

X SEMANA DA FÍSICA AND
VIII SEMANA DE FÍSICA
DOS MATERIAIS

Ciência e Tecnologia Pós - pandemia

Dia 3 a 7 de outubro



UFOP

Universidade Federal
de Ouro Preto

SUMÁRIO:

Comitê Organizador.....	3
Organização.....	4
Programação.....	5
Segunda - 3/10.....	6
Terça - 4/10.....	8
Quarta - 5/10.....	10
Quinta - 6/10.....	11
Sexta - 7/10.....	13
Apresentações Orais.....	14

COMITÊ ORGANIZADOR:

Prof. Dr. Matheus Josué de Souza Matos

Profa. Dra. Ana Paula Moreira Barboza

Prof. Dra. Ive Silvestre de Almeida

Prof. Dr. Hermano Endlich Schneider Velten

Felipe dos Santos Escórcio – Presidente – DAFIS/UFOP

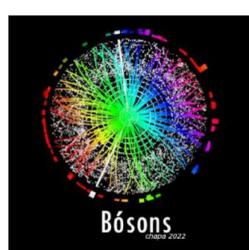
Maria Luísa Rodrigues – Secretária Geral –

DAFIS/UFOP

Altieres Douglas da Silva – Diretor de Eventos –

DAFIS/UFOP

apoio:



ORGANIZAÇÃO:

Diretório Acadêmico da Física (DAFIS):

Felipe dos Santos Escórcio – Presidente

Victória Portella – Vice-Presidente

Maria Luísa Rodrigues – Secretária Geral

Vinícius Alessandro Silva Queiroz – Tesoureiro

Gisele de Almeida – Diretora de Assuntos Estudantis

Altieres Douglas da Silva – Diretor de Organização de
Eventos

Wilcker Cesar Silva Oliveira – Diretor de Marketing e
Propaganda



PROGRAMAÇÃO

HORÁRIO	SEGUNDA 3/10	TERÇA 4/10	QUARTA 5/10	QUINTA 6/10	SEXTA 8/10
9:00 - 9:50	ABERTURA	PALESTRA 5	PALESTRA 8	PALESTRA 11	PALESTRA 14
10:00 - 10:50	PALESTRA 1	PALESTRA 6	PALESTRA 9	PALESTRA 12	PALESTRA 15
11:00 - 11:50	PALESTRA 2	PALESTRA 7	PALESTRA 10	PALESTRA 13	PALESTRA 16
11:50 - 13:30	ALMOÇO	ALMOÇO	ALMOÇO	ALMOÇO	ALMOÇO
13:30 - 14:20	PALESTRA 3	MESA REDONDA	OFICINA PET	MINICURSO 2	APRESENTAÇÃO ORAL
14:30 - 15:20	PALESTRA 4	MESA REDONDA	OFICINA PET	MINICURSO 2	APRESENTAÇÃO ORAL
15:30 - 16:00	COFFEE BREAK	COFFEE BREAK	COFFEE BREAK	COFFEE BREAK	
16:00 - 17:40	MINICURSO 1	MINICURSO 1	OFICINA PET	MINICURSO 2	
17:40 - 18:00	APRESENTAÇÃO ORAL	APRESENTAÇÃO ORAL	APRESENTAÇÃO ORAL	APRESENTAÇÃO ORAL	

Segunda - 3/10

Abertura

Prof. Dr. Hermano Velten &
Prof.Dr. Marcos Moraes Calazans (UFOP)

Auditório Raquel do Pilar

Palestra 1

Prof. Dr. Rodrigo Bianchi (UFOP)

Caracterização Elétrica de Sistemas Sólidos Desordenados.

Auditório Raquel do Pilar

Palestra 2

Dra. Bonnie Zaire (UFMG)

Observações de campos magnéticos em estrelas de baixa massa

Auditório Raquel do Pilar

ALMOÇO



Palestra 3

Prof. Dr. Marcos Moraes Calazans

A formação dos conceitos científicos no pensamento: porque aprender física nos faz humanos?

Auditório Raquel do Pilar

Palestra 4

Prof. Dr. Giovanni Decot Galgano (UFOP)

Peles e Pratos "mudos", uma Alternativa Saudável para a Prática de Bateria

Auditório Raquel do Pilar

COFFEE BREAK

Hall do Auditório Belarmino Dimas

Minicurso 1

Prof. Dr. Edson José de Carvalho

Holografia

Auditório Raquel do Pilar

Terça - 4/10

Palestra 5

Profa. Dra. Michele Hidemi (UFOP)

O Ensino por Investigação como Metodologia no Ensino de Física

Auditório Raquel do Pilar

Palestra 6

Profa. Dra. Elisangela Silva (IFMG/OP)

Microscopia de Varredura por Sonda

Auditório Raquel do Pilar

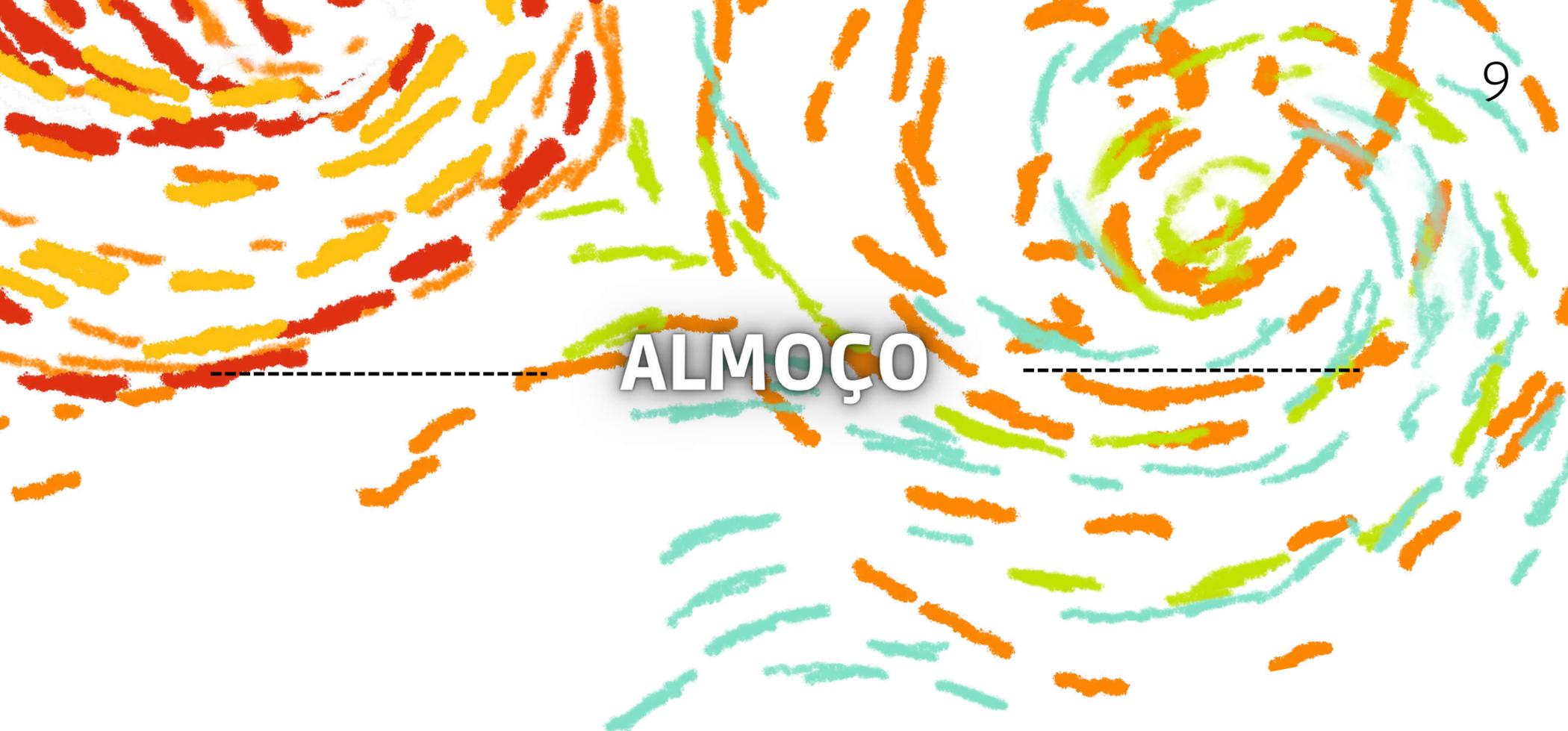
Palestra 7

Prof. Dr. Hermano Velten (UFOP)

A cosmologia do século XXI

Auditório Raquel do Pilar





ALMOÇO

Mesa Redonda

Prof. Dr. Alcides Castro e Silva &
Prof.Dr. Américo Tristão Bernades.

Ciência e Tecnologia Pós- Pandemia

Auditório Raquel do Pilar

COFFEE BREAK

Hall do Auditório Belarmino Dimas

Minicurso 1

Prof. Dr. Edson José de Carvalho

Holografia

Laboratório 4 - ICEB 1

Quarta - 5/10

Palestra 8

Profa. Dra. Bruna Postacchini (UFOP)

A Física das cores!

Auditório Raquel do Pilar

Palestra 9

Prof. Dr. Rogerio Paniago (UFMG)

Tecnologia de Células Solares

Auditório Raquel do Pilar

Palestra 10

Profa. Dra. Maria Eugênia (UFOP)

Introdução a Dinâmica de Spins

Auditório Raquel do Pilar

ALMOÇO

Oficina PET

Telescópios

Laboratório 4 - ICEB I

COFFEE BREAK

Hall do Auditório Belarmino Dimas

Quinta - 6/10

Palestra 11

Prof. Dr. Mario Mazzoni (UFMG)

Elétrons em nanoestruturas e propriedades de nanomateriais

Auditório Raquel do Pilar

Palestra 12

Prof. Dr. Thiago Cazati

A pesquisa Científica na UFOP e as oportunidades aos Estudantes

Auditório Raquel do Pilar

Palestra 13

Profa. Dra. Jaqueline dos Santos Soares

Revestimentos de hidroxiapatita com incorporação de nanoestruturas para aplicações biomédicas"

Auditório Raquel do Pilar

ALMOÇO



Minicurso 2

Prof. Dr. Carlos Felipe S. Pinheiro.

Introdução ao LaTeX

Labest II (Sala 1-04) no ICEB III

COFFEE BREAK

Hall do Auditório Belarmino Dimas

Minicurso 2

Prof. Dr. Carlos Felipe S. Pinheiro.

Introdução ao LaTeX

Labest II (Sala 1-04) no ICEB III

Sexta - 7/10

Palestra 14

Prof. Dr. Guilherme da Silva Lima

"Uma crítica sobre a apropriação social da cultura científica"

Auditório Raquel do Pilar

Palestra 15

Prof. Dr. Thiago Escobar Colla

Agregação de nanopartículas poliméricas induzidas por um campo elétrico alternado.

Auditório Raquel do Pilar

Palestra 16

Prof. Dr. Sérgio M. Rezende (UFPE)

A Ciência no Brasil

Auditório Raquel do Pilar



ALMOÇO

Segunda - 3/10

Estudo de DFT e TDDFT da Estrutura Eletrônica, Molecular e de Espectros Vibracionais E UVvis de Complexos de β -Dicetonato de Difluoroboro FlavanonaCARVALHO, Gabriel¹ ; NEME, Natália²; MATOS, Matheus J. S.¹¹Departamento de Física, Universidade Federal de Ouro Preto (UFOP), Ouro Preto, MG, Brasil.²Zernike Institute for Advanced Materials and Stratingh Institute for Chemistry, University of Groningen, Nijenborgh 4, 9747 AG Groningen, The Netherlands.**RESUMO:**

O estudo de moléculas orgânicas em Ciência dos Materiais tem se tornado cada vez mais importante no desenvolvimento de novos materiais para nanodispositivos. Complexos derivados de boro como BODIPY e Difluoroboro β -dicetonato (BF₂- β -dicetonato) [1] exibem fortes características fotofísicas como luminescência e fluorescência em solução e altos coeficientes molares [2]. Eles podem ajudar no desenvolvimento de células solares, sensores biológicos e dispositivos optoeletrônicos [2]. Os estudos sobre suas características visam implementar tecnologias baseadas em compostos orgânicos. Neste trabalho realizamos a caracterização teórica de uma família de moléculas de β -dicetonato de flavanona de difluoroboro chamados 4a-i para determinar as propriedades do estado fundamental e excitado usando a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) [3] e sua extensão dependente do tempo (TD-DFT) [4] implementada no programa ORCA [5,6] com o funcional híbrido B3LYP [7,8]. Os cálculos realizados consideraram a fase gasosa e também o modelo de solvatação CPCM [9] para caracterizar o sistema sob os efeitos de diferentes solventes implícitos. De acordo com dados experimentais, foi observado um gap de energia na faixa de 2.88-3.07eV para as moléculas 4a à 4i. Usando a abordagem DFT/B3LYP foi encontrado um gap de energia para as moléculas de 4a-i de 3.56-3.77eV. Usando o TD-DFT para estimar o gap de energia os resultados (3.16-3.30eV) estão mais próximos dos valores experimentais do que a abordagem DFT. Nossos resultados revelam que os grupos substituintes nas moléculas e os diferentes solventes podem ser usados para modular as propriedades fotofísicas dos complexos e seu gap de energia.

REFERÊNCIAS

- [1] G. MORGAN, R. TUNSTALL, J CHEM. SOC.,1920, 117, 1456-1465.
- [2] PAEZ, E. B. A. ET AL. NEW J. CHEM., V. 44, N. 34, P. 14615-14631, 2020.
- [3] HOHENBERG P., KOHN W. PHYS. REV. 136, B864 (1964); KOHN, W., & SHAM, L. J. (1965). PHYS. REV. 140(4A), A1133.
- [4] RUNGE, ERICH AND EBERHARD KU GROSS: PHYS. REV. LETTERS, 52(12):997, 1984.
- [5] F. NEESE. COMPUT. MOL. SCI., 2(1):73–78, 2012.
- [6] F NEESE. WILEY INTERDISCIP. REV.: COMPUT. MOL. SCI., 2012.
- [7] AD BECKE, J.CHEM.PHYS. 98 (1993) 5648-5652
- [8] C. LEE, W. YANG, RG PARR, PHYS. REV. B 37 (1988) 785-789
- [9] B. VINCENZO, C. MAURIZIO. J. PHYS. CHEM. A 102.11 (1998):1995-2001.

Terça - 4/10

Estudo Teórico Experimental de Nanocamadas de Antimônio

JAMMAL, Nathany Ferreira¹, ARAÚJO, Fernando Gabriel¹, NEVES, Bernardo R. A.

BARBOZA, Ana Paula Moreira¹, MAZZONI, Mario Sergio de Carvalho²

¹Departamento de Física, Universidade Federal de Ouro Preto, UFOP, Ouro Preto, MG, Brasil

²Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais, UFMG, Belo Horizonte, MG, Brasil

RESUMO

Novos semicondutores 2D, como arseneno (As) e antimoneno (Sb), com novas propriedades e alta estabilidade foram previstos por cálculos de primeiros princípios. Utilizando a teoria do funcional da densidade (DFT) demonstrou-se que eles se tornam semicondutores de gap indireto de 2,49eV e 2,28eV respectivamente, no limite de monocamada [1]. Neste trabalho serão apresentados resultados teóricos e experimentais, sobre camadas de antimônio, obtidas por esfoliação mecânica. Técnicas de Microscopia de Varredura por Sonda (SPM) foram utilizadas para analisar os flocos mecânica e eletricamente. Medidas de Microscopia de Força Elétrica (EFM) foram utilizadas para detectar variações nas respostas à polarização dos flocos ao campo elétrico aplicado pela ponta. Além disso, notamos que a aplicação simultânea de campo elétrico e força, pode levar a cortes nos flocos por simples varredura com a ponta [2]. Um resultado interessante foi que, além de injetar carga, observamos que a ponta foi capaz de perfurar o floco com forças relativamente baixas. Além disso, investigamos, também usando DFT, a interação de monocamadas de Sb com moléculas de água, com particular interesse nos efeitos de pressão. Os resultados teóricos podem ser comparados com experimentos típicos de SPM.

REFERÊNCIAS:

[1] F. ZAMORA, G. F. ET. AL. RECENT PROGRESS ON ANTIMONENE: A NEW BIDIMENSIONAL MATERIAL, *ADVANCED MATERIALS*, 30, 170377, (2018).

[2] BARBOZA, A. P. M., ET AL. DEFORMATION INDUCED SEMICONDUCTOR-METAL TRANSITION IN SINGLE WALL CARBON NANOTUBES PROBED BY ELECTRIC FORCE MICROSCOPY, *PHYSICAL REVIEW LETTERS.*, 100, 256804. (2008).

Quarta - 5/10

Uma Abordagem Alternativa para Transferir Grafeno usando Nanocelulose

SOUZA, WFLANDER MARTINS DE¹; PAULA, RENATA MARIA DE^{2,3}, ARAUJO, FERNANDO GABRIEL DA SILVA², NEVES, BERNARDO RUEGGER ALMEIDA⁴, BOAVENTURA, RENATO VELOSO AMARAL⁴, JESUS, THIAGO HENRIQUE RODRIGUES DA⁵, SILVA, CLÁUDIO LAUDARES PASSOS⁵, SILVESTRE, IVE², BARBOZA, ANA PAULA MOREIRA²

¹REDEMAT, UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO (UFOP), OURO PRETO, MG, BRASIL

²DEPARTAMENTO DE FÍSICA, UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO (UFOP), OURO PRETO, MG, BRASIL

³SETOR AGRIMENSURA, INSTITUTO FEDERAL DO SUL DE MINAS (IFSULDEMINAS), INCONFIDENTES, MG, BRASIL

⁴DEPARTAMENTO DE FÍSICA, UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS (UFMG) BELO HORIZONTE, MG, BRASIL

⁵CENTRO DE TECNOLOGIA EM NANOMATERIAIS E GRAFENO, UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS (UFMG) BELO HORIZONTE, MG, BRASIL

RESUMO

Os materiais 2D têm sido objeto de intensa pesquisa nos últimos anos. Desde a descoberta do grafeno, em 2004, houve uma intensa pesquisa de suas propriedades o que despertou interesse em diferentes áreas e aplicações. Filmes de grafeno podem ser produzidos por uma variedade de métodos, que incluem esfoliação mecânica [1] ou crescimento epitaxial [2], por exemplo, ambos com vantagens e desvantagens. Entretanto, o método mais comum usado para produzir grafeno em grandes áreas é através da técnica de deposição química de vapor (CVD) [3]. Nesse caso, o grafeno CVD precisa ser transferido da folha de cobre para um “substrato oficial de trabalho” e a qualidade (limpeza) da transferência é crucial para obter amostras que possam ser processadas posteriormente. Os métodos tradicionais de transferência usam, principalmente, PMMA - poli(metacrilato de metila) como suporte mecânico para o grafeno. Neste trabalho, mostramos resultados preliminares de uma nova abordagem, na qual usamos um filme de nanocelulose, como suporte mecânico para o grafeno. A celulose é um polímero abundante, biodegradável, barato e compatível com muitos materiais, o que a torna promissora para substituir o PMMA nesse processamento. Usamos técnicas de Microscopia de Varredura por Sonda e Espectroscopia Raman para analisar os flocos transferidos. Os resultados preliminares mostram que este método alternativo pode ser útil em futuros desenvolvimentos para novas tecnologias de grafeno.

REFERÊNCIAS

- [1] NOVOSELOV, K.S.; GEIM, A.K.; MOROZOV, S.V.; JIANG, D.; ZHANG, Y.; DUBONOS, S.V.; GRIGORIEVA, I.V.; FIRSOV, A.A., Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*;306(5696): 666-9 (2004).
- [2] GAO, M.; PAN, Y.; HUANG, L.; HU, H.; ZHANG, L. Z.; GUO, H. M.; DU, S. X.; GAO, H. J., “Epitaxial growth and structural property of graphene on Pt (111)”. *Appl. Phys. Lett.* 98, 033101 (2011).
- [3] ZHANG, Y.; ZHANG, L.; ZHOU, C., Review of Chemical Vapor Deposition of Graphene and Related Applications. *Acc. Chem. Res.*, 46, pp.2329-2339 (2013)
-

Quinta - 6/10

Análise de líquidos iônicos usando DFT clássico, no contexto de fortes correlações em interfaces capacitivas.

BRAGA, Otavio¹; COLLA, Thiago²

¹Departamento de Física, Universidade Federal de Ouro Preto (UFOP), Ouro preto, MG, Brasil

²Departamento de Física, Universidade Federal de Ouro Preto (UFOP), Ouro preto, MG, Brasil

23

RESUMO

Aplicando os conceitos teóricos de eletromagnetismo, mecânica quântica e física estatística, podemos confinar teoricamente um líquido iônico em superfícies planas. Nesse contexto de interfaces e líquidos iônicos é possível aplicar cadeias iônicas (Oligoméricas ou não), redes, interações, dinâmica, relações de correlação, termodinâmica, campo médio, interação de muitos corpos, enfim, existem grandes quantidades de modelos que podemos simular e prever comportamentos. Desta maneira nesse encontro quero trazer um trabalho qualitativo analisando o comportamento iônico em interfaces capacitivas.

Um conjunto de átomos forma uma molécula e os átomos podem perder e ou ganhar elétrons, formando íons, os íons podem ser positivos e ou negativos, a solvatação influencia o tamanho dessas moléculas, logo a instabilidade é alta, o estado atual é líquido e ou gasoso, a densidade vai diminuindo ou aumentando à medida que adentramos no bulk da solução, como resultado, a blindagem existente diminuirá ou aumentará com a distância entre as placas e a capacitância terá comportamentos similares, as correlações eletrostáticas ditam a quantidade de carga armazenada no bulk, os íons se hidratarão, crescerão em tamanho, terão efeitos parecidos com coloides, vão se comprimir mas não podem ocupar um mesmo espaço, sofrem difusão, os elétrons livres se organizarão, formando pontes, camadas duplas, estabilizando assim as placas do eletrodo enquanto potencial elétrico é aplicado, é caótico, é surpreendente.

O comportamento dos íons é muito desconhecido, e a tecnologia em torno de células de carga, baterias e capacitores é de extrema urgência tecnológica, usando um ensemble Grand-Canonical, é possível comprovar comportamentos de curvas que chamamos de (bell) e (camel) para diversas teorias, entre elas, Gouy-Chapman, Poisson-Boltzmann e Poisson-Fermi, DFT Clássica, entre outros modelos. Utilizando de ferramentas matemáticas como MSA, FMT, “root finder”, transformadas rápidas de Fourier, equações lineares de segunda ordem é possível descrever com determinada precisão o comportamento qualitativo em torno da quantidade de íons.

REFERÊNCIAS

- [1] T. Colla and Y. Levin. “Lattice Model of an Ionic Liquid at an Electrified Interface”. *Journal of Phy* 2019, 151 (18) , 184105.
- [2] A. Kornyshev and M. Fedorov. “Ionic Liquids at Electrified Interfaces”. *Rev. Chem Chem. Rev.* 2014, 114, 5, 2978–3036
- [3] M. Z. Bazant, B. D. Storey, and A. A. Kornyshev. “Double layer in ionic liquids: Overscreening versus crowding” *Revista Physical Review Letters*. vol. 145, pp. 1–13, 2011.

Sexta - 7/10

Politrópas Anisotrópicas Quânticas

TRINDADE, NADSON²; VELTEN, HERMANO²

¹Departamento de Física, Universidade Federal de Ouro Preto, UFOP, Ouro Preto, MG, Brasil

²Departamento de Física, Universidade Federal de Ouro Preto, UFOP, Ouro Preto, MG, Brasil

RESUMO

A mecânica quântica de De Broglie-Bohm estabelecer uma conexão entre a Mecânica Quântica não Relativística com o movimento de uma partícula em Dinâmica dos Fluidos. Sabemos que para um fluido que obedece ao princípio de Pascal (tensões principais iguais), pressão é tida como isotrópica. Mas devido à grande diversidade de eventos físicos que dão origem a anisotropia, esse desvio de isotropia local pode acontecer tanto em regimes de baixa densidade com em alta densidade. Neste trabalho iremos falar a respeito de um objeto que estamos construindo chamado de Politrópas Anisotrópica Quântica que possui uma configuração possivelmente nova e nos permitirá estudar suas propriedades físicas.

REFERÊNCIAS:

- [1] G. ABELLAN, ERNESTO FUENMAYOR DI PRISCO, AND L. HERRERA. THE DOUBLE POLYTROPE FOR ANISOTROPIC MATTER: NEWTONIAN CASE. PHYSICAL REVIEW D, 04 2020.
- [2] L. HERRERA AND W BARRETO. GENERAL RELATIVISTIC POLYTROPES FOR ANISOTROPIC MATTER: THE GENERAL FORMALISM AND APPLICATIONS. PHYSICAL REVIEW D, 88(8):084022, 2013.
- [3] SELÇUK Ş BAYIN. ANISOTROPIC FLUID SPHERES IN GENERAL RELATIVITY. PHYSICAL REVIEW D, 26(6):1262, 1982.
- [4] L. HERRERA AND W. BARRETO. NEWTONIAN POLYTROPES FOR ANISOTROPIC MATTER: GENERAL FRAMEWORK AND APPLICATIONS. PHYS. REV. D, 87:087303, APR 2013.
- [5] JEREMY HEYL, MATTHEW W CHOPTUIK, AND DAVID SHINKARUK. MODIFIED SCHRÖDINGER-POISSON EQUATION: QUANTUM POLYTROPES. PHYSICAL REVIEW D, 96(10):103010, 2017.

Estudo de Superfícies Superhidrofóbicas por Microscopia de Varredura por Sonda. Aplicações na Caracterização de Nanomateriais 2D

SILVA, Gisele¹; VIANA, Guilherme²; SOARES, Rafael³; NEVES, Bernardo³; PINTO, Elisângela²; PRADO, Mariana¹

¹Departamento de Física, Universidade Federal de Ouro Preto (UFOP), Ouro Preto, MG, Brasil

²Campus Ouro Preto, Instituto Federal de Minas Gerais (IFMG), Ouro Preto, MG, Brasil

³Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), Belo Horizonte, MG, Brasil

RESUMO:

