto, pode-se introduzir novos valores para os expoentes e para o incremento do expoente, a fim de tentar melhor ajuste. Como resultado, o programa mostra os coeficientes do sistema de equações da matriz estendida que o programa resolveu, os coeficientes da função polinomial e os valores da variável independente, dos pontos experimentais e da função ajustada, podendo comparar o desvio padrão da função ajustada relativo à teórica se existir, havendo ainda opções, de gerar um arquivo e visualização do gráfico, com valores da variável independente, dos pontos experimentais e da função ajustada.

Dia 02/Agosto

Apresentações orais

Ensino de Física
Física Atômica e Molecular
Física Computacional
Física de Partículas e Campos
Física Estatística e Teoria da Matéria Condensada
Física Matemática
Produção e Caracterização de Materiais
Simulação Computacional de Materiais

Data: 1º agosto
Horário: 14:00 - 16:00
Local: Departamento de Física, sala 02
Grupos de trabalho:
Coordenador: Prof.

Física Atômica e Molecular

**PARÂMETROS DE ORIENTAÇÃO E ALINHAMENTO PARA A EXCITAÇÃO
DE ESTADOS $2,3^3P$ DO HÉLIO POR IMPACTO DE ELÉTRONS EM
ENERGIAS INTERMEDIÁRIAS**

Márcia C. L. Moreira, Osmar S. Silva Jr.
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

A análise da correlação angular e polarização do espalhamento elétron-fóton tem sido importante para o avanço do nosso conhecimento sobre os processos de excitação por impacto de elétron, não somente através de resultados experimentais, mas também através de trabalhos teóricos nessa área. As primeiras medidas de correlação angular do espalhamento elétron-fóton com excitação do estado singleto 2P do hélio foram realizadas a partir de 1973 por Eminyan *et al.*, e medidas de correlação do espalhamento elétron polarizado-fóton foram realizados por Standage e Kleinpoppen em 1976. O estado final do átomo excitado pode ser caracterizado por parâmetros descrevendo as propriedades físicas da nuvem eletrônica excitada. Para excitações de estados 1P e 3P , os parâmetros de coerência L_{\perp} e γ são suficientes para descrever o estado excitado completamente, a transferência do momento angular L_{\perp} descreve a dinâmica e o ângulo de alinhamento γ descreve a forma da nuvem eletrônica. Neste trabalho calculamos L_{\perp} e γ , parâmetros de alinhamento e orientação, quando o átomo de hélio é excitado a partir do seu estado fundamental ao estado $2,3^3P$, com valores de energia do elétron incidente na faixa de energias intermediárias. Usando as aproximações FOMB e UFMB, fomos capazes de calcular os referidos parâmetros, e avaliar qual dessas aproximações apresenta melhor concordância com os dados experimentais.

FUNÇÕES DE ONDA E ENERGIAS DO ÁTOMO DE OURO OBTIDAS ATRAVÉS DE UM ESQUEMA DIRAC-HARTREE-FOCK

André Oliveira Silva, Osmar S. Silva Jr.
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Uma das técnicas disponíveis para uma melhor compreensão da estrutura interna dos átomos é a que envolve o espalhamento de diferentes partículas por alvos diversos, que nos fornece as seções de choque diferenciais, proporcionais à probabilidade de espalhamento das partículas para cada ângulo. Do ponto de vista teórico, é necessário descrever, antes de mais nada, o átomo contra o qual o elétron (ou outra partícula) irá se chocar, ou seja, determinar suas funções de onda e suas energias em diversos estados. Neste trabalho utilizamos e comparamos três métodos que nos fornecem tal descrição. Um dos métodos é o Hartree-Fock convencional, implementado pelo pacote computacional *ATSP* criado por C. Froese-Fischer e colaboradores, que resolve a equação de Schrödinger para o átomo. Este pacote permite também a inclusão de efeitos relativísticos através de perturbação em primeira ordem, isto é, o segundo método que usamos é do tipo Breit-Pauli. O terceiro método consiste num Dirac-Hartree-Fock, implementado pela rotina computacional *GRASP²* que resolve numericamente a equação de Dirac. Concentramo-nos em analisar o átomo de ouro, para o qual os erros em relação aos dados experimentais quando se utiliza um Hartree-Fock não-relativístico são muito grandes. Obtivemos e comparamos funções de onda atômicas e energias, para o estado fundamental e o primeiro excitado, pelos três métodos. As energias obtidas foram confrontadas com dados experimentais disponíveis, e desse modo pudemos avaliar qual dos três métodos apresenta menores erros.

PARÂMETROS DE POLARIZABILIDADE DE DIPÓLO E RAIO DE CORTE PARA O POTENCIAL ATÔMICO DO ÁTOMO DE MAGNÉSIO

Marcos Hernani S. Santos, Osmar S. Silva Jr.
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Nossa área de pesquisa é o espalhamento elétron-átomo. Para efetuar um tratamento teórico adequado deste tipo de colisão, é necessário fazer uma boa descrição de átomo alvo. É usual o emprego do método de Hartree-Fock fazendo uso da aproximação *frozen-core*. Calculamos, através desse método, as funções de ondas radiais e as energias para o estado fundamental e alguns estados excitados do átomo de magnésio. Entretanto, encontramos erros significativos entre as energias de excitação teóricas e experimentais. Para tentar diminuir tais erros, acrescentamos ao esquema Hartree-Fock o efeito de polarização do alvo via potencial semi-empírico, ajustando os parâmetros r_c (raio de corte) e α_d (polarizabilidade de dipolo). Pode-se obter, assim, novas funções de ondas, polarizadas, e novos valores de energias de excitação, com significativa redução do erro absoluto para as energias de excitação. Para determinar valores ótimos de r_c e α_d , mapeamos o erro absoluto, assim como o erro total, em função desses parâmetros. Com os valores desses parâmetros minimizando o erro absoluto, podemos efetuar o cálculo de *phase shifts* e ondas distorcidas, correspondentes à equação de Schrödinger para o elétron espalhado por um potencial atômico. Com isso, podemos tentar obter melhor descrição das funções radiais atômicas e seções de choque diferenciais de espalhamento de elétrons pelo átomo de magnésio que estejam em melhor acordo com os dados experimentais (PIBIC/CNPq-UFS).

ORBITAIS MOLECULARES PARA O CH₂ VIA GAMESS

Marcelo P. Guimarães, Osmar S. Silva Jr.
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Nossa área de pesquisa é o espalhamento de elétrons por moléculas. Para efetuar um tratamento teórico adequado deste tipo de colisão, é necessário fazer, antes, uma boa descrição do alvo, a nível de estrutura molecular. É usual o emprego do método de Hartree-Fock. Há vários *softwares* que implementam esse método para moléculas. Um deles, bastante usado por físicos moleculares e químicos teóricos é o GAMESS (*General Atomic and Molecular Electronic Structure System*), desenvolvido pelo grupo de M. Gordon, *Iowa University* (USA). Neste trabalho, instalamos o referido *software* no ambiente Linux, e efetuamos testes para conferir a confiabilidade da instalação. Usamos o sistema para obter orbitais moleculares para o metileno (CH₂), e correspondentes energias. Analisamos a convergência do método, partindo de várias configurações de *input*, para confirmar a otimização de geometria molecular. Comparamos os métodos UHF, RHF e ROHF na obtenção dos orbitais moleculares. Efetuamos otimização da distância intermolecular, partindo de várias configurações iniciais, para conferir a convergência do método Hartree-Fock implementado pelo GAMESS. Além do trabalho no sistema Unix, fizemos testes também no ambiente Windows, com os executáveis pertinentes do GAMESS, confirmando nossos resultados anteriores. A instalação no ambiente Windows nos pareceu bem mais simples, e o pacote teve tempos de execução típicos equivalentes aos dos executáveis do Linux, pelo menos para as moléculas simples analisadas (H₃⁺, CH₂, H₂).

PROGRAMA EGSAJPO QUE AJUSTA PONTOS EXPERIMENTAIS POR UM POLINÔMIO DE GRAU REAL

Everton Gomes de Santana

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Analisando alguns programas que ajustam pontos experimentais por uma função polinomial, constatei que os expoentes da variável independente são inteiros positivos de valor máximo nove. Para levantar a limitação elaborei um programa em Qbasic, utilizando o método dos mínimos quadrados e resolvendo o sistema de equações pelo processo de eliminação de Gauss, que ajusta pontos por uma função polinomial cujos expoentes podem ser reais positivos ou negativos, podendo o polinômio ser incompleto, ou seja, quaisquer dos coeficientes podem ser colocados nulos, e o programa encontrará os outros coeficientes que melhor ajustam os pontos. A entrada pode ser por pontos ou pelos coeficientes do sistema de equações da matriz estendida, podendo-se escolher se é pelo teclado ou arquivo. Para entrada deve-se introduzir o número de pontos experimentais e o número de casas decimais desejados para visualização dos resultados e ainda deve-se introduzir o valor, do menor expoente, do maior expoente e do incremento do expoente. Se a entrada é por pontos deve-se optar se o polinômio é completo ou não, e se não, deve-se introduzir o número de coeficientes nulos e quais são eles, e se a entrada for pelos coeficientes do sistema introduz-se a ordem da matriz. Depois de executado o programa, se achar que o desvio padrão foi alto, pode-se introduzir novos valores para os expoentes e para o incremento do expoente, a fim de tentar melhor ajuste. Como resultado, o programa mostra os coeficientes do sistema de equações da matriz estendida que o programa resolveu, os coeficientes da função polinomial e os valores da variável independente, dos pontos experimentais e da função ajustada, podendo comparar o desvio padrão da função ajustada relativo à teórica se existir, havendo ainda opções, de gerar um arquivo e visualização do gráfico, com valores da variável independente, dos pontos experimentais e da função ajustada.

SIMETRIA EM IMAGENS

Christiane Lima Santos*, José Antônio Ferreira Leite*

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

As diversas imagens, presentes na natureza, possuem características e propriedades primitivas essenciais, tais como bordas, linhas curvas e sombras. O sistema visual humano é considerado um ótimo processador de imagem, pois é composto por diferentes canais, sintonizados para determinados valores de orientação, frequência, escala, etc. Porém, não existe uma definição exata dessas características nem uma forma perfeita de detecção, pois normalmente as imagens possuem outras particularidades que dificultam o seu perfeito reconhecimento, entre elas podemos citar o ruído, que é um fator de degradação da imagem. Vários estudos têm sido realizados para detectar estas particularidades, utilizando uma exata seleção da orientação, combinando diferentes operadores de simetria e o uso de diferentes escalas. Um exemplo é a aplicação de filtros de quadratura, que possuem kernels de simetria par e ímpar, relacionados pela Transformada de Hilbert. Esta função é formada por duas outras funções, complexas sinusoidais de Gabor. Suas simetrias detectam convenientemente diferentes particularidades, tais como, linhas (função par) e as bordas (função ímpar). Mas para pesquisas em visão computacional é melhor empregar a análise de multicanais. Neste tipo de análise, as características estão representadas pela saída de um banco de filtros

cujos canais têm uma tarefa específica na seleção de diferentes orientações, escalas e simetrias. Leite e Hancock apresentaram um tratamento estatístico que pode ser usado para executar o processo de combinação dos canais para filtragem, usando a relaxação probabilística. Como o filtro básico utilizado deve possuir nível d.c. zero, ter simetria par e ser direcional, foi adotada a segunda derivada da Gaussiana, pela simplicidade paramétrica. Assim, eles solucionaram alguns dos problemas mencionados anteriormente, com o auxílio de um algoritmo computacional. (*) aguiachris@ig.com.br, jleite@fisica.ufs.br

Física de Partículas e Campos

O ENIGMA DA GRAVIDADE QUÂNTICA

Prof. Mário Everaldo de Souza

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

A teoria da relatividade geral de Einstein continua sendo um dos focos de atenção da física contemporânea. Durante os últimos 80 anos a teoria tem sido testada através de diversos experimentos no sistema solar e tem mostrado uma precisão enorme na descrição de vários fenômenos no nosso sistema solar. No entanto, a grande predição de Einstein, que são as ondas gravitacionais, ainda não foram detectadas na Terra, mesmo durante os momentos iniciais de supernovas próximas. E como consequência, o gráviton, o quantum gravitacional ainda não foi detectado. E assim, o campo gravitacional parece ser muito misterioso. No campo teórico da gravidade quântica tem havido um enorme esforço *matemático* na quantização do campo gravitacional, ou melhor, na quantização da teoria da relatividade geral, especialmente ligada à escala de Planck e à unificação das forças fundamentais. Fazendo uso da equação de Dirac, que pode seguramente ser usada no Universo presente, que é plano em larga escala, como as observações e medições têm demonstrado, este trabalho mostra que há, no caminho da quantização da gravidade, um enorme obstáculo teórico diretamente ligado a algumas propriedades *físicas* relativas à natureza intrínseca das partículas elementares que não tem sido levado em consideração e a não solução de tal obstáculo põe em cheque a própria idéia de quantização do campo gravitacional. Uma das consequências da não superação do obstáculo teórico é a explicação da não existência de ondas gravitacionais.

EXTENSÃO DA INVARIÂNCIA DE POINCARÉ EM TEORIAS DE PARTÍCULAS BOSÔNICAS RELATIVÍSTICAS

Gilberto Nascimento Santos Filho*, Washington Figueiredo Chagas Filho

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

A invariância conforme pode ter dois comportamentos bastante distintos dependendo de se a dimensão do espaço-tempo envolvido é igual ou maior que dois. Em um espaço-tempo plano com dimensão maior que dois a invariância conforme comporta-se como uma extensão da invariância de Poincaré de uma teoria de campo. Considerando transformações de escala e conforme das coordenadas no espaço-tempo como extensões da transformação de Poincaré, estudamos transformações de escala e conforme das coordenadas no espaço-tempo de partículas bosônicas relativísticas em uma formulação alternativa especial que é compatível com o limite de massa nula dessa teoria. Encontramos que a ação de uma partícula bosônica relativística com massa é invariante

sob transformação de Poincaré, mas não é invariante sob transformações de escala e conforme das coordenadas no espaço-tempo. Além disso, mostramos que a ação de uma partícula bosônica relativística sem massa é invariante sob a transformação de Poincaré, transformação de escala e transformação conforme das coordenadas no espaço tempo. Mostramos também que as equações de movimento para uma partícula bosônica relativística sem massa permitem uma extensão de uma invariância de escala global da ação da partícula bosônica relativística sem massa para uma invariância de escala local. Nosso ponto de vista é o de sistemas hamiltonianos vinculados.

(*) gfilhofisica@ig.com.br

HAMILTONIZAÇÃO DE UMA PARTICULA RELATIVISTICA COM SPIN 1/2 EM ESPAÇO TEMPO DE DIMENSÃO 2+1

Alyson Paulo Santos, Stoian Ivanov Zlatev
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

No tratamento teórico de processos com um único férmion (real ou virtual) os métodos de primeira quantização são freqüentemente mais eficientes do que os métodos do teoria de campo, especificamente, na presença de um campo aplicado . Vários modelos pseudoclássicos de partículas com spin 1/2 após a quantização reproduzem o setor de uma única partícula da teoria de campo correspondente. Os modelos pseudoclássicos de partículas relativísticas são sistemas vinculados com um alto grau de complexidade. O modelo pseudoclássico, comumente usado, foi proposto por Berezin e Marinov . A busca de modelos pseudoclássicos alternativos foi motivada por certas características do modelo de Berezin-Marinov. Em particular, este último não reproduz em espaço tempo de dimensão ímpar após a quantização, uma teoria “mínima”. Um modelo alternativo, no qual nosso trabalho está centrado, foi proposto por Gitman . Construímos um conjunto de vínculos de segunda classe e efetuamos a hamiltonização do modelo.

Física Estatística e Teoria da Matéria Condensada

PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DO SmB₆

Cláudio A. Macedo e André M. C. Souza
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

O fenômeno de flutuação de valência ocorre em compostos de terras raras em que a proximidade do nível $4f$ da energia de Fermi leva a instabilidades na configuração de carga e nos momentos magnéticos. O semicondutor SmB₆ é um desses compostos. Nos últimos anos, incessantes esforços de pesquisa procuram desenvolver, ainda sem sucesso, uma teoria que explique todas as propriedades deste composto com um modelo físico unificado. O modelo de Falicov-Kimball considera os efeitos da interação elétron-buraco tendo em vista que no SmB₆ os íons Sm²⁺ ($4f^6$) são ionizados termicamente para produzir os íons Sm³⁺ ($4f^5$) e os elétrons de condução. Apresentamos neste trabalho um estudo computacional da dependência com a temperatura do calor específico e da susceptibilidade magnética do SmB₆, na região de temperaturas baixas, seguindo o modelo de Falicov-Kimball, mas tomando em conta os momentos magnéticos localizados devido aos spins $4f^5$. Empregamos o método de cálculo por diagonalização exata de pequenos *clusters* com a aplicação do ensemble grande canônico e de procedimentos de extrapolação para cadeias infinitas. Nossos resultados mostram uma

curva de calor específico em temperaturas baixas que é muito similar a da forma da curva experimental do SmB_6 , isto é, um máximo largo próximo a 40 K e um coeficiente de calor específico linear. Obtivemos a susceptibilidade magnética adicionando à curva da susceptibilidade calculada, utilizando o modelo de Falicov-Kimball, com as contribuições para susceptibilidade originadas dos spins $4f^5$. A concordância com os dados experimentais na região de temperaturas examinadas, isto é, entre 0 e 40 K, é muito boa. A comparação dos comportamentos do calor específico e da susceptibilidade, obtidos neste trabalho, com os dados experimentais, evidenciam que a dinâmica fermiônica representada pelo modelo de Falicov-Kimball expressa uma parte importante das propriedades termodinâmicas magnéticas do SmB_6 . (FAP-SE)

PONTOS DE INTERSEÇÃO EM CURVAS DE CALOR ESPECÍFICO NO MODELO DE HUBBARD

A.M.C. Souza e C. A. Macêdo

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

A literatura revela um grande número de materiais em que as curvas de calor específico versus temperatura, quando representadas para diferentes valores de uma segunda variável termodinâmica, cruzam-se em um ou até dois valores bem definidos de temperatura não nulos. Investigamos o fenômeno de pontos de interseção em curvas de calor específico, em função da temperatura, para o modelo de Hubbard unidimensional e assimétrico. O modelo de Hubbard assimétrico é estudado através do método da diagonalização exata em cadeias finitas e em seguida é utilizada a técnica de extrapolação para a cadeia infinita. Foi definida uma região onde ocorrem os pontos de interseção em função da interação local dos elétrons (U) e a da magnitude relativa (R) das integrais de transferência dos elétrons de spin up e down. Observamos que na região onde há pontos de interseção as curvas do calor específico apresentam apenas um pico, enquanto que quando não há interseção as curvas apresentam dois picos, indicando uma associação entre a ocorrência dos pontos de interseção e a localização gradual dos férmions. (FAP-SE)

ANÁLISE DO MÉTODO DE MONTE-CARLO APLICADO AO MODELO DE HUBBARD

Samuel R. Oliveira Neto, André M. C. Souza

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

O método de Monte-Carlo quântico é feito a partir de uma formulação discreta da integral funcional da função de partição. Usando a transformação de Hubbard-Stratonovich discreta, a interação fermion-fermion é eliminada com a introdução de campos locais auxiliares. Estes campos admitem valores binários, tipo spins de Ising ($s = \pm 1$). Desta forma, a função de partição passa a ser escrita como um traço sobre funções dos novos campos, e o traço sobre os spins de Ising é feito usando o método de Monte-Carlo clássico com o uso do algoritmo de banho térmico. No caso do preenchimento da banda eletrônica for diferente do meio-cheio, termos da função de partição podem assumir valores negativos. A saída usual deste problema é considerar o módulo do valor negativo no cálculo das médias termodinâmicas. Isto traz conseqüências que até o presente não estão bem estabelecidas. Neste trabalho, estudamos a energia média e a susceptibilidade magnética do modelo de Hubbard para

uma cadeia de seis sítios aplicando o método de Monte-Carlo quântico e comparamos sua solução com a obtida pelo método da diagonalização direta, que é exata neste limite. Observamos que os resultados do método de Monte-Carlo pioram em relação ao cálculo exato quanto mais nos afastamos da banda meio-cheia, nas regiões de baixas temperaturas e altos valores da interação local entre elétrons.

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DO MODELO DE HUBBARD COM DUAS BANDAS

Rodrigo de Farias Gomes, Cláudio A. Macêdo
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

A determinação das propriedades termodinâmicas dos metais de transição do grupo do ferro, que são sistemas magnéticos itinerantes com fortes correlações eletrônicas se estendendo por cinco bandas de energia, têm se constituído ao longo do últimos setenta anos em um dos problemas mais desafiadores para a física estatística. O modelo de Hubbard foi criado para investigar as propriedades magnéticas de sistemas de elétrons correlacionados em bandas estreitas do tipo que ocorre nos metais de transição. Os estudos do modelo de Hubbard para uma única banda de energia têm sido objeto de milhares de trabalhos científicos nos últimos anos, porém a investigação para duas ou mais bandas de energia não tem recebido da comunidade de física estatística a atenção que a relevância e a complexidade do problema exige. Neste trabalho, consideramos o modelo de Hubbard para sistemas com uma e duas bandas. Desenvolvemos um programa computacional para calcular, no ensemble canônico, a dependência com a temperatura da energia média, entropia, calor específico e susceptibilidade magnética. O programa, escrito em FORTRAN, gera a matriz do operador hamiltoniano e, utilizando a técnica de diagonalização direta, determina os autovetores e autovalores desse operador. A seguir, são calculadas as diversas propriedades termodinâmicas em função da temperatura. Por razões computacionais, a simulação atualmente é limitada a sistemas com no máximo 8 sítios porém, os dados obtidos podem ser extrapolados para sistemas maiores contribuindo, assim, para o entendimento de sistemas reais. Nossos resultados mostram-se consistentes com os disponíveis na literatura, o que explicita a potencialidade do programa computacional desenvolvido para estudo de sistemas magnéticos itinerantes finitos.

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DO MODELO DE HATSUGAI-KOHMOTO

Francisco A. G. Almeida e Cláudio A. Macedo
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

O modelo de Hatsugai-Kohmoto representa um sistema magnético de elétrons itinerantes que inclui classes infinitas de interação. O modelo mostra efeitos muito importantes de sistemas de muitos corpos em geral. Neste trabalho implementamos um programa de simulação para o modelo de Hatsugai-Kohmoto unidimensional, utilizando o método de Monte Carlo quântico. O procedimento usado é o de Metropolis. Considera-se que as partículas estejam se movendo de um estado para outro; se a variação de energia ΔE for menor ou igual a zero o novo estado é aceito, mas se ΔE for maior que zero calcula-se então a probabilidade de transição com o valor de ΔE . A seguir é gerado um número aleatório uniformemente distribuído entre 0 e 1. De posse desse número aleatório, nós comparamos com a probabilidade de transição; se o número

for menor ou igual, então o novo estado é aceito, se não, continua com seu valor antigo. Este procedimento é repetido até que um número conveniente de configuração seja obtida. Determinamos a energia média, calor específico e a magnetização em função da temperatura, para diversos valores de interação e de campo magnético. Os resultados da simulação obtidos para campo magnético nulo, estão consistentes com os resultados obtidos por outros métodos já conhecidos na literatura. Os cálculos da magnetização e todos os demais resultados obtidos com a aplicação de campo magnético são inéditos. (FAP-SE)

PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DO MODELO DE STONER

Clélio B. C. Gomes e Cláudio A. Macêdo

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

O modelo de Stoner foi criado para explicar o mecanismo microscópico que determinam as propriedades termodinâmicas magnéticas de sistemas com uma banda estreita de energia eletrônica do tipo da existente nos metais de transição do grupo do ferro. O modelo considera o metal como um sistema de N elétrons em uma banda de energia parcialmente preenchida. Neste trabalho, desenvolvemos um estudo detalhado da técnica de campo médio aplicado ao modelo de Stoner considerando diversas formas de bandas eletrônicas. Obtivemos as relações matemáticas gerais da magnetização espontânea e da susceptibilidade magnética em função da temperatura para diferentes parâmetros do campo molecular e diferentes formas de bandas de energia eletrônica. Particularmente, analisamos cuidadosamente a temperatura de Curie, que é a temperatura em que o sistema sofre uma transição de fase, passando de uma fase ferromagnética para uma fase paramagnética. Determinamos graficamente a relação da temperatura de Curie em função do parâmetro que determina a forma da banda eletrônica. Identificamos o efeito nas propriedades termodinâmicas dos sistemas como decorrência do uso de formas diferentes das densidades de estados eletrônicos. Constatamos que a temperatura de Curie cresce sistematicamente com o crescimento da energia de interação e verificamos, também, que a temperatura de Curie cresce quando o valor do parâmetro que determina a forma da banda eletrônica cresce entre zero e um determinado valor crítico, permanecendo constante a partir desse valor crítico. (FAP-SE)

Física Matemática

EXTENSÕES UNIVERSAIS E ÁLGBRAS ASSOCIATIVAS

A B Yanovski*

Departamento de Matemática, Universidade Federal de Sergipe

Nós estamos considerando uma espécie de extensão de álgebras de Lie, introduzidas recentemente, que nós chamamos universais. Estas extensão aparece nas aplicações como resultado das tentativas para identificar as estruturas Hamiltonianas de alguns modelos de Hidrodinâmica como estruturas de Poisson-Lie sobre as co-álgebras de certos tipos de álgebras de Lie. Nós mostramos que as extensões universais na verdade não constituem um novo objeto, mas podem ser identificadas com produtos tensoriais de álgebras de Lie com álgebras associativas e comutativas. Aos dois principais tipos de extensões - semisimples e solúveis, correspondem produtos tensoriais com álgebras que

possuem unidade e álgebras sem unidade. A equivalência anunciada também implica uma equivalência entre as correspondentes co-homologias, responsáveis pelas extensões e explica as construções de funções centrais (funções de Casimir) recentemente publicadas. (*) E-mail: yanovski@ufs.br

Produção e Caracterização de Materiais

IMPORTÂNCIA DOS FENÔMENOS LUMINESCENTES PARA O ESTUDO DA PRÉ-HISTÓRIA SERGIPANA

José Osman dos Santos, José Fernandes de Lima, Mário Ernesto Giroldo Valerio
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

A luminescência é um fenômeno caracterizado pela emissão de luz a partir de um material, geralmente, isolante ou semicondutor, quando o mesmo absorve, previamente, energia de uma fonte de radiação externa. O comprimento de onda da luz emitida é característico da substância luminescente e não da radiação incidente. Usualmente, os estudos do fenômeno luminescente estão relacionados com a emissão de luz na região do visível, porém outros comprimentos de onda podem estar presentes no espectro de emissão da substância. Estes fenômenos luminescentes têm sido empregados em diversas áreas do conhecimento humano, desde de áreas como biologia, ciências de materiais, química, dentre outras áreas, Porém, na Física estes fenômenos luminescentes têm sido utilizados intensamente, tanto na questão da caracterização de materiais, como no que se refere à suas aplicação tecnológicas, como por exemplo na datação de vestígios arqueológica e geológica de vários materiais. A datação por luminescência é uma alternativa ao radiocarbono quando nenhum material orgânico (osso, semente, madeira, etc.) está disponível, ou se a idade prevista exceder os limites de datação do radiocarbono (aproximadamente 50.000 anos). A datação por luminescência pode ser aplicada para estabelecer a idade de locais arqueológicos ou geológicos, datando cerâmicas, rochas (sujeitas a aquecimento), determinados solos ou sedimentos. O princípio da datação luminescentes está fundamentado no fato de que a intensidade de emissão luminescente a partir de um dado vestígios cresce com a dose de radiação recebida pelo material. Neste trabalho será apresentado os últimos resultados das datações termoluminescentes efetuadas nos sítios arqueológicos de Xingó, situados ao noroeste do estado de Sergipe. Estes resultados têm mostrados que os métodos empregados para datação de vestígios cerâmicos, no LPCM/DFI/UFS, apresentam uma grande potencialidade para determinar a cronologia dos sítios da região, assim contribuindo para a determinação da dinâmica de ocupação da região no passado.

EMISSION SPECTRA OF THERMOLUMINESCENCE OF QUARTZ AT LOW TEMPERATURES

A J J Santos, J F de Lima and M E G Valerio
Laboratório de Preparação e Caracterização de Materiais,
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe,
49.100-000, S. Cristóvão, SE, BRAZIL

We investigated the spectrum of TL at low and high temperature of Brazilian natural quartz samples. The samples were submitted to different thermal treatments and exposed to beta radiation ($^{90}\text{Sr}/^{90}\text{Y}$) at room temperature followed by a illumination with UV light, from a Hg lamp, at -260°C . The TL readout were performed from -260°C up

to room temperature (rate: 20°C/min), and from room temperature up to 450°C (rate: 6°C/s). The spectra were measured from 280 to 600 nm in steps of 10 nm. The spectra of treated samples revealed that the emission band of the peaks at low temperature is very similar to the emission bands of the peaks at high temperature, suggesting that the mechanism and the emission centers that generates the TL peaks at high temperatures are similar to the one ones that generates the peaks at low temperatures.

CARACTERIZAÇÃO POR TERMOLUMINESCÊNCIA DA CÊRAMICA DE GERMANATO DE BISMUTO ($\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$)

Ronaldo S. Silva*, Zélia S. Macedo*, Antonio C. Hernandez**,
Mário Ernesto G. Valério*

*Universidade Federal de Sergipe, Departamento de Física, C. P.: 353; 49100-000 São Cristóvão, SE

**Universidade de São Paulo, Instituto de Física de São Carlos, Grupo Crescimento de Cristais e Materiais Cerâmicos. C. P.: 369; 13560-970 São Carlos, SP

Germanato de Bismuto ($\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$ ou BGO) é um material cintilador com importantes aplicações comerciais e industriais, dentre elas podemos citar: Blocos Detectores em Tomografia por Emissão de Positrons e em Física de alta energia. Normalmente são produzidos pela técnica de Czochralski. Neste trabalho investigamos o potencial das cerâmicas de BGO como um detector de radiação. As vantagens de se usar cerâmica no lugar do monocristal são: a simplificada rota de produção e a facilidade de se produzir cerâmicas com diversas formas e tamanhos. Foram estudadas 4 tipos de amostras: monocristal, pó calcinado, cerâmica sinterizada no forno e cerâmica sinterizada a laser. A sinterização a laser de materiais cerâmicos é uma nova técnica implantada recentemente no GCCMC – IFSC – USP que tem se mostrado bastante eficiente na produção de BGO, produzindo cerâmicas com alta densidade relativa e boa transparência. O pó de BGO foi obtido por reação de estado sólido e caracterizado por difração de raio-x e termoluminescência (TL). Para as medidas de TL, as amostras foram irradiadas com raios β do $^{90}\text{Sr}/\text{Y}$ com uma dose de 1600GY a uma taxa de 0,45Gy/min, ou com radiação UV da lâmpada de Hg. A curva de TL de todas as amostras estudadas, irradiadas com radiação β ou UV, apresentaram o mesmo conjunto de picos centrados em torno de 75, 102 e 147°C. Os valores de ordem cinética e energia de cada pico também foram medidos.

ESTUDO DE XRD E SXS DE FILMES FINOS $\text{Li}_x\text{Mn}_2\text{O}_4$

Cristiano T. de Meneses, Marcelo A. Macêdo, Flávio C. Vincentin

Laboratório de Preparação e Caracterização de Materiais,
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

José Marcos Sasaki

Departamento de Física, Universidade Federal de Ceará

Os filmes finos de LiMn_2O_4 tem ganhado atenção de diversos pesquisadores nas últimas décadas por ser o material mais promissor para produção de cátodo de baterias recarregáveis de íons de lítio. Mas para formar a estrutura desejada, não é tão fácil devido o Mn ter vários números de oxidação. O estudo em experimentos de XRD (difratometria de raios-x) e SXS (espalhamento de raios-x moles) é extrema importância para detectar as propriedades eletrônicas de filmes finos $\text{Li}_x\text{Mn}_2\text{O}_4$. Neste trabalho

preparou-se filmes finos de $\text{Li}_x\text{Mn}_2\text{O}_4$ pela dissolução de cloreto de manganês em água de coco processada, variando a dopagem do Li com valores de x entre 0 e 2,0. Os filmes foram preparados pelo método de dip-coating em substrato de platina e lâmina de microscópio e mergulhado no sol a uma velocidade 10cm/min, sendo em seguida tratados termicamente a 100 °C por 15 minutos para a retirada da água e densificado a 500 °C por 15 minutos. Após repetir o mesmo processo por 5 vezes, foi realizada uma densificação final por 120 minutos em diferentes temperaturas acima de 500 °C. As Medidas de SXS foram realizadas no LNLS em campinas através das técnicas de fotoabsorção de elétrons e as medidas de XRD foram realizadas no Laboratório de Espalhamento de Luz do Departamento de Física da UFC. Foram estudadas as bordas K_1 e $L_{2,3}$ do oxigênio e manganês, respectivamente, assim como as estruturas eletrônicas do óxido de manganês litiado de cada amostra através de XRD. Resultados preliminares de SXS nas amostras de $x=0$ mostram que nas bordas $L_{2,3}$ do Mn e K_1 do oxigênio existe uma transição de intensidade entre 500 °C e 800 °C, mostrando a formação provavelmente de uma estrutura com fase metaestável. Na temperatura de 500 °C a fase encontrado foi a do Mn_3O_4 , à 620 °C formou-se a fase do metaestável Mn_5O_8 e a 800 °C observou-se novamente a mesma estrutura da temperatura de 500 °C. Já a análise de difratometria de raios-X revela a formação do óxido de manganês litiado juntamente com a fase Mn_3O_4 a partir de $x=0,9$ e é prevalecida quando $x=2,0$. (CAPES-UFS,CNPq)

MECANISMOS DE POLARIZAÇÃO E DESPOLARIZAÇÃO NO BaLiF_3 DOPADO COM METAIS DIVALENTES

Ana Gardênia S Manguiera, Mario E G Valerio, Jose F Lima, Sonia L Baldochi, Spero P Morato, N D Vieira Junior

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

O presente trabalho é mais um em uma série de trabalhos dedicados ao estudo das propriedades dos defeitos induzidos pela presença de metais divalentes no BaLiF_3 através de diferentes técnicas experimentais. No presente trabalho estamos estudando os mecanismos de polarização e despolarização induzidos pelo Ni^{2+} e Pb^{2+} no BaLiF_3 através das técnicas de Correntes de Polarização e Despolarização Estimuladas Termicamente (TSPC e TSDC, respectivamente). O BaLiF_3 é um cristal iônico de estrutura conhecida como perovskita invertida com os cátions Ba^{2+} e o Li^+ e os íons F- ocupando sítios de simetria Oh e D_{4h} respectivamente. O conhecimento da estrutura dos defeitos intrínsecos e os gerados por impurezas neste material é de grande importância no que se refere a aplicação em lasers e dispositivos ópticos. As amostras foram crescidas pela técnica de Czochralski em atmosfera dinâmica hidrofúorinante. As medidas de TSPC e TSDC estão sendo realizadas segundo um ciclo térmico que se inicia com a TSPC, com tensões de polarização de até 1100V entre temperatura próxima ao N_2 líquido até 350K com um programa de aquecimento linear, seguida de um resfriamento rápido com o campo aplicado e uma posterior medida de TSDC até 450K segundo um mesmo programa de aquecimento da TSPC. Os resultados obtidos indicam que as relaxações podem ser devidas a mecanismos dipolares.(LPCM - UFS)

PRODUÇÃO DE FILMES FINOS DOPADOS COM TERRAS RARAS PARA APLICAÇÃO EM DOSÍMETROS TERMOLUMINESCENTES DE RADIAÇÃO

Paulo J. R. Montes, Mário G. Valerio, Marcelo A. Macêdo

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Este trabalho está sendo desenvolvido no LPCM (Laboratório de Preparação e Caracterização de Materiais - UFS) e tem como objetivo associar nossa capacidade para produção de filmes finos com o estudo dos materiais termoluminescentes. Os filmes finos foram produzidos a partir da deposição de filmes óxidos em substratos de vidro e de aço inox através de um processo sol-gel utilizando a técnica “dip coating”. Foram produzidos filmes finos com 1 e 5 camadas a partir das soluções de $Y(NO_3)_3 \cdot 6H_2O$ (nitrato de ítrio) e $Y(NO_3)_3 \cdot 6H_2O$ dopada com neodímio através do Nd_2O_3 (óxido de neodímio) com ácido nítrico. Para todos os filmes, as soluções de partida foram produzidas utilizando-se água de coco como solvente. A sensibilidade à radiação gama (γ), alfa (α) e beta (β) dos substratos (vidro e aço inox) e dos filmes finos, produzidos com uma camada nestes substratos, foi investigada através da termoluminescência (TL). Foram feitas medidas de radioluminescência das amostras submetidas à radiação beta (β). Foi observado que tanto os substratos quanto os filmes, com uma camada, de Y_2O_3 são sensíveis aos três tipos de radiação, sendo que para o sistema filme+substrato a intensidade das curvas de TL é maior, indicando que o filme parece possuir um sinal de TL próprio, que somado com a contribuição do substrato resulta em um sinal de TL mais intenso, comparando com o sinal apenas do substrato.

USO DA TÉCNICA DE TERMOLUMINESCÊNCIA PARA O CONTROLE DE QUALIDADE DE PASTAS CIMENTADAS ESPECIAIS

B. F. Santos Jr¹(*), M. E. G. Valério¹, E. F. S. Vieira², A. R. Cestari², C. R. Miranda³,
A. C. F. Conceição³

¹ Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

² Departamento de Química, Universidade Federal de Sergipe

³ Petrobrás

Neste trabalho empregou-se a técnica de termoluminescência (TL) na caracterização de pastas especiais para operações de cimentação em poços de petróleo. Seguindo as normas da American Petroleum Institute (API), moldes cúbicos das pastas de cimento contendo diferentes aditivos foram curados durante trinta dias. As medidas de termoluminescência, que consistem na captação de luz estimulada termicamente de um determinado material, foram realizadas desde a temperatura ambiente até 360°C, seguindo um programa de aquecimento linear. A posição e intensidades dos picos TL indicam os tipos e quantidades de defeitos opticamente ativos presentes nos minerais e são utilizados para monitorar os processos físico-químicos que acompanham as reações que ocorrem nas diversas etapas da preparação das pastas. Na pasta básica, contendo cimento, água e sílica, observaram-se picos de TL a 275 e 315°C. Nas pastas contendo agentes sililantes ramificados como aditivos, observou-se que esses sinais desapareceram. Essa supressão está associada a um aumento na resistência térmica e mecânica das pastas aditivadas, como comprovado anteriormente por ensaios de termogravimetria e de resistência à compressão. Dessa forma, a técnica de TL pode ser utilizada como uma nova ferramenta para caracterizar pastas cimentadas, que apresentem estabilidades termo-mecânicas maiores que as pastas convencionais (não-aditivadas).

Palavras Chave: termoluminescência, pastas de cimento, minerais

(*) bfsantos@fisica.ufs.com.br

O FILME FINO DE Cr_2O_3 NA PRESENÇA DO GÁS CO_2

Ramires M. Silva, Marcelo A. Macêdo

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Este trabalho trata de uma pesquisa que busca minimizar os principais problemas de corrosão de origem química e mecânica, que se apresentam nos poços de produção de petróleo da bacia SEAL, a fim de reduzir seus custos operacionais que chega a ser em torno de U\$ 723.000,00 anuais. Um dos meios para minimizar o efeito corrosivo do CO_2 é revestir as peças metálicas afetadas pela corrosão com camadas de óxido. Resultados preliminares indicam que o Cr_2O_3 pode ser um bom candidato para este fim, pois este apresentou uma boa aderência ao aço. Para obtenção de tal filme foi-se utilizado uma solução de $\text{Cr}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$ (nitrato de cromo) em água de coco; depositada sobre o substrato de aço (usado pela PETROBRÁS); secado à 100 °C e depois densificado à 500, 600, 700 e 800 °C por 1 min e 15 min. O comportamento anticorrosivo foi analisado via as técnicas de raios-X, microscopia de força atômica e potenciodinâmica. Os resultados revelaram uma alta cristalinidade com formação de domínios revestindo toda a superfície do aço. A taxa de corrosão relativa teve uma redução do fator de 5 após o aço ser revestido pelos filmes em um eletrólito de 3% NaCl sob um fluxo de 0,25 litro/min do gás CO_2 .

PREPARAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE FILMES FINOS SOL-GEL DE ÓXIDO DE ESTRÔNCIO A PARTIR DA ÁGUA DE COCO

Edjane Rocha dos Santos, Marcelo Andrade Macêdo.

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Os problemas de corrosão nos poços bombeados da bacia SEAL devido a ação do gás CO_2 são de grande preocupação da PETROBRAS, pois estes tem ocasionado uma perda de milhares de dólares por ano. Este trabalho tem o objetivo de mostrar os primeiros resultados de uma das rotas possíveis de se minimizar o referido problema: revestir o aço com óxido de estrôncio. Os filmes foram preparados através da mistura da água de coco com o $\text{Sr}(\text{NO}_3)_2$ (nitrato de estrôncio) na concentração de 0,5 mol/litro. Eles foram depositados via técnica “dip-coating” do tipo batelada dividida em cinco estágios: imersão, retirada, deposição, drenagem e evaporação. A velocidade de decomposição foi de 10cm/min e o substrato usado foi o aço. Inicialmente foi realizado um tratamento a 100 °C por 30 min e depois um tratamento térmico final a 500, 600 e 700° C por 10 min. Os resultados demonstraram que os filmes tiveram uma boa aderência e com uma superfície lisa livre de rachaduras. Estes filmes serão caracterizados via difração de raio-X para determinação das fases cristalinas e do tamanho dos grãos e medidas da taxa de corrosão em soluções de NaCl de concentrações de 0,1, 0,5, 1, 2 e 3% na presença do gás CO_2 .

PRODUÇÃO DE CALCITA SINTÉTICA PURA E DOPADA POR DIFUSÃO EM GEL

Tatiana Santos de Araujo, Mário Ernesto Giroldo Valerio

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Cristais de calcita têm aplicações famosas em instrumentos ópticos e tecnologia de laser; e como as fontes de espécies naturais parece estar diminuindo, um interesse

especial é preso a todos os métodos de cultivar o material artificialmente. Tanto os materiais naturais como sintéticos apresentam propriedades de caráter tecnológico, no entanto o estudo destas propriedades depende fortemente da quantidade e principalmente dos tipos de “imperfeições” presentes na estrutura do material. Entende-se por imperfeição, tudo que seja diferente do arranjo cristalino “normal” ou “perfeito” da estrutura do sólido em questão. O interesse no conhecimento cada vez maior das propriedades termoluminescentes da calcita é devido ao fato de que as medidas de termoluminescência (TL) permitem a datação de formações geológicas e de fosséis. A calcita é um material birrefringente, o que permite a sua utilização em dispositivos ópticos, e apresenta bandas de absorção na região do infravermelho, o que tem chamado a atenção dos pesquisadores para a possibilidade de se produzir lasers. Um grupo pertencente ao LPCM do Departamento de Física da UFS vem trabalhando a fim de explicar o mecanismo de TL da calcita, pois como sabemos o fenômeno vem sendo largamente utilizado em datação arqueológica e na dosimetria de radiação. Propõe-se investigar a possibilidade de produção de calcita de boa qualidade óptica e de dimensões apropriadas para aplicações tecnológicas. Vem sendo utilizado nesta pesquisa o método da difusão e crescimento em gel. Visto que esta técnica tem mostrado bons resultados na maioria dos casos. No presente estágio do trabalho obteve-se cristais de calcita de até 850 µm de diâmetro médio, caracterizados via microscopia óptica.

Simulação Computacional de Materiais

ESTUDOS DE SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA FASE CRISTALINA DE MOLÉCULAS ORGÂNICAS BIOLÓGICAMENTE ATIVAS

Marcelo L. dos Santos, Ledjane S. Barreto, Luís E. Almeida
Departamento de Química, Universidade Federal de Sergipe

Moléculas orgânicas são geralmente volumosas e se agrupam irregularmente, resultando em sistemas cristalinos de baixa simetria. No complexo mundo das moléculas orgânicas e cristais orgânicos encontram-se as porfirinas, que são compostos coloridos devido ao sistema de elétrons altamente conjugados. As porfirinas são sensíveis ao meio em que se encontram, podendo alterar propriedades estruturais e eletrônicas. Elas compreendem uma classe importante de moléculas presentes em muitos sistemas biológicos. Como exemplo, podemos citar aquelas que constituem os sítios ativos de numerosas hemoproteínas; estão presentes também no citocromo e na clorofila. A modelagem da fase cristalina da porfirina base livre foi realizada no programa de simulação computacional GULP (General Utility Lattice Program) que utiliza técnicas de simulação estática e dinâmica molecular. Para modelar as forças atuantes entre as moléculas da porfirina foram utilizados pares potenciais de dois e três corpos. Foram construídas curvas para as interações átomo-átomo, que foram utilizadas no ajuste dos parâmetros potenciais. A análise das populações de Mulliken foi utilizada para descrever a distribuição de carga na porfirina. Os estudos de dinâmica molecular permitiram um melhor refinamento dos parâmetros potenciais. A partir dos potenciais otimizados foi obtida uma boa concordância entre os parâmetros cristalográficos calculados e experimentais da porfirina base livre.

MODELAGEM COMPUTACIONAL DOS SISTEMAS LiMAlF_6 (M = CA OU SR) DOPADOS COM ÍONS TERRAS RARAS

Mário E. G. Valerio, Jomar B. Amaral
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

As técnicas de modelagem computacional estão agora presentes nas Ciências do estado sólido e molecular. Uma grande variedade de ferramentas está disponível, variando desde modelagem de potenciais interatômicos que permitem uma rápida e eficiente modelagem das estruturas incluindo um grande número de átomos, até modelagem da estrutura eletrônica, magnética e suas propriedades. Vários pacotes computacionais foram desenvolvidos por diferentes pesquisadores para aplicações em simulações estruturais e envolvendo defeitos pontuais, o GULP (General Utility Lattice Program) desenvolvido por J. Gale, tem demonstrado ser o programa mais flexível e mais confiável e que tem sido usado por um maior número de pesquisadores. Utilizando o GULP as estruturas do LiCaAlF_6 (LiCAF), LiSrAlF_6 (LiSAF) e alguns fluoretos são analisadas e modeladas. Potenciais interatômicos são ajustados para dados experimentais e estes potenciais resultantes são usados para calcular os defeitos. As energias de formação dos defeitos são obtidas e usadas para prever os tipos de desordem intrínseca. A busca por um laser do estado sólido eficiente com boa emissão na região ultravioleta tem resultado no crescimento e desenvolvimento de cristais como o LiCAF e o LiSAF. O sucesso ou não do laser depende basicamente da dopagem do cristal com qualquer íon em especial neste caso os terras raras (RE^{3+}); seu campo; tamanho e carga do sítio designado para substituição; como também sutis detalhes levando em conta a interação da impureza com a rede cristalina do cristal. Cristais e sistemas moleculares e amorfos contendo íons RE^{3+} são atualmente aplicados em vários domínios, desde a conhecida tecnologia laser até contrastes usados em análises médicas do corpo humano, passando por dispositivos moleculares conversores de luz (LCMD) e supercondutores, o que atesta a importância da aplicação destes íons na vida social e do investimento de tempo e recursos para estudar sistemas contendo íons RE^{3+} .

Dia 02/Agosto

Apresentações orais

Ensino de Física
Física Atômica e Molecular
Física Computacional
Física de Partículas e Campos
Física Estatística e Teoria da Matéria Condensada
Física Matemática
Produção e Caracterização de Materiais
Simulação Computacional de Materiais

Data: 1º/agosto
Horário: 14:00 - 16:00
Local: Departamento de Física, sala 02
Grupos de trabalho:
Coordenador: Prof.

Física Atômica e Molecular

PARÂMETROS DE ORIENTAÇÃO E ALINHAMENTO PARA A EXCITAÇÃO DE ESTADOS 2,3 ³P DO HÉLIO POR IMPACTO DE ELÉTRONS EM ENERGIAS INTERMEDIÁRIAS

Márcia C. L. Moreira, Osmar S. Silva Jr.

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

A análise da correlação angular e polarização do espalhamento elétron-fóton tem sido importante para o avanço do nosso conhecimento sobre os processos de excitação por impacto de elétron, não somente através de resultados experimentais, mas também através de trabalhos teóricos nessa área. As primeiras medidas de correlação angular do espalhamento elétron-fóton com excitação do estado singleto 2P do hélio foram realizadas a partir de 1973 por Eminyan *et al.*, e medidas de correlação do espalhamento elétron polarizado-fóton foram realizados por Standage e Kleinpoppen em 1976. O estado final do átomo excitado pode ser caracterizado por parâmetros descrevendo as propriedades físicas da nuvem eletrônica excitada. Para excitações de estados ¹P e ³P, os parâmetros de coerência L_{\perp} e γ são suficientes para descrever o estado excitado completamente, a transferência do momento angular L_{\perp} descreve a dinâmica e o ângulo de alinhamento γ descreve a forma da nuvem eletrônica. Neste trabalho calculamos L_{\perp} e γ , parâmetros de alinhamento e orientação, quando o átomo de hélio é excitado a partir do seu estado fundamental ao estado 2,3³P, com valores de energia do elétron incidente na faixa de energias intermediárias. Usando as aproximações FOMB e UFMB, fomos capazes de calcular os referidos parâmetros, e avaliar qual dessas aproximações apresenta melhor concordância com os dados experimentais.

FUNÇÕES DE ONDA E ENERGIAS DO ÁTOMO DE OURO OBTIDAS ATRAVÉS DE UM ESQUEMA DIRAC-HARTREE-FOCK

André Oliveira Silva, Osmar S. Silva Jr.

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Uma das técnicas disponíveis para uma melhor compreensão da estrutura interna dos átomos é a que envolve o espalhamento de diferentes partículas por alvos diversos, que nos fornece as seções de choque diferenciais, proporcionais à probabilidade de espalhamento das partículas para cada ângulo. Do ponto de vista teórico, é necessário descrever, antes de mais nada, o átomo contra o qual o elétron (ou outra partícula) irá se chocar, ou seja, determinar suas funções de onda e suas energias em diversos estados. Neste trabalho utilizamos e comparamos três métodos que nos fornecem tal descrição. Um dos métodos é o Hartree-Fock convencional, implementado pelo pacote computacional *ATSP* criado por C. Froese-Fischer e colaboradores, que resolve a equação de Schrödinger para o átomo. Este pacote permite também a inclusão de efeitos relativísticos através de perturbação em primeira ordem, isto é, o segundo método que usamos é do tipo Breit-Pauli. O terceiro método consiste num Dirac-Hartree-Fock, implementado pela rotina computacional *GRASP²* que resolve numericamente a equação de Dirac. Concentramo-nos em analisar o átomo de ouro, para o qual os erros em relação aos dados experimentais quando se utiliza um Hartree-Fock não-relativístico são muito grandes. Obtivemos e comparamos funções de onda atômicas e energias, para o estado fundamental e o primeiro excitado, pelos três métodos. As energias obtidas foram confrontadas com dados experimentais disponíveis, e desse modo pudemos avaliar qual dos três métodos apresenta menores erros.

PARÂMETROS POLARIZABILIDADE DE DIPOLO E RAIOS DE CORTE PARA O POTENCIAL ATÔMICO DO ÁTOMO DE MAGNÉSIO

Marcos Hernani S. Santos, Osmar S. Silva Jr.

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Nossa área de pesquisa é o espalhamento elétron-átomo. Para efetuar um tratamento teórico adequado deste tipo de colisão, é necessário fazer uma boa descrição de átomo alvo. É usual o emprego do método de Hartree-Fock fazendo uso da aproximação *frozen-core*. Calculamos, através desse método, as funções de ondas radiais e as energias para o estado fundamental e alguns estados excitados do átomo de magnésio. Entretanto, encontramos erros significativos entre as energias de excitação teóricas e experimentais. Para tentar diminuir tais erros, acrescentamos ao esquema Hartree-Fock o efeito de polarização do alvo via potencial semi-empírico, ajustando os parâmetros r_c (raio de corte) e α_d (polarizabilidade de dipolo). Pode-se obter, assim, novas funções de ondas, polarizadas, e novos valores de energias de excitação, com significativa redução do erro absoluto para as energias de excitação. Para determinar valores ótimos de r_c e α_d , mapeamos o erro absoluto, assim como o erro total, em função desses parâmetros. Com os valores desses parâmetros minimizando o erro absoluto, podemos efetuar o cálculo de *phase shifts* e ondas distorcidas, correspondentes à equação de Schrödinger para o elétron espalhado por um potencial atômico. Com isso, podemos tentar obter melhor descrição das funções radiais atômicas e seções de choque diferenciais de espalhamento de elétrons pelo átomo de magnésio que estejam em melhor acordo com os dados experimentais (PIBIC/CNPq-UFS).

ORBITAIS MOLECULARES PARA O CH₂ VIA GAMESS

Marcelo P. Guimarães, Osmar S. Silva Jr.

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Nossa área de pesquisa é o espalhamento de elétrons por moléculas. Para efetuar um tratamento teórico adequado deste tipo de colisão, é necessário fazer, antes, uma boa descrição do alvo, a nível de estrutura molecular. É usual o emprego do método de Hartree-Fock. Há vários *softwares* que implementam esse método para moléculas. Um deles, bastante usado por físicos moleculares e químicos teóricos é o GAMESS (*General Atomic and Molecular Electronic Structure System*), desenvolvido pelo grupo de M. Gordon, *Iowa University* (USA). Neste trabalho, instalamos o referido *software* no ambiente Linux, e efetuamos testes para conferir a confiabilidade da instalação. Usamos o sistema para obter orbitais moleculares para o metileno (CH₂), e correspondentes energias. Analisamos a convergência do método, partindo de várias configurações de *input*, para confirmar a otimização de geometria molecular. Comparamos os métodos UHF, RHF e ROHF na obtenção dos orbitais moleculares. Efetuamos otimização da distância intermolecular, partindo de várias configurações iniciais, para conferir a convergência do método Hartree-Fock implementado pelo GAMESS. Além do trabalho no sistema Unix, fizemos testes também no ambiente Windows, com os executáveis pertinentes do GAMESS, confirmando nossos resultados anteriores. A instalação no ambiente Windows nos pareceu bem mais simples, e o pacote teve tempos de execução típicos equivalentes aos dos executáveis do Linux, pelo menos para as moléculas simples analisadas (H₃⁺, CH₂, H₂).

Física Computacional

PROGRAMA EGSAJPO QUE AJUSTA PONTOS EXPERIMENTAIS POR UM POLINÔMIO DE GRAU REAL

Everton Gomes de Santana

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Analisando alguns programas que ajustam pontos experimentais por uma função polinomial, constatei que os expoentes da variável independente são inteiros positivos de valor máximo nove. Para levantar a limitação elaborei um programa em Qbasic, utilizando o método dos mínimos quadrados e resolvendo o sistema de equações pelo processo de eliminação de Gauss, que ajusta pontos por uma função polinomial cujos expoentes podem ser reais positivos ou negativos, podendo o polinômio ser incompleto, ou seja, quaisquer dos coeficientes podem ser colocados nulos, e o programa encontrará os outros coeficientes que melhor ajustam os pontos. A entrada pode ser por pontos ou pelos coeficientes do sistema de equações da matriz estendida, podendo-se escolher se é pelo teclado ou arquivo. Para entrada deve-se introduzir o número de pontos experimentais e o número de casas decimais desejados para visualização dos resultados e ainda deve-se introduzir o valor, do menor expoente, do maior expoente e do incremento do expoente. Se a entrada é por pontos deve-se optar se o polinômio é completo ou não, e se não, deve-se introduzir o número de coeficientes nulos e quais são eles, e se a entrada for pelos coeficientes do sistema introduz-se a ordem da matriz. Depois de executado o programa, se achar que o desvio padrão foi alto, pode-se introduzir novos valores para os expoentes e para o incremento do expoente, a fim de tentar melhor ajuste. Como resultado, o programa mostra os coeficientes do sistema de equações da matriz estendida que o programa resolveu, os coeficientes da função polinomial e os valores da variável independente, dos pontos experimentais e da função ajustada, podendo comparar o desvio padrão da função ajustada relativo à teórica se existir, havendo ainda opções, de gerar um arquivo e visualização do gráfico, com valores da variável independente, dos pontos experimentais e da função ajustada.

SIMETRIA EM IMAGENS

Christiane Lima Santos*, José Antônio Ferreira Leite*

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

As diversas imagens, presentes na natureza, possuem características e propriedades primitivas essenciais, tais como bordas, linhas curvas e sombras. O sistema visual humano é considerado um ótimo processador de imagem, pois é composto por diferentes canais, sintonizados para determinados valores de orientação, frequência, escala, etc. Porém, não existe uma definição exata dessas características nem uma forma perfeita de detecção, pois normalmente as imagens possuem outras particularidades que dificultam o seu perfeito reconhecimento, entre elas podemos citar o ruído, que é um fator de degradação da imagem. Vários estudos têm sido realizados para detectar estas particularidades, utilizando uma exata seleção da orientação, combinando diferentes operadores de simetria e o uso de diferentes escalas. Um exemplo é a aplicação de filtros de quadratura, que possuem kernels de simetria par e ímpar, relacionados pela Transformada de Hilbert. Esta função é formada por duas outras funções, complexas sinusoidais de Gabor. Suas simetrias detectam convenientemente diferentes

particularidades, tais como, linhas (função par) e as bordas (função ímpar). Mas para pesquisas em visão computacional é melhor empregar a análise de multicanais. Neste tipo de análise, as características estão representadas pela saída de um banco de filtros cujos canais têm uma tarefa específica na seleção de diferentes orientações, escalas e simetrias. Leite e Hancock apresentaram um tratamento estatístico que pode ser usado para executar o processo de combinação dos canais para filtragem, usando a relaxação probabilística. Como o filtro básico utilizado deve possuir nível d.c. zero, ter simetria par e ser direcional, foi adotada a segunda derivada da Gaussiana, pela simplicidade paramétrica. Assim, eles solucionaram alguns dos problemas mencionados anteriormente, com o auxílio de um algoritmo computacional. (*) aguiachris@ig.com.br, jleite@fisica.ufs.br

Física de Partículas e Campos

O ENIGMA DA GRAVIDADE QUÂNTICA

Prof. Mário Everaldo de Souza

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

A teoria da relatividade geral de Einstein continua sendo um dos focos de atenção da física contemporânea. Durante os últimos 80 anos a teoria tem sido testada através de diversos experimentos no sistema solar e tem mostrado uma precisão enorme na descrição de vários fenômenos no nosso sistema solar. No entanto, a grande predição de Einstein, que são as ondas gravitacionais, ainda não foram detectadas na Terra, mesmo durante os momentos iniciais de supernovas próximas. E como consequência, o gráviton, o quantum gravitacional ainda não foi detectado. E assim, o campo gravitacional parece ser muito misterioso. No campo teórico da gravidade quântica tem havido um enorme esforço *matemático* na quantização do campo gravitacional, ou melhor, na quantização da teoria da relatividade geral, especialmente ligada à escala de Planck e à unificação das forças fundamentais. Fazendo uso da equação de Dirac, que pode seguramente ser usada no Universo presente, que é plano em larga escala, como as observações e medições têm demonstrado, este trabalho mostra que há, no caminho da quantização da gravidade, um enorme obstáculo teórico diretamente ligado a algumas propriedades *físicas* relativas à natureza intrínseca das partículas elementares que não tem sido levado em consideração e a não solução de tal obstáculo põe em cheque a própria idéia de quantização do campo gravitacional. Uma das consequências da não superação do obstáculo teórico é a explicação da não existência de ondas gravitacionais.

EXTENSÃO DA INVARIÂNCIA DE POINCARÉ EM TEORIAS DE PARTÍCULAS BOSÔNICAS RELATIVÍSTICAS

Gilberto Nascimento Santos Filho*, Washington Figueiredo Chagas Filho

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

A invariância conforme pode ter dois comportamentos bastante distintos dependendo de se a dimensão do espaço-tempo envolvido é igual ou maior que dois. Em um espaço-tempo plano com dimensão maior que dois a invariância conforme comporta-se como uma extensão da invariância de Poincaré de uma teoria de campo. Considerando transformações de escala e conforme das coordenadas no espaço-tempo como extensões da transformação de Poincaré, estudamos transformações de escala e conforme das

coordenadas no espaço-tempo de partículas bosônicas relativísticas em uma formulação alternativa especial que é compatível com o limite de massa nula dessa teoria. Encontramos que a ação de uma partícula bosônica relativística com massa é invariante sob transformação de Poincaré, mas não é invariante sob transformações de escala e conforme das coordenadas no espaço-tempo. Além disso, mostramos que a ação de uma partícula bosônica relativística sem massa é invariante sob a transformação de Poincaré, transformação de escala e transformação conforme das coordenadas no espaço tempo. Mostramos também que as equações de movimento para uma partícula bosônica relativística sem massa permitem uma extensão de uma invariância de escala global da ação da partícula bosônica relativística sem massa para uma invariância de escala local. Nosso ponto de vista é o de sistemas hamiltonianos vinculados.
(*) gfilhofisica@ig.com.br

HAMILTONIZAÇÃO DE UMA PARTICULA RELATIVISTICA COM SPIN 1/2 EM ESPAÇO TEMPO DE DIMENSÃO 2+1

Alyson Paulo Santos, Stoian Ivanov Zlatev
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

No tratamento teórico de processos com um único férmion (real ou virtual) os métodos de primeira quantização são freqüentemente mais eficientes do que os métodos da teoria de campo, especificamente, na presença de um campo aplicado. Vários modelos pseudoclássicos de partículas com spin 1/2 após a quantização reproduzem o setor de uma única partícula da teoria de campo correspondente. Os modelos pseudoclássicos de partículas relativísticas são sistemas vinculados com um alto grau de complexidade. O modelo pseudoclássico, comumente usado, foi proposto por Berezin e Marinov. A busca de modelos pseudoclássicos alternativos foi motivada por certas características do modelo de Berezin-Marinov. Em particular, este último não reproduz em espaço tempo de dimensão ímpar após a quantização, uma teoria “mínima”. Um modelo alternativo, no qual nosso trabalho está centrado, foi proposto por Gitman. Construímos um conjunto de vínculos de segunda classe e efetuamos a hamiltonização do modelo.

Física Estatística e Teoria da Matéria Condensada

PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DO SmB₆

Cláudio A. Macedo e André M. C. Souza
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

O fenômeno de flutuação de valência ocorre em compostos de terras raras em que a proximidade do nível $4f$ da energia de Fermi leva a instabilidades na configuração de carga e nos momentos magnéticos. O semicondutor SmB₆ é um desses compostos. Nos últimos anos, incessantes esforços de pesquisa procuram desenvolver, ainda sem sucesso, uma teoria que explique todas as propriedades deste composto com um modelo físico unificado. O modelo de Falicov-Kimball considera os efeitos da interação elétron-buraco tendo em vista que no SmB₆ os íons Sm²⁺ ($4f^6$) são ionizados termicamente para produzir os íons Sm³⁺ ($4f^5$) e os elétrons de condução. Apresentamos neste trabalho um estudo computacional da dependência com a temperatura do calor específico e da susceptibilidade magnética do SmB₆, na região de temperaturas baixas, seguindo o modelo de Falicov-Kimball, mas tomando em conta os momentos magnéticos

localizados devido aos spins $4f^5$. Empregamos o método de cálculo por diagonalização exata de pequenos *clusters* com a aplicação do ensemble grande canônico e de procedimentos de extrapolação para cadeias infinitas. Nossos resultados mostram uma curva de calor específico em temperaturas baixas que é muito similar a da forma da curva experimental do SmB_6 , isto é, um máximo largo próximo a 40 K e um coeficiente de calor específico linear. Obtivemos a susceptibilidade magnética adicionando à curva da susceptibilidade calculada, utilizando o modelo de Falicov-Kimball, com as contribuições para susceptibilidade originadas dos spins $4f^5$. A concordância com os dados experimentais na região de temperaturas examinadas, isto é, entre 0 e 40 K, é muito boa. A comparação dos comportamentos do calor específico e da susceptibilidade, obtidos neste trabalho, com os dados experimentais, evidenciam que a dinâmica fermiônica representada pelo modelo de Falicov-Kimball expressa uma parte importante das propriedades termodinâmicas magnéticas do SmB_6 . (FAP-SE)

PONTOS DE INTERSEÇÃO EM CURVAS DE CALOR ESPECÍFICO NO MODELO DE HUBBARD

A.M.C. Souza e C. A. Macêdo

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

A literatura revela um grande número de materiais em que as curvas de calor específico versus temperatura, quando representadas para diferentes valores de uma segunda variável termodinâmica, cruzam-se em um ou até dois valores bem definidos de temperatura não nulos. Investigamos o fenômeno de pontos de interseção em curvas de calor específico, em função da temperatura, para o modelo de Hubbard unidimensional e assimétrico. O modelo de Hubbard assimétrico é estudado através do método da diagonalização exata em cadeias finitas e em seguida é utilizada a técnica de extrapolação para a cadeia infinita. Foi definida uma região onde ocorrem os pontos de interseção em função da interação local dos elétrons (U) e a da magnitude relativa (R) das integrais de transferência dos elétrons de spin up e down. Observamos que na região onde há pontos de interseção as curvas do calor específico apresentam apenas um pico, enquanto que quando não há interseção as curvas apresentam dois picos, indicando uma associação entre a ocorrência dos pontos de interseção e a localização gradual dos férmions. (FAP-SE)

ANÁLISE DO MÉTODO DE MONTE-CARLO APLICADO AO MODELO DE HUBBARD

Samuel R. Oliveira Neto, André M. C. Souza

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

O método de Monte-Carlo quântico é feito a partir de uma formulação discreta da integral funcional da função de partição. Usando a transformação de Hubbard-Stratonovich discreta, a interação fermion-fermion é eliminada com a introdução de campos locais auxiliares. Estes campos admitem valores binários, tipo spins de Ising ($s = \pm 1$). Desta forma, a função de partição passa a ser escrita como um traço sobre funções dos novos campos, e o traço sobre os spins de Ising é feito usando o método de Monte-Carlo clássico com o uso do algoritmo de banho térmico. No caso do preenchimento da banda eletrônica for diferente do meio-cheio, termos da função de partição podem assumir valores negativos. A saída usual deste problema é considerar o

módulo do valor negativo no cálculo das médias termodinâmicas. Isto traz conseqüências que até o presente não estão bem estabelecidas. Neste trabalho, estudamos a energia média e a susceptibilidade magnética do modelo de Hubbard para uma cadeia de seis sítios aplicando o método de Monte-Carlo quântico e comparamos sua solução com a obtida pelo método da diagonalização direta, que é exata neste limite. Observamos que os resultados do método de Monte-Carlo pioram em relação ao cálculo exato quanto mais nos afastamos da banda meio-cheia, nas regiões de baixas temperaturas e altos valores da interação local entre elétrons.

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DO MODELO DE HUBBARD COM DUAS BANDAS

Rodrigo de Farias Gomes, Cláudio A. Macêdo
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

A determinação das propriedades termodinâmicas dos metais de transição do grupo do ferro, que são sistemas magnéticos itinerantes com fortes correlações eletrônicas se estendendo por cinco bandas de energia, têm se constituído ao longo do últimos setenta anos em um dos problemas mais desafiadores para a física estatística. O modelo de Hubbard foi criado para investigar as propriedades magnéticas de sistemas de elétrons correlacionados em bandas estreitas do tipo que ocorre nos metais de transição. Os estudos do modelo de Hubbard para uma única banda de energia têm sido objeto de milhares de trabalhos científicos nos últimos anos, porém a investigação para duas ou mais bandas de energia não tem recebido da comunidade de física estatística a atenção que a relevância e a complexidade do problema exige. Neste trabalho, consideramos o modelo de Hubbard para sistemas com uma e duas bandas. Desenvolvemos um programa computacional para calcular, no ensemble canônico, a dependência com a temperatura da energia média, entropia, calor específico e susceptibilidade magnética. O programa, escrito em FORTRAN, gera a matriz do operador hamiltoniano e, utilizando a técnica de diagonalização direta, determina os autovetores e autovalores desse operador. A seguir, são calculadas as diversas propriedades termodinâmicas em função da temperatura. Por razões computacionais, a simulação atualmente é limitada a sistemas com no máximo 8 sítios porém, os dados obtidos podem ser extrapolados para sistemas maiores contribuindo, assim, para o entendimento de sistemas reais. Nossos resultados mostram-se consistentes com os disponíveis na literatura, o que explicita a potencialidade do programa computacional desenvolvido para estudo de sistemas magnéticos itinerantes finitos.

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DO MODELO DE HATSUGAI-KOHMOTO

Francisco A. G. Almeida e Cláudio A. Macedo
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

O modelo de Hatsugai-Kohmoto representa um sistema magnético de elétrons itinerantes que inclui classes infinitas de interação. O modelo mostra efeitos muito importantes de sistemas de muitos corpos em geral. Neste trabalho implementamos um programa de simulação para o modelo de Hatsugai-Kohmoto unidimensional, utilizando o método de Monte Carlo quântico. O procedimento usado é o de Metropolis. Considera-se que as partículas estejam se movendo de um estado para outro; se a variação de energia ΔE for menor ou igual a zero o novo estado é aceito, mas se ΔE for

maior que zero calcula-se então a probabilidade de transição com o valor de ΔE . A seguir é gerado um número aleatório uniformemente distribuído entre 0 e 1. De posse desse número aleatório, nós comparamos com a probabilidade de transição; se o número for menor ou igual, então o novo estado é aceito, se não, continua com seu valor antigo. Este procedimento é repetido até que um número conveniente de configuração seja obtida. Determinamos a energia média, calor específico e a magnetização em função da temperatura, para diversos valores de interação e de campo magnético. Os resultados da simulação obtidos para campo magnético nulo, estão consistentes com os resultados obtidos por outros métodos já conhecidos na literatura. Os cálculos da magnetização e todos os demais resultados obtidos com a aplicação de campo magnético são inéditos. (FAP-SE)

PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DO MODELO DE STONER

Clélio B. C. Gomes e Cláudio A. Macêdo

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

O modelo de Stoner foi criado para explicar o mecanismo microscópico que determinam as propriedades termodinâmicas magnéticas de sistemas com uma banda estreita de energia eletrônica do tipo da existente nos metais de transição do grupo do ferro. O modelo considera o metal como um sistema de N elétrons em uma banda de energia parcialmente preenchida. Neste trabalho, desenvolvemos um estudo detalhado da técnica de campo médio aplicado ao modelo de Stoner considerando diversas formas de bandas eletrônicas. Obtivemos as relações matemáticas gerais da magnetização espontânea e da susceptibilidade magnética em função da temperatura para diferentes parâmetros do campo molecular e diferentes formas de bandas de energia eletrônica. Particularmente, analisamos cuidadosamente a temperatura de Curie, que é a temperatura em que o sistema sofre uma transição de fase, passando de uma fase ferromagnética para uma fase paramagnética. Determinamos graficamente a relação da temperatura de Curie em função do parâmetro que determina a forma da banda eletrônica. Identificamos o efeito nas propriedades termodinâmicas dos sistemas como decorrência do uso de formas diferentes das densidades de estados eletrônicos. Constatamos que a temperatura de Curie cresce sistematicamente com o crescimento da energia de interação e verificamos, também, que a temperatura de Curie cresce quando o valor do parâmetro que determina a forma da banda eletrônica cresce entre zero e um determinado valor crítico, permanecendo constante a partir desse valor crítico. (FAP-SE)

Física Matemática

EXTENSÕES UNIVERSAIS E ÁLGEBRAS ASSOCIATIVAS

A B Yanovski*

Departamento de Matemática, Universidade Federal de Sergipe

Nós estamos considerando uma espécie de extensão de álgebras de Lie, introduzidas recentemente, que nós chamamos universais. Estas extensão aparece nas aplicações como resultado das tentativas para identificar as estruturas Hamiltonianas de alguns modelos de Hidrodinâmica como estruturas de Poisson-Lie sobre as co-álgebras de certos tipos de álgebras de Lie. Nós mostramos que as extensões universais na verdade

não constituem um novo objeto, mas podem ser identificadas com produtos tensoriais de álgebras de Lie com álgebras associativas e comutativas. Aos dois principais tipos de extensões - semisimples e solúveis, correspondem produtos tensoriais com álgebras que possuem unidade e álgebras sem unidade. A equivalência anunciada também implica uma equivalência entre as correspondentes co-homologias, responsáveis pelas extensões e explica as construções de funções centrais (funções de Casimir) recentemente publicadas. (*) E-mail: yanovski@ufs.br

Produção e Caracterização de Materiais

IMPORTÂNCIA DOS FENÔMENOS LUMINESCENTES PARA O ESTUDO DA PRÉ-HISTÓRIA SERGIPANA

José Osman dos Santos, José Fernandes de Lima, Mário Ernesto Giroldo Valerio
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

A luminescência é um fenômeno caracterizado pela emissão de luz a partir de um material, geralmente, isolante ou semicondutor, quando o mesmo absorve, previamente, energia de uma fonte de radiação externa. O comprimento de onda da luz emitida é característico da substância luminescente e não da radiação incidente. Usualmente, os estudos do fenômeno luminescente estão relacionados com a emissão de luz na região do visível, porém outros comprimentos de onda podem estar presentes no espectro de emissão da substância. Estes fenômenos luminescentes têm sido empregados em diversas áreas do conhecimento humano, desde de áreas como biologia, ciências de materiais, química, dentre outras áreas. Porém, na Física estes fenômenos luminescentes têm sido utilizados intensamente, tanto na questão da caracterização de materiais, como no que se refere à suas aplicação tecnológicas, como por exemplo na datação de vestígios arqueológica e geológica de vários materiais. A datação por luminescência é uma alternativa ao radiocarbono quando nenhum material orgânico (osso, semente, madeira, etc.) está disponível, ou se a idade prevista exceder os limites de datação do radiocarbono (aproximadamente 50.000 anos). A datação por luminescência pode ser aplicada para estabelecer a idade de locais arqueológicos ou geológicos, datando cerâmicas, rochas (sujeitas a aquecimento), determinados solos ou sedimentos. O princípio da datação luminescentes está fundamentado no fato de que a intensidade de emissão luminescente a partir de um dado vestígios cresce com a dose de radiação recebida pelo material. Neste trabalho será apresentado os últimos resultados das datações termoluminescentes efetuadas nos sítios arqueológicos de Xingó, situados ao noroeste do estado de Sergipe. Estes resultados têm mostrados que os métodos empregados para datação de vestígios cerâmicos, no LPCM/DFI/UFS, apresentam uma grande potencialidade para determinar a cronologia dos sítios da região, assim contribuindo para a determinação da dinâmica de ocupação da região no passado.

EMISSION SPECTRA OF THERMOLUMINESCENCE OF QUARTZ AT LOW TEMPERATURES

A J J Santos, J F de Lima and M E G Valerio
Laboratório de Preparação e Caracterização de Materiais,
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe,
49.100-000, S. Cristóvão, SE, BRAZIL

We investigated the spectrum of TL at low and high temperature of Brazilian natural quartz samples. The samples were submitted to different thermal treatments and exposed to beta radiation ($^{90}\text{Sr}/^{90}\text{Y}$) at room temperature followed by a illumination with UV light, from a Hg lamp, at -260°C . The TL readout were performed from -260°C up to room temperature (rate: $20^\circ\text{C}/\text{min}$), and from room temperature up to 450°C (rate: $6^\circ\text{C}/\text{s}$). The spectra were measured from 280 to 600 nm in steps of 10 nm. The spectra of treated samples revealed that the emission band of the peaks at low temperature is very similar to the emission bands of the peaks at high temperature, suggesting that the mechanism and the emission centers that generates the TL peaks at high temperatures are similar to the one ones that generates the peaks at low temperatures.

CARACTERIZAÇÃO POR TERMOLUMINESCÊNCIA DA CÊRAMICA DE GERMANATO DE BISMUTO ($\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$)

Ronaldo S. Silva*, Zélia S. Macedo*, Antonio C. Hernandez**,
Mário Ernesto G. Valério*

*Universidade Federal de Sergipe, Departamento de Física, C. P.: 353; 49100-000 São Cristovão, SE

**Universidade de São Paulo, Instituto de Física de São Carlos, Grupo Crescimento de Cristais e Materiais Cerâmicos. C. P.: 369; 13560-970 São Carlos, SP

Germanato de Bismuto ($\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$ ou BGO) é um material cintilador com importantes aplicações comerciais e industriais, dentre elas podemos citar: Blocos Detectores em Tomografia por Emissão de Positrons e em Física de alta energia. Normalmente são produzidos pela técnica de Czochralski. Neste trabalho investigamos o potencial das cerâmicas de BGO como um detector de radiação. As vantagens de se usar cerâmica no lugar do monocristal são: a simplificada rota de produção e a facilidade de se produzir cerâmicas com diversas formas e tamanhos. Foram estudadas 4 tipos de amostras: monocristal, pó calcinado, cerâmica sinterizada no forno e cerâmica sinterizada a laser. A sinterização a laser de materiais cerâmicos é uma nova técnica implantada recentemente no GCCMC – IFSC – USP que tem se mostrado bastante eficiente na produção de BGO, produzindo cerâmicas com alta densidade relativa e boa transparência. O pó de BGO foi obtido por reação de estado sólido e caracterizado por difração de raio-x e termoluminescência (TL). Para as medidas de TL, as amostras foram irradiadas com raios β do $^{90}\text{Sr}/\text{Y}$ com uma dose de 1600GY a uma taxa de 0,45Gy/min, ou com radiação UV da lâmpada de Hg. A curva de TL de todas as amostras estudadas, irradiadas com radiação β ou UV, apresentaram o mesmo conjunto de picos centrados em torno de 75, 102 e 147°C . Os valores de ordem cinética e energia de cada pico também foram medidos.

ESTUDO DE XRD E SXS DE FILMES FINOS $\text{Li}_x\text{Mn}_2\text{O}_4$

Cristiano T. de Meneses, Marcelo A. Macêdo, Flávio C. Vincentin
Laboratório de Preparação e Caracterização de Materiais,
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe
José Marcos Sasaki
Departamento de Física, Universidade Federal de Ceará

Os filmes finos de LiMn_2O_4 tem ganhado atenção de diversos pesquisadores nas últimas décadas por ser o material mais promissor para produção de cátodo de baterias

recarregáveis de íons de lítio. Mas para formar a estrutura desejada, não é tão fácil devido o Mn ter vários números de oxidação. O estudo em experimentos de XRD (difratometria de raios-x) e SXS (espalhamento de raios-x moles) é extrema importância para detectar as propriedades eletrônicas de filmes finos $\text{Li}_x\text{Mn}_2\text{O}_4$. Neste trabalho preparou-se filmes finos de $\text{Li}_x\text{Mn}_2\text{O}_4$ pela dissolução de cloreto de manganês em água de coco processada, variando a dopagem do Li com valores de x entre 0 e 2,0. Os filmes foram preparados pelo método de dip-coating em substrato de platina e lâmina de microscópio e mergulhado no sol a uma velocidade 10cm/min, sendo em seguida tratados termicamente a 100 °C por 15 minutos para a retirada da água e densificado a 500 °C por 15 minutos. Após repetir o mesmo processo por 5 vezes, foi realizada uma densificação final por 120 minutos em diferentes temperaturas acima de 500 °C. As Medidas de SXS foram realizadas no LNLS em campinas através das técnicas de fotoabsorção de elétrons e as medidas de XRD foram realizadas no Laboratório de Espalhamento de Luz do Departamento de Física da UFC. Foram estudadas as bordas K_1 e $L_{2,3}$ do oxigênio e manganês, respectivamente, assim como as estruturas eletrônicas do óxido de manganês litiado de cada amostra através de XRD. Resultados preliminares de SXS nas amostras de $x=0$ mostram que nas bordas $L_{2,3}$ do Mn e K_1 do oxigênio existe uma transição de intensidade entre 500 °C e 800 °C, mostrando a formação provavelmente de uma estrutura com fase metaestável. Na temperatura de 500 °C a fase encontrado foi a do Mn_3O_4 , à 620 °C formou-se a fase do metaestável Mn_5O_8 e a 800 °C observou-se novamente a mesma estrutura da temperatura de 500 °C. Já a análise de difratometria de raios-X revela a formação do óxido de manganês litiado juntamente com a fase Mn_3O_4 a partir de $x=0,9$ e é prevalecida quando $x=2,0$. (CAPES-UFS,CNPq)

MECANISMOS DE POLARIZAÇÃO E DESPOLARIZAÇÃO NO BaLiF_3 DOPADO COM METAIS DIVALENTES

Ana Gardênia S Mangureira, Mario E G Valerio, Jose F Lima, Sonia L Baldochi, Spero P Morato, N D Vieira Junior
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

O presente trabalho é mais um em uma série de trabalhos dedicados ao estudo das propriedades dos defeitos induzidos pela presença de metais divalentes no BaLiF_3 através de diferentes técnicas experimentais. No presente trabalho estamos estudando os mecanismos de polarização e despolarização induzidos pelo Ni^{2+} e Pb^{2+} no BaLiF_3 através das técnicas de Correntes de Polarização e Despolarização Estimuladas Termicamente (TSPC e TSDC, respectivamente). O BaLiF_3 é um cristal iônico de estrutura conhecida como perovskita invertida com os cátions Ba^{2+} e o Li^+ e os íons F- ocupando sítios de simetria Oh e D_{4h} respectivamente. O conhecimento da estrutura dos defeitos intrínsecos e os gerados por impurezas neste material é de grande importância no que se refere a aplicação em lasers e dispositivos ópticos. As amostras foram crescidas pela técnica de Czochralski em atmosfera dinâmica hidrofúorinante. As medidas de TSPC e TSDC estão sendo realizadas segundo um ciclo térmico que se inicia com a TSPC, com tensões de polarização de até 1100V entre temperatura próxima ao N_2 líquido até 350K com um programa de aquecimento linear, seguida de um resfriamento rápido com o campo aplicado e uma posterior medida de TSDC até 450K segundo um mesmo programa de aquecimento da TSPC. Os resultados obtidos indicam que as relaxações podem ser devidas a mecanismos dipolares.(LPCM - UFS)

PRODUÇÃO DE FILMES FINOS DOPADOS COM TERRAS RARAS PARA APLICAÇÃO EM DOSÍMETROS TERMOLUMINESCENTES DE RADIAÇÃO

Paulo J. R. Montes, Mário G. Valerio, Marcelo A. Macêdo
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Este trabalho está sendo desenvolvido no LPCM (Laboratório de Preparação e Caracterização de Materiais - UFS) e tem como objetivo associar nossa capacidade para produção de filmes finos com o estudo dos materiais termoluminescentes. Os filmes finos foram produzidos a partir da deposição de filmes óxidos em substratos de vidro e de aço inox através de um processo sol-gel utilizando a técnica “dip coating”. Foram produzidos filmes finos com 1 e 5 camadas a partir das soluções de $Y(NO_3)_3 \cdot 6H_2O$ (nitrato de ítrio) e $Y(NO_3)_3 \cdot 6H_2O$ dopada com neodímio através do Nd_2O_3 (óxido de neodímio) com ácido nítrico. Para todos os filmes, as soluções de partida foram produzidas utilizando-se água de coco como solvente. A sensibilidade à radiação gama (γ), alfa (α) e beta (β) dos substratos (vidro e aço inox) e dos filmes finos, produzidos com uma camada nestes substratos, foi investigada através da termoluminescência (TL). Foram feitas medidas de radioluminescência das amostras submetidas à radiação beta (β). Foi observado que tanto os substratos quanto os filmes, com uma camada, de Y_2O_3 são sensíveis aos três tipos de radiação, sendo que para o sistema filme+substrato a intensidade das curvas de TL é maior, indicando que o filme parece possuir um sinal de TL próprio, que somado com a contribuição do substrato resulta em um sinal de TL mais intenso, comparando com o sinal apenas do substrato.

USO DA TÉCNICA DE TERMOLUMINESCÊNCIA PARA O CONTROLE DE QUALIDADE DE PASTAS CIMENTADAS ESPECIAIS

B. F. Santos Jr¹(*), M. E. G. Valério¹, E. F. S. Vieira², A. R. Cestari², C. R. Miranda³,
A. C. F. Conceição³

¹ Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

² Departamento de Química, Universidade Federal de Sergipe

³ Petrobrás

Neste trabalho empregou-se a técnica de termoluminescência (TL) na caracterização de pastas especiais para operações de cimentação em poços de petróleo. Seguindo as normas da American Petroleum Institute (API), moldes cúbicos das pastas de cimento contendo diferentes aditivos foram curados durante trinta dias. As medidas de termoluminescência, que consistem na captação de luz estimulada termicamente de um determinado material, foram realizadas desde a temperatura ambiente até 360°C, seguindo um programa de aquecimento linear. A posição e intensidades dos picos TL indicam os tipos e quantidades de defeitos opticamente ativos presentes nos minerais e são utilizados para monitorar os processos físico-químicos que acompanham as reações que ocorrem nas diversas etapas da preparação das pastas. Na pasta básica, contendo cimento, água e sílica, observaram-se picos de TL a 275 e 315°C. Nas pastas contendo agentes sililantes ramificados como aditivos, observou-se que esses sinais desapareceram. Essa supressão está associada a um aumento na resistência térmica e mecânica das pastas aditivadas, como comprovado anteriormente por ensaios de termogravimetria e de resistência à compressão. Dessa forma, a técnica de TL pode ser utilizada como uma nova ferramenta para caracterizar pastas cimentadas, que apresentem estabilidades termo-mecânicas maiores que as pastas convencionais (não-aditivadas).

Palavras Chave: termoluminescência, pastas de cimento, minerais
(*) bfsantos@fisica.ufs.com.br

O FILME FINO DE Cr₂O₃ NA PRESENÇA DO GÁS CO₂

Ramires M. Silva, Marcelo A. Macêdo
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Este trabalho trata de uma pesquisa que busca minimizar os principais problemas de corrosão de origem química e mecânica, que se apresentam nos poços de produção de petróleo da bacia SEAL, a fim de reduzir seus custos operacionais que chega a ser em torno de U\$ 723.000,00 anuais. Um dos meios para minimizar o efeito corrosivo do CO₂ é revestir as peças metálicas afetadas pela corrosão com camadas de óxido. Resultados preliminares indicam que o Cr₂O₃ pode ser um bom candidato para este fim, pois este apresentou uma boa aderência ao aço. Para obtenção de tal filme foi-se utilizado uma solução de Cr(NO₃)₃.9H₂O (nitrato de cromo) em água de coco; depositada sobre o substrato de aço (usado pela PETROBRÁS); secado à 100 °C e depois densificado à 500, 600, 700 e 800 °C por 1 min e 15 min. O comportamento anticorrosivo foi analisado via as técnicas de raios-X, microscopia de força atômica e potenciodinâmica. Os resultados revelaram uma alta cristalinidade com formação de domínios revestindo toda a superfície do aço. A taxa de corrosão relativa teve uma redução do fator de 5 após o aço ser revestido pelos filmes em um eletrólito de 3% NaCl sob um fluxo de 0,25 litro/min do gás CO₂.

PREPARAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE FILMES FINOS SOL-GEL DE ÓXIDO DE ESTRÔNCIO A PARTIR DA ÁGUA DE COCO

Edjane Rocha dos Santos, Marcelo Andrade Macêdo.
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Os problemas de corrosão nos poços bombeados da bacia SEAL devido a ação do gás CO₂ são de grande preocupação da PETROBRAS, pois estes tem ocasionado uma perda de milhares de dólares por ano. Este trabalho tem o objetivo de mostrar os primeiros resultados de uma das rotas possíveis de se minimizar o referido problema: revestir o aço com óxido de estrôncio. Os filmes foram preparados através da mistura da água de coco com o Sr(NO₃)₂ (nitrato de estrôncio) na concentração de 0,5 mol/litro. Eles foram depositados via técnica “dip-coating” do tipo batelada dividida em cinco estágios: imersão, retirada, deposição, drenagem e evaporação. A velocidade de decomposição foi de 10cm/min e o substrato usado foi o aço. Inicialmente foi realizado um tratamento a 100 °C por 30 min e depois um tratamento térmico final a 500, 600 e 700° C por 10 min. Os resultados demonstraram que os filmes tiveram uma boa aderência e com uma superfície lisa livre de rachaduras. Estes filmes serão caracterizados via difração de raio-X para determinação das fases cristalinas e do tamanho dos grãos e medidas da taxa de corrosão em soluções de NaCl de concentrações de 0,1, 0,5, 1, 2 e 3% na presença do gás CO₂.

PRODUÇÃO DE CALCITA SINTÉTICA PURA E DOPADA POR DIFUSÃO EM GEL

Tatiana Santos de Araujo, Mário Ernesto Giroldo Valerio

Cristais de calcita têm aplicações famosas em instrumentos ópticos e tecnologia de laser; e como as fontes de espécies naturais parece estar diminuindo, um interesse especial é preso a todos os métodos de cultivar o material artificialmente. Tanto os materiais naturais como sintéticos apresentam propriedades de caráter tecnológico, no entanto o estudo destas propriedades depende fortemente da quantidade e principalmente dos tipos de “imperfeições” presentes na estrutura do material. Entende-se por imperfeição, tudo que seja diferente do arranjo cristalino “normal” ou “perfeito” da estrutura do sólido em questão. O interesse no conhecimento cada vez maior das propriedades termoluminescentes da calcita é devido ao fato de que as medidas de termoluminescência (TL) permitem a datação de formações geológicas e de fosséis. A calcita é um material birrefringente, o que permite a sua utilização em dispositivos ópticos, e apresenta bandas de absorção na região do infravermelho, o que tem chamado a atenção dos pesquisadores para a possibilidade de se produzir lasers. Um grupo pertencente ao LPCM do Departamento de Física da UFS vem trabalhando a fim de explicar o mecanismo de TL da calcita, pois como sabemos o fenômeno vem sendo largamente utilizado em datação arqueológica e na dosimetria de radiação. Propõe-se investigar a possibilidade de produção de calcita de boa qualidade óptica e de dimensões apropriadas para aplicações tecnológicas. Vem sendo utilizado nesta pesquisa o método da difusão e crescimento em gel. Visto que esta técnica tem mostrado bons resultados na maioria dos casos. No presente estágio do trabalho obteve-se cristais de calcita de até 850 μm de diâmetro médio, caracterizados via microscopia óptica.

Simulação Computacional de Materiais

ESTUDOS DE SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA FASE CRISTALINA DE MOLÉCULAS ORGÂNICAS BIOLÓGICAMENTE ATIVAS

Marcelo L. dos Santos, Ledjane S. Barreto, Luís E. Almeida
Departamento de Química, Universidade Federal de Sergipe

Moléculas orgânicas são geralmente volumosas e se agrupam irregularmente, resultando em sistemas cristalinos de baixa simetria. No complexo mundo das moléculas orgânicas e cristais orgânicos encontram-se as porfirinas, que são compostos coloridos devido ao sistema de elétrons altamente conjugados. As porfirinas são sensíveis ao meio em que se encontram, podendo alterar propriedades estruturais e eletrônicas. Elas compreendem uma classe importante de moléculas presentes em muitos sistemas biológicos. Como exemplo, podemos citar aquelas que constituem os sítios ativos de numerosas hemoproteínas; estão presentes também no citocromo e na clorofila. A modelagem da fase cristalina da porfirina base livre foi realizada no programa de simulação computacional GULP (General Utility Lattice Program) que utiliza técnicas de simulação estática e dinâmica molecular. Para modelar as forças atuantes entre as moléculas da porfirina foram utilizados pares potenciais de dois e três corpos. Foram construídas curvas para as interações átomo-átomo, que foram utilizadas no ajuste dos parâmetros potenciais. A análise das populações de Mulliken foi utilizada para descrever a distribuição de carga na porfirina. Os estudos de dinâmica molecular permitiram um melhor refinamento dos parâmetros potenciais. A partir dos potenciais

otimizados foi obtida uma boa concordância entre os parâmetros cristalográficos calculados e experimentais da porfirina base livre.

MODELAGEM COMPUTACIONAL DOS SISTEMAS LiMAlF_6 (M = CA OU SR) DOPADOS COM ÍONS TERRAS RARAS

Mário E. G. Valerio, Jomar B. Amaral
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

As técnicas de modelagem computacional estão agora presentes nas Ciências do estado sólido e molecular. Uma grande variedade de ferramentas está disponível, variando desde modelagem de potenciais interatômicos que permitem uma rápida e eficiente modelagem das estruturas incluindo um grande número de átomos, até modelagem da estrutura eletrônica, magnética e suas propriedades. Vários pacotes computacionais foram desenvolvidos por diferentes pesquisadores para aplicações em simulações estruturais e envolvendo defeitos pontuais, o GULP (General Utility Lattice Program) desenvolvido por J. Gale, tem demonstrado ser o programa mais flexível e mais confiável e que tem sido usado por um maior número de pesquisadores. Utilizando o GULP as estruturas do LiCaAlF_6 (LiCAF), LiSrAlF_6 (LiSAF) e alguns fluoretos são analisadas e modeladas. Potenciais interiônicos são ajustados para dados experimentais e estes potenciais resultantes são usados para calcular os defeitos. As energias de formação dos defeitos são obtidas e usadas para prever os tipos de desordem intrínseca. A busca por um laser do estado sólido eficiente com boa emissão na região ultravioleta tem resultado no crescimento e desenvolvimento de cristais como o LiCAF e o LiSAF. O sucesso ou não do laser depende basicamente da dopagem do cristal com qualquer íon em especial neste caso os terras raras (RE^{3+}); seu campo; tamanho e carga do sítio designado para substituição; como também sutis detalhes levando em conta a interação da impureza com a rede cristalina do cristal. Cristais e sistemas moleculares e amorfos contendo íons RE^{3+} são atualmente aplicados em vários domínios, desde a conhecida tecnologia laser até contrastes usados em análises médicas do corpo humano, passando por dispositivos moleculares conversores de luz (LCMD) e supercondutores, o que atesta a importância da aplicação destes íons na vida social e do investimento de tempo e recursos para estudar sistemas contendo íons RE^{3+} .

Resumos das apresentações em painéis

As apresentações em painel ocorrerão no dia 02/Agosto às 14:00 horas, no Hall da Reitoria (entrada do prédio da Reitoria).

AP

Data: 02/Agosto
Horário: 14:00 - 15:00
Local: Hall da Reitoria
Grupos de trabalho: Biofísica e Física Médica, Ensino de Física, Física Atômica e Molecular, Física Computacional, Produção e Caracterização de Materiais
Coordenadora: Profa. Divanizia do Nascimento Souza

Biofísica e Física Médica

A RADIOTERAPIA EM SERGIPE

Katiucia da Silva Santana¹, Mario Ernesto Giroldo Valerio¹, Divanizia do Nascimento Souza²

¹Depto. de Física, Universidade Federal de Sergipe

²Departamento de Educação, Universidade Federal de Sergipe
katiucias@bol.com.br

Este trabalho tem o objetivo de detalhar a evolução histórica da radioterapia em Sergipe. Neste Estado, o início da radioterapia deu-se através do médico Dr. Osvaldo Leite. Em 1970 o primeiro serviço de radioterapia foi inaugurado sob a direção deste médico nas dependências do Hospital de Cirurgia. Neste serviço foram feitos os primeiros tratamentos de radioterapia convencional, utilizando fontes de radio-226. Em 1977 foi instalado a primeira unidade de cobalto-60 (Theratron 780) para tratamentos de teleterapia. Já na década de 80, foram feitos os primeiros tratamentos por braquiterapia, utilizando-se fontes de céσιο-137. Em abril de 2002 foi implantado o primeiro Acelerador Linear de fótons de alta energia no Hospital de Cirurgia, e logo após, mais um Acelerador Linear foi instalado nas dependências do Hospital Gov. João Alves Filho. Além destes equipamentos a radioterapia deste Estado dispõe de placas de $^{90}\text{Sr}/^{90}\text{Y}$ para aplicações em betaterapia. Atualmente, a radioterapia de Sergipe dispõe de uma equipe composta de médicos radioterapeutas, físicos e técnicos. A média de pacientes tratados por teleterapia, braquiterapia e betaterapia é de 70 pacientes ao dia.

Ensino de Física

OS CONCEITOS DE FÍSICA ESTUDADOS NO ENSINO FUNDAMENTAL NA VISÃO DOS ALUNOS DE PEDAGOGIA E FÍSICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE

Suzana Arleno Souza Santos¹, Tiago Nery Ribeiro¹, Divanizia do Nascimento Souza²

¹Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

²Departamento de Educação, Universidade Federal de Sergipe

Ao decorrer da história da educação brasileira nos confrontamos com um problema que preocupa a professores e alunos que são os conceitos de física abordados no ensino fundamental. Com o intuito de encontrarmos novas estratégias instrucionais na física começamos a desenvolver um diagnóstico das grandes dificuldades no ensino desta disciplina. O projeto consiste num estudo de casos com alunos do curso de Pedagogia e Licenciatura em Física da Universidade Federal de Sergipe, numa tentativa de investigar o grau de conhecimento de alguns conceitos científicos da área de física, presentes nos conteúdos curriculares da 1^a à 4^a séries. A amostra escolhida envolveu alunos matriculados regularmente no primeiro semestre de 2002 destes cursos. O instrumento adotado para coleta de dados foi um questionário, elaborado com perguntas de cunho teórico. Os dados analisados revelam algumas dificuldades que os alunos dos cursos de Pedagogia e Licenciatura em Física apresentam ao lidarem com conceitos científicos presentes no ensino fundamental.

AVALIAÇÃO DOS CURSOS DE FÍSICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE

Luiz G. de Azevedo, Osmar S. Silva Jr.
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

O curso de graduação em Física da Universidade Federal de Sergipe (UFS), com as habilitações Licenciatura e Bacharelado, foi criado em 1972 e reconhecido pelo Conselho Federal de Educação em 1976. O primeiro aluno licenciou-se em 1975. Já a oferta de disciplinas específicas para o curso de Bacharelado em Física foi iniciada em 1984, e o primeiro bacharel formou-se em 1987. Ao longo dos anos têm sido feitas avaliações da evolução do número de alunos matriculados no curso, do número de graduados por semestre, e de parâmetros como a média geral ponderada e o coeficiente de regularidade, dentre outros. Em particular, um dos autores (OSSJ) apresentou resultados de uma avaliação dos cursos em 1997. Entretanto, desde essa data, muitas mudanças significativas ocorreram. Foi criado o curso noturno de Licenciatura em Física, uma reivindicação da própria sociedade brasileira. Mais tarde, dobrou-se o número de vagas desse curso. Recentemente, foi criado o curso de Física Médica. Além disso, o Departamento de Física tem contribuído para a formação de professores de segundo grau do interior do Estado, integrando-se ao PQD (programa de qualificação docente). Se em 1997 contávamos com cerca de 160 alunos matriculados nos cursos de Física, hoje temos 400 estudantes. E, se formávamos cinco alunos por semestre em 1997, no último semestre (2001-2) graduaram-se catorze alunos. Fica claro que estamos vivendo uma nova fase do Departamento de Física, e é de se perguntar como estão evoluindo os alunos em seus cursos, quais suas dificuldades e conquistas. Neste trabalho, efetuamos nova avaliação dos cursos de Física, baseando-nos em dados recentes do Sistema Acadêmico da UFS.

OLIMPÍADA BRASILEIRA DE FÍSICA: ÊNFASE NOS RESULTADOS DO ESTADO DE SERGIPE

Selma Rozane Vieira
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

As competições denominadas "olimpíadas" encontram-se entre as novas formas de divulgação da Ciência. De acordo com o que se consta em registro a I Olimpíada Internacional de Física foi realizada em Varsóvia, no ano de 1967, por iniciativa de professores poloneses, checoslovacos e húngaros que decidiram organizar uma competição entre os melhores alunos de física de seus países. No Brasil, as primeiras olimpíadas de física ocorreram no Estado de São Paulo nos anos de 1985 a 1987, organizada pelo prof. Shigueo, então diretor-executivo da Academia de Ciências do Estado de São Paulo. Também, no mesmo período, no Paraná, organizadas pelo professor Dunke da Universidade Federal do Paraná. Ambas foram interrompidas até 1995, por falta de apoio institucional, quando o Instituto de Física de São Carlos da USP (IFSC-USP), sob a direção do prof. Dr. Dietrich Schiel, retomou a realização das mesmas. Os Estados do Ceará e da Paraíba, através de suas Universidades Federais, realizam olimpíadas de física desde 1993. O mesmo ocorre em Minas Gerais, na Universidade Federal de Juiz de Fora, desde 1994. Em 1998, os Estados da Bahia, Goiás, Pará, Pernambuco e Rio de Janeiro participaram, em caráter experimental da Olimpíada do IFSC-USP. Em 1998, a Sociedade Brasileira de Física (SBF) resolveu organizar uma olimpíada de física, em caráter nacional, tendo sido a primeira edição

realizada em 1999, com a participação de mais de 13 mil alunos inscritos para a primeira fase em 18 unidades da federação. Na olimpíada de 2000, participaram mais de 30.000 estudantes de 21 estados da federação. Já em 2001 o número de participantes ficou na casa de 25.000 de 24 estados da federação. Apresentaremos os resultados (número de alunos, escolas, colocação, etc) da participação de Sergipe (desde 1999) na Olimpíada Brasileira de Física bem como, o desempenho do Brasil nas últimas Olimpíadas Internacionais.

Física Atômica e Molecular

RELAÇÃO ENTRE AS ONDAS PARCIAIS E A AMPLITUDE DE ESPALHAMENTO ELÉTRON-ÁTOMO

Tiago Souza Araujo, Osmar S. Silva Jr.

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Nossa área de pesquisa é o estudo teórico de colisões de elétrons com átomos. Quando um elétron atravessa um átomo ele é repelido, logo vai mudar sua trajetória. Se um feixe de elétrons for atravessar um átomo, teremos uma certa quantidade de elétrons espalhados, e a razão entre esta quantidade e a inicial é o que chamamos de seção de choque diferencial. A amplitude de espalhamento está relacionada com a seção de choque diferencial, da qual conhecemos valores experimentais para vários casos. De um ponto de vista teórico, a amplitude de espalhamento, para espalhamentos elásticos e inelásticos de elétrons por átomos neutros, é dada como uma expansão em ondas parciais (isto é, uma série infinita) em termos de harmônicos esféricos. Seria bastante interessante para o físico teórico dispor de um instrumento que possa determinar quais dessas ondas parciais são as mais importantes, isto é, quais os maiores coeficientes da expansão, para um dado espalhamento do qual se conhecem resultados experimentais. Neste trabalho, calculamos amplitudes de espalhamento a partir de dados de seções de choque diferenciais de espalhamento elástico elétron-hélio experimentais. Como a amplitude de espalhamento é caracterizada em termos de ondas parciais, pudemos avaliar como essas ondas parciais a influenciam, para cada valor do momento angular do elétron incidente. Calculamos analiticamente os coeficientes para o caso de três termos na expansão, correspondendo a momentos angulares iguais a 0, 1 e 2. Elaboramos rotinas computacionais em FORTRAN para resolver numericamente um sistema não-linear de equações acopladas, para calcular os coeficientes a partir dos dados experimentais da seção de choque diferencial, e testamos o procedimento para colisões elásticas elétron-hélio a baixas energias.

Física Computacional

PROGRAMA EGSAJFU QUE AJUSTA PONTOS EXPERIMENTAIS PELA

$$\text{FUNÇÃO } Y(X) = A(1) + A(2) F(X) + A(3) G(X) + A(4) H(X) + \dots$$

Everton Gomes de Santana

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Analisando alguns programas que ajustam pontos experimentais por uma função, constatei que limitavam-se a casos particulares. A fim de levantar esta limitação, elaborei um programa em Qbasic que ajusta os pontos experimentais pela função $Y(x) =$

$A(1) + A(2) F(x) + A(3) G(x) + A(4) H(x) + \dots$, onde as funções $F(x)$, $G(x)$ e $H(x)$, ... , não podem conter coeficientes a determinar e são digitadas, podendo a função $Y(x)$ ser incompleta, ou seja, quaisquer dos coeficientes podem ser colocados nulos, e o programa encontrará os outros coeficientes que melhor ajustam os pontos experimentais. O ajuste é feito pelo método dos mínimos quadrados, resolvendo o sistema de equações pelo processo de eliminação de Gauss. O programa permite a entrada por pontos experimentais, podendo-se escolher se a entrada é pelo teclado ou por arquivo. Para entrada deve-se introduzir o número de coeficientes a determinar, valor entre 0 e 10, o número de pontos experimentais e o número de casas decimais desejados para visualização dos resultados. Pode-se optar se o polinômio é completo ou não, e se não, deve-se introduzir o número de coeficientes nulos, e quais são eles. Depois de executado o programa, se achar que o desvio padrão foi alto, pode-se introduzir novos valores para o número de coeficientes a determinar, a fim de tentar melhor ajuste. Como resultado, o programa mostra no vídeo os coeficientes do sistema de equações da matriz estendida e o valor do determinante do sistema de equações que o programa resolveu, os coeficientes da função polinomial e os valores dos pontos experimentais e da função ajustada, havendo ainda a opção de gerar um arquivo e visualização do gráfico dos pontos experimentais e da função ajustada em função da variável independente.

AValiação de Rotinas Computacionais para o Cálculo de Funções de Bessel Esféricas e Funções Coulombianas

Everton G. de Santana, Osmar S. Silva Jr.

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Em Física Atômica de Colisões, o interesse tem se voltado, nos últimos anos para o espalhamento de elétrons por íons, e colisões produzindo ionização. Estes tipos de colisões se caracterizam, do ponto de vista teórico, pelo longo alcance do potencial de interação entre o elétron incidente (ou espalhado) e o íon. A solução assintótica do assim chamado espalhamento Coulombiano são as funções Coulombianas, que contrastam com as funções de Bessel esféricas, soluções assintóticas da equação de Schrödinger para o caso do espalhamento de elétrons por átomos neutros. Para descrição teórica do espalhamento de elétrons por átomos ou íons necessita-se portanto de tais funções, que podem ser calculadas numericamente por algumas rotinas computacionais encontradas na literatura. Neste trabalho analisamos resultados para funções de Bessel esféricas $j_L(r)$, $\eta_L(r)$ e funções Coulombianas, regular e irregular obtidas de três sub-rotinas, BEFGH[1], SBESJY e COUL90[2], que comparamos entre si para valores baixos e altos (limite assintótico) da variável independente r e do índice L , e com resultados exatos para valores baixos de r e L . Elaboramos também sub-rotinas que resolvem as equações diferenciais de Bessel e de Coulomb, convertimos a sub-rotina SBESJY para o Qbasic e acrescentamos como saída as funções de Bessel regulares obtidas pela fórmula de recorrência. Em geral encontramos muito bom acordo entre todas as sub-rotinas analisadas.

[1] BATES, G N. *Computer Physics Communications*, v. 8, p. 220-35, 1974.

[2] BARTSCHAT, K. *Computational Atomic Physics*. Berlin: Springer, 1996.

TERMOLUMINESCÊNCIA DA JADE, PRIMEIRAS ANÁLISES

Cinthia Marques Sousa de Magalhães

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Adeilson Pessoa de Melo

Escola Técnica Federal de Sergipe

Divanizia do Nascimento Souza

Departamento de Educação, Universidade Federal de Sergipe

Jade é denominação comum a dois minerais, jadeite e nefrite. Estes minerais foram muito usados pelos nativos da América Central e China como ornamentos e pedras religiosas, sendo considerados minerais semi-preciosos. O mineral utilizado neste trabalho tem composição química provável $\text{NaAlSi}_2\text{O}_6$ (jadeite). Este mineral possui dureza entre 6,5 e 7,0 e na natureza pode ser encontrado nas cores amarela, rosa e verde, entre outras. A pedra utilizada neste trabalho possui coloração verde. Objetivando realizar medidas de termoluminescência com este mineral, primeiramente transformamos a pedra em pó e fizemos medidas do sinal TL da amostra natural. Nesta etapa já foi possível observar um pico TL em, aproximadamente, 250°C . Em seguida, irradiamos a amostra natural com doses diferentes de radiação beta de $\text{Sr}90/\text{Y}90$ e outros picos apareceram. Posteriormente, tratamos a amostra a 400 , 500 e 600°C por 1 hora e irradiamos com uma dose de 80 Gy. Verificou-se que a intensidade dos picos TL foi maior para tratamentos térmicos em temperaturas mais altas. Uma outra análise foi feita observando-se a sensibilidade TL da amostra tratada a 400°C a doses de radiação no intervalo entre 13,5 Gy e 1,9 kGy. Para estas amostras, a sensibilidade dos picos TL cresce com a dose, verificando-se a presença de um pico TL em temperatura de aproximadamente 60°C que decai rapidamente. Os resultados mostram que as intensidades dos picos TL deste mineral têm uma forte dependência com a dose da radiação e com os tratamentos térmicos a que as amostras são submetidas.

ESTUDO DAS PROPRIEDADES TERMOLUMINESCENTES DE COMPÓSITOS A BASE DE VIDROS E MICROCRISTAIS PARA APLICAÇÃO EM DOSÍMETROS TERMOLUMINESCENTES

Adolfo Mendonça Barros, Mário Ernesto Giroldo Valério, José Fernandes de Lima

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Com o atual desenvolvimento de inúmeras aplicações das radiações ionizantes, cresce a necessidade de segurança no uso dessas radiações. Os materiais que apresentam o fenômeno da termoluminescência, ou seja, os materiais que emitem luz durante o aquecimento e cuja intensidade luminosa guarda uma relação de proporcionalidade com a dose de radiação que receberam previamente, podem ser utilizados na dosimetria pessoal e ambiental. É objetivo de estudo deste projeto desenvolver uma forma sistemática para a produção de compósitos com vidro e microcristais de calcita a partir de pastilhas conformadas. Foi introduzida neste trabalho, a dopagem da calcita com o íon Nd^{3+} , que é um estudo inovador, pois apesar deste íon ser encontrado em cristais de diversas origens, não há na literatura qualquer referência à dopagem da calcita por REE's (Rare-earth elements). A amostra de $\text{CaCO}_3:\text{Nd}^{3+}$ é obtida através da precipitação lenta de 100ml de solução de CaCl_2 e NdCl_3 em 200ml de solução de $(\text{NH}_4)_2\text{CO}_3$. A amostra é analisada através de microscópio óptico para verificar se as estruturas cristalinas são predominantemente trigonais, ou seja, verificar se o CaCO_3 é realmente calcita. Os compósitos foram preparados com uma mistura de vidro e calcita

com granulação menor que 45 μm , nas proporções 2:1 em volume e 3:1 em massa. Os pós são misturados e em seguida prensados a aproximadamente 70lb/pol² de 2 a 3 minutos, obtendo-se pastilhas de 6 mm de diâmetro e 1 mm de espessura. A pastilha é levada ao forno para um tratamento térmico com o objetivo de alcançar a densificação. São estudadas as influências na emissão TL dos compósitos por diferentes parâmetros tais como a concentração relativa de microcristais e vidro, a pressão na fase de conformação das pastilhas, a temperatura e tempo do tratamento térmico usado para densificar as pastilhas e a concentração de dopante nos microcristais ativos.

Apresentações em painéis

Biofísica e Física Médica

A RADIOTERAPIA EM SERGIPE

Katiucia da Silva Santana¹, Mario Ernesto Giroldo Valerio¹, Divanizia do Nascimento Souza²

¹Depto. de Física, Universidade Federal de Sergipe

²Departamento de Educação, Universidade Federal de Sergipe

katiucias@bol.com.br

Este trabalho tem o objetivo de detalhar a evolução histórica da radioterapia em Sergipe. Neste Estado, o início da radioterapia deu-se através do médico Dr. Osvaldo Leite. Em 1970 o primeiro serviço de radioterapia foi inaugurado sob a direção deste médico nas dependências do Hospital de Cirurgia. Neste serviço foram feitos os primeiros tratamentos de radioterapia convencional, utilizando fontes de radio-226. Em 1977 foi instalado a primeira unidade de cobalto-60 (Theratron 780) para tratamentos de teleterapia. Já na década de 80, foram feitos os primeiros tratamentos por braquiterapia, utilizando-se fontes de céσιο-137. Em abril de 2002 foi implantado o primeiro Acelerador Linear de fótons de alta energia no Hospital de Cirurgia, e logo após, mais um Acelerador Linear foi instalado nas dependências do Hospital Gov. João Alves Filho. Além destes equipamentos a radioterapia deste Estado dispõe de placas de ⁹⁰Sr/⁹⁰Y para aplicações em betaterapia. Atualmente, a radioterapia de Sergipe dispõe de uma equipe composta de médicos radioterapeutas, físicos e técnicos. A média de pacientes tratados por teleterapia, braquiterapia e betaterapia é de 70 pacientes ao dia.

Ensino de Física

OLIMPÍADA BRASILEIRA DE FÍSICA: ÊNFASE NOS RESULTADOS DO ESTADO DE SERGIPE

Selma Rozane Vieira

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

As competições denominadas "olimpíadas" encontram-se entre as novas formas de divulgação da Ciência. De acordo com o que se consta em registro a I Olimpíada Internacional de Física foi realizada em Varsóvia, no ano de 1967, por iniciativa de professores poloneses, checoslovacos e húngaros que decidiram organizar uma competição entre os melhores alunos de física de seus países. No Brasil, as primeiras

olimpíadas de física ocorreram no Estado de São Paulo nos anos de 1985 a 1987, organizada pelo prof. Shigueo, então diretor-executivo da Academia de Ciências do Estado de São Paulo. Também, no mesmo período, no Paraná, organizadas pelo professor Dunke da Universidade Federal do Paraná. Ambas foram interrompidas até 1995, por falta de apoio institucional, quando o Instituto de Física de São Carlos da USP (IFSC-USP), sob a direção do prof. Dr. Dietrich Schiel, retomou a realização das mesmas. Os Estados do Ceará e da Paraíba, através de suas Universidades Federais, realizam olimpíadas de física desde 1993. O mesmo ocorre em Minas Gerais, na Universidade Federal de Juiz de Fora, desde 1994. Em 1998, os Estados da Bahia, Goiás, Pará, Pernambuco e Rio de Janeiro participaram, em caráter experimental da Olimpíada do IFSC-USP. Em 1998, a Sociedade Brasileira de Física (SBF) resolveu organizar uma olimpíada de física, em caráter nacional, tendo sido a primeira edição realizada em 1999, com a participação de mais de 13 mil alunos inscritos para a primeira fase em 18 unidades da federação. Na olimpíada de 2000, participaram mais de 30.000 estudantes de 21 estados da federação. Já em 2001 o número de participantes ficou na casa de 25.000 de 24 estados da federação. Apresentaremos os resultados (número de alunos, escolas, colocação, etc) da participação de Sergipe (desde 1999) na Olimpíada Brasileira de Física bem como, o desempenho do Brasil nas últimas Olimpíadas Internacionais.

AVALIAÇÃO DOS CURSOS DE FÍSICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE

Luiz G. de Azevedo, Osmar S. Silva Jr.
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

O curso de graduação em Física da Universidade Federal de Sergipe (UFS), com as habilitações Licenciatura e Bacharelado, foi criado em 1972 e reconhecido pelo Conselho Federal de Educação em 1976. O primeiro aluno licenciou-se em 1975. Já a oferta de disciplinas específicas para o curso de Bacharelado em Física foi iniciada em 1984, e o primeiro bacharel formou-se em 1987. Ao longo dos anos têm sido feitas avaliações da evolução do número de alunos matriculados no curso, do número de graduados por semestre, e de parâmetros como a média geral ponderada e o coeficiente de regularidade, dentre outros. Em particular, um dos autores (OSSJ) apresentou resultados de uma avaliação dos cursos em 1997. Entretanto, desde essa data, muitas mudanças significativas ocorreram. Foi criado o curso noturno de Licenciatura em Física, uma reivindicação da própria sociedade brasileira. Mais tarde, dobrou-se o número de vagas desse curso. Recentemente, foi criado o curso de Física Médica. Além disso, o Departamento de Física tem contribuído para a formação de professores de segundo grau do interior do Estado, integrando-se ao PQD (programa de qualificação docente). Se em 1997 contávamos com cerca de 160 alunos matriculados nos cursos de Física, hoje temos 400 estudantes. E, se formávamos cinco alunos por semestre em 1997, no último semestre (2001-2) graduaram-se catorze alunos. Fica claro que estamos vivendo uma nova fase do Departamento de Física, e é de se perguntar como estão evoluindo os alunos em seus cursos, quais suas dificuldades e conquistas. Neste trabalho, efetuamos nova avaliação dos cursos de Física, baseando-nos em dados recentes do Sistema Acadêmico da UFS.

OS CONCEITOS DE FÍSICA ESTUDADOS NO ENSINO FUNDAMENTAL NA VISÃO DOS ALUNOS DE PEDAGOGIA E FÍSICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE

Suzana Arleno Souza Santos¹, Tiago Nery Ribeiro¹, Divanizia do Nascimento Souza

¹Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

²Departamento de Educação, Universidade Federal de Sergipe

Ao decorrer da história da educação brasileira nos confrontamos com um problema que preocupa a professores e alunos que são os conceitos de física abordados no ensino fundamental. Com o intuito de encontrarmos novas estratégias instrucionais na física começamos a desenvolver um diagnóstico das grandes dificuldades no ensino desta disciplina. O projeto consiste num estudo de casos com alunos do curso de Pedagogia e Licenciatura em Física da Universidade Federal de Sergipe, numa tentativa de investigar o grau de conhecimento de alguns conceitos científicos da área de física, presentes nos conteúdos curriculares da 1^a à 4^a séries. A amostra escolhida envolveu alunos matriculados regularmente no primeiro semestre de 2002 destes cursos. O instrumento adotado para coleta de dados foi um questionário, elaborado com perguntas de cunho teórico. Os dados analisados revelam algumas dificuldades que os alunos dos cursos de Pedagogia e Licenciatura em Física apresentam ao lidarem com conceitos científicos presentes no ensino fundamental.

Física Atômica e Molecular

RELAÇÃO ENTRE AS ONDAS PARCIAIS E A AMPLITUDE DE ESPALHAMENTO ELÉTRON-ÁTOMO

Tiago Souza Araujo, Osmar S. Silva Jr.

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Nossa área de pesquisa é o estudo teórico de colisões de elétrons com átomos. Quando um elétron atravessa um átomo ele é repellido, logo vai mudar sua trajetória. Se um feixe de elétrons for atravessar um átomo, teremos uma certa quantidade de elétrons espalhados, e a razão entre esta quantidade e a inicial é o que chamamos de seção de choque diferencial. A amplitude de espalhamento está relacionada com a seção de choque diferencial, da qual conhecemos valores experimentais para vários casos. De um ponto de vista teórico, a amplitude de espalhamento, para espalhamentos elásticos e inelásticos de elétrons por átomos neutros, é dada como uma expansão em ondas parciais (isto é, uma série infinita) em termos de harmônicos esféricos. Seria bastante interessante para o físico teórico dispor de um instrumento que possa determinar quais dessas ondas parciais são as mais importantes, isto é, quais os maiores coeficientes da expansão, para um dado espalhamento do qual se conhecem resultados experimentais. Neste trabalho, calculamos amplitudes de espalhamento a partir de dados de seções de choque diferenciais de espalhamento elástico elétron-hélio experimentais. Como a amplitude de espalhamento é caracterizada em termos de ondas parciais, pudemos avaliar como essas ondas parciais a influenciam, para cada valor do momento angular do elétron incidente. Calculamos analiticamente os coeficientes para o caso de três termos na expansão, correspondendo a momentos angulares iguais a 0, 1 e 2. Elaboramos rotinas computacionais em FORTRAN para resolver numericamente um sistema não-linear de equações acopladas, para calcular os coeficientes a partir dos

dados experimentais da seção de choque diferencial, e testamos o procedimento para colisões elásticas elétron-hélio a baixas energias.

Física Computacional

PROGRAMA EGSAJFU QUE AJUSTA PONTOS EXPERIMENTAIS PELA FUNÇÃO $Y(x) = A(1) + A(2) F(x) + A(3) G(x) + A(4) H(x) + \dots$

Everton Gomes de Santana

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Analisando alguns programas que ajustam pontos experimentais por uma função, constatei que limitavam-se a casos particulares. A fim de levantar esta limitação, elaborei um programa em Qbasic que ajusta os pontos experimentais pela função $Y(x) = A(1) + A(2) F(x) + A(3) G(x) + A(4) H(x) + \dots$, onde as funções $F(x)$, $G(x)$ e $H(x)$, ... , não podem conter coeficientes a determinar e são digitadas, podendo a função $Y(x)$ ser incompleta, ou seja, quaisquer dos coeficientes podem ser colocados nulos, e o programa encontrará os outros coeficientes que melhor ajustam os pontos experimentais. O ajuste é feito pelo método dos mínimos quadrados, resolvendo o sistema de equações pelo processo de eliminação de Gauss. O programa permite a entrada por pontos experimentais, podendo-se escolher se a entrada é pelo teclado ou por arquivo. Para entrada deve-se introduzir o número de coeficientes a determinar, valor entre 0 e 10, o número de pontos experimentais e o número de casas decimais desejados para visualização dos resultados. Pode-se optar se o polinômio é completo ou não, e se não, deve-se introduzir o número de coeficientes nulos, e quais são eles. Depois de executado o programa, se achar que o desvio padrão foi alto, pode-se introduzir novos valores para o número de coeficientes a determinar, a fim de tentar melhor ajuste. Como resultado, o programa mostra no vídeo os coeficientes do sistema de equações da matriz estendida e o valor do determinante do sistema de equações que o programa resolveu, os coeficientes da função polinomial e os valores dos pontos experimentais e da função ajustada, havendo ainda a opção de gerar um arquivo e visualização do gráfico dos pontos experimentais e da função ajustada em função da variável independente.

AValiação de Rotinas Computacionais para o Cálculo de Funções de Bessel Esféricas e Funções Coulombianas

Everton G. de Santana, Osmar S. Silva Jr.

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Em Física Atômica de Colisões, o interesse tem se voltado, nos últimos anos para o espalhamento de elétrons por íons, e colisões produzindo ionização. Estes tipos de colisões se caracterizam, do ponto de vista teórico, pelo longo alcance do potencial de interação entre o elétron incidente (ou espalhado) e o íon. A solução assintótica do assim chamado espalhamento Coulombiano são as funções Coulombianas, que contrastam com as funções de Bessel esféricas, soluções assintóticas da equação de Schrödinger para o caso do espalhamento de elétrons por átomos neutros. Para descrição teórica do espalhamento de elétrons por átomos ou íons necessita-se portanto de tais funções, que podem ser calculadas numericamente por algumas rotinas computacionais encontradas na literatura. Neste trabalho analisamos resultados para

funções de Bessel esféricas $j_L(r)$, $\eta_L(r)$ e funções Coulombianas, regular e irregular obtidas de três sub-rotinas, BEFGH[1], SBESJY e COUL90[2], que comparamos entre si para valores baixos e altos (limite assintótico) da variável independente r e do índice L , e com resultados exatos para valores baixos de r e L . Elaboramos também sub-rotinas que resolvem as equações diferenciais de Bessel e de Coulomb, convertimos a sub-rotina SBESJY para o Qbasic e acrescentamos como saída as funções de Bessel regulares obtidas pela fórmula de recorrência. Em geral encontramos muito bom acordo entre todas as sub-rotinas analisadas.

[1] BATES, G N. *Computer Physics Communications*, v. 8, p. 220-35, 1974.

[2] BARTSCHAT, K. *Computational Atomic Physics*. Berlin: Springer, 1996.

Produção e Caracterização de Materiais

ESTUDO DAS PROPRIEDADES TERMOLUMINESCENTES DE COMPÓSITOS A BASE DE VIDROS E MICROCRISTAIS PARA APLICAÇÃO EM DOSÍMETROS TERMOLUMINESCENTES

Adolfo Mendonça Barros, Mário Ernesto Giroldo Valério, José Fernandes de Lima
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Com o atual desenvolvimento de inúmeras aplicações das radiações ionizantes, cresce a necessidade de segurança no uso dessas radiações. Os materiais que apresentam o fenômeno da termoluminescência, ou seja, os materiais que emitem luz durante o aquecimento e cuja intensidade luminosa guarda uma relação de proporcionalidade com a dose de radiação que receberam previamente, podem ser utilizados na dosimetria pessoal e ambiental. É objetivo de estudo deste projeto desenvolver uma forma sistemática para a produção de compósitos com vidro e microcristais de calcita a partir de pastilhas conformadas. Foi introduzida neste trabalho, a dopagem da calcita com o íon Nd^{3+} , que é um estudo inovador, pois apesar deste íon ser encontrado em cristais de diversas origens, não há na literatura qualquer referência à dopagem da calcita por REE's (Rare-earth elements). A amostra de $CaCO_3:Nd^{3+}$ é obtida através da precipitação lenta de 100ml de solução de $CaCl_2$ e $NdCl_3$ em 200ml de solução de $(NH_4)_2CO_3$. A amostra é analisada através de microscópio óptico para verificar se as estruturas cristalinas são predominantemente trigonais, ou seja, verificar se o $CaCO_3$ é realmente calcita. Os compósitos foram preparados com uma mistura de vidro e calcita com granulação menor que 45 μm , nas proporções 2:1 em volume e 3:1 em massa. Os pós são misturados e em seguida prensados a aproximadamente 70lbf/pol² de 2 a 3 minutos, obtendo-se pastilhas de 6 mm de diâmetro e 1 mm de espessura. A pastilha é levada ao forno para um tratamento térmico com o objetivo de alcançar a densificação. São estudadas as influências na emissão TL dos compósitos por diferentes parâmetros tais como a concentração relativa de microcristais e vidro, a pressão na fase de conformação das pastilhas, a temperatura e tempo do tratamento térmico usado para densificar as pastilhas e a concentração de dopante nos microcristais ativos.

TERMOLUMINESCÊNCIA DA JADE, PRIMEIRAS ANÁLISES

Cynthia Marques Sousa de Magalhães

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

Adeilson Pessoa de Melo

Escola Técnica Federal de Sergipe

Jade é denominação comum a dois minerais, jadeite e nefrite. Estes minerais foram muito usados pelos nativos da América Central e China como ornamentos e pedras religiosas, sendo considerados minerais semi-preciosos. O mineral utilizado neste trabalho tem composição química provável $\text{NaAlSi}_2\text{O}_6$ (jadeite). Este mineral possui dureza entre 6,5 e 7,0 e na natureza pode ser encontrado nas cores amarela, rosa e verde, entre outras. A pedra utilizada neste trabalho possui coloração verde. Objetivando realizar medidas de termoluminescência com este mineral, primeiramente transformamos a pedra em pó e fizemos medidas do sinal TL da amostra natural. Nesta etapa já foi possível observar um pico TL em, aproximadamente, 250oC. Em seguida, irradiamos a amostra natural com doses diferentes de radiação beta de $\text{Sr}90/\text{Y}90$ e outros picos apareceram. Posteriormente, tratamos a amostra a 400, 500 e 600oC por 1 hora e irradiamos com uma dose de 80 Gy. Verificou-se que a intensidade dos picos TL foi maior para tratamentos térmicos em temperaturas mais altas. Uma outra análise foi feita observando-se a sensibilidade TL da amostra tratada a 400oC a doses de radiação no intervalo entre 13,5 Gy e 1,9 kGy. Para estas amostras, a sensibilidade dos picos TL cresce com a dose, verificando-se a presença de um pico TL em temperatura de aproximadamente 60oC que decai rapidamente. Os resultados mostram que as intensidades dos picos TL deste mineral têm uma forte dependência com a dose da radiação e com os tratamentos térmicos a que as amostras são submetidas.

Resumos dos mini-cursos

MC1

ESPALHAMENTO DE ELÉTRONS E PÓSITRONS POR MOLÉCULAS: DA DESCRIÇÃO DO ALVO À DINÂMICA DE COLISÕES

Marco A. P. Lima

Instituto de Física "Gleb Wataghin", UNICAMP
13083-970, Campinas, São Paulo, Brasil

O objetivo do curso é apresentar uma teoria de colisões quântica capaz de tratar o problema de muitos corpos inerente ao processo de colisões de elétrons (e pósitrons) de baixa energia com moléculas. O conteúdo do curso envolve: (i) apresentar as técnicas utilizadas para a descrição do alvo (método Hartree-Fock, e de Interação de Configurações); (ii) elaborar e resolver o problema quântico do espalhamento de partículas por potenciais (desenvolver a linguagem e apresentar estratégias de solução) e (iii) apresentar detalhadamente o Método Multicanal de Schwinger para o espalhamento de elétrons (e pósitrons) de baixa energia por moléculas. Nossa intenção é que no final do curso o aluno tenha uma boa visão de uma técnica moderna para resolver problemas relativamente complexos de mecânica quântica de colisões. Pré-requisito: noções elementares de mecânica quântica.

MC2

RADIOTERAPIA – SERVIÇOS, EQUIPAMENTOS E FONTES

Divanizia do Nascimento Souza
Departamento de Educação, Universidade Federal de Sergipe

A radioterapia é uma das três principais modalidades de tratamento de câncer. Quase sempre, a possibilidade de preservação do órgão a ser tratado é o principal fator de escolha desta modalidade de tratamento. A história da radioterapia é recente, iniciando-se logo após a descoberta dos raios X em 1895 por Roentgen. O início da radioterapia no Brasil foi em 1901, no Rio Grande do Sul, com a utilização de um aparelho de raios X para tratamento de um tumor de pele. Em meados da década de 50 do século XX foram instaladas as primeiras unidades de cobalto 60 no Brasil, em hospitais do Rio de Janeiro e São Paulo. As atividades de Física Médica no Brasil iniciaram no ano de 1956, quando o serviço de radioterapia do Instituto Nacional do Câncer no Rio de Janeiro contratou o primeiro físico. Neste mesmo ano foram fundados o Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, com a Divisão de Física na Saúde, e a Comissão Nacional de Energia Nuclear. Em 1969 foi criada a Associação Brasileira de Física Médica. O primeiro acelerador linear do Brasil foi instalado em 1972, no Hospital Alemão Oswaldo Cruz, em São Paulo. Atualmente, o principal objetivo dos estudos referentes à radioterapia é o desenvolvimento de técnicas e equipamentos que permitam a liberação de doses altas de radiação no volume a ser tratado, mantendo-se as doses nos tecidos vizinhos em valores tão baixos quanto possível. Com a constante modernização das técnicas e equipamentos utilizados nesta área, tem crescido a necessidade de profissionais especializados, físicos, médicos e técnicos. Os serviços de radioterapia mais modernos dispõem, além de aceleradores lineares e unidades de cobalto, de unidades de braquiterapia de alta taxa de dose e de tomógrafos computadorizados com interface para o planejamento. Estes serviços podem realizar tratamentos radioterápicos de alta complexidade. Neste mini-curso serão apresentados os principais equipamentos, técnicas, normas e unidades utilizados em radioterapia.

MC3

SUPERSIMETRIA

Stoian I. Zlatev

Departamento de Matemática, Universidade Federal de Sergipe

“A proposta da supersimetria é tão bonita, que a Natureza não pode se recusar a aceitá-la.” A supersimetria é a “última simetria”. Ela confunde bósons e férmions, simetrias do espaço – tempo e simetrias, chamadas “internas”. Ao contrário às outras idéias (as simetrias “locais”, chamadas simetrias de gauge, por exemplo), que influenciaram o desenvolvimento da Física Teórica nas últimas décadas, a supersimetria não se baseava em uma matemática já desenvolvida, mas criou sua própria matemática. Pretendemos dar uma introdução aos princípios e alguns conceitos básicos da supersimetria. Como ilustrações usaremos modelos supersimétricos na Mecânica Quântica (não-relativística e

relativística). O programa do mini-curso: (1) Simetrias; (2) Grupos e Álgebras de Lie, (3) Superálgebras, (4) Spinors, (5) Supersimetrias Físicas, (6) Mecânica Quântica Supersimétrica de Partículas.

Autor	Página
A B Yanovski	49
Antônio José J. Santos	33
A. C. F. Conceição	33
A. R. Cestari	33
Adeilson Pessoa de Melo	64
Adolfo Mendonça Barros	65
Alyson Paulo Santos	49
Ana Gardênia S Mangueira	45
André M. C. Souza	40, 41, 42
André Oliveira Silva	50
Antonio C. Hernandez	32
Bento F. Santos Jr	33
C. R. Miranda	33
Christiane Lima Santos	54
Cinthia Marques Sousa de Magalhães	64
Cláudio A. Macedo	26, 37, 38, 39, 41, 42
Clélio B. C. Gomes	39
Cristiano T. de Meneses	36
Divanizia do Nascimento Souza	20, 57, 58, 64, 68
Douglas F. de Albuquerque	23
E. F. S. Vieira	33
Edjane Rocha dos Santos	34
Everton Gomes de Santana	55, 62, 63
Fernando M. P. Chaves	19
Flávio C. Vicentin	18, 36
Francisco A. G. Almeida	37
Frederico Cunha	21
Gilberto Nascimento Santos Filho	48
Jenner Bastos	21
Jomar B. Amaral	43
José Antônio Ferreira Leite	54
José Fernandes Lima	29, 33, 45, 65
José Marcos Sasaki	36
José Osman dos Santos	29
Katiucia da Silva Santana	57
Ledjane S. Barreto	44
Luís E. Almeida	44
Luiz Alberto Terrazos Javier	24
Luiz G. de Azevedo	59
Marcelo A. Macêdo	31, 34, 35, 36
Marcelo L. dos Santos	44
Marcelo P. Guimarães	53
Márcia C. L. Moreira	51
Marco Aurélio P. Lima	17, 67

Marcos A. Couto dos Santos	25,
Marcos Hernani S. Santos	52
Mário Ernesto G. Valério	25, 29, 31, 32, 33, 33, 43, 45, 46, 57, 65
Mário Everaldo de Souza	47
N D Vieira Junior	45
Osmar S. Silva Jr.	50, 51, 52, 53, 59, 61, 63
Paulo Jorge R. Montes	31
Ramires M. Silva	35
Rodrigo de Farias Gomes	38
Ronaldo S. Silva	32
Samuel R. Oliveira Neto	40
Selma Rozane Vieira	22, 60
Sonia L Baldochi	45
Spero P Morato	45
Stoian Zlatev	49, 69
Suzana Arleno Souza Santos	58
Tatiana Santos de Araujo	46
Tiago Nery Ribeiro	58
Tiago Souza Araujo	61
Washington Chagas Filho	23, 48
Zélia S. Macedo	32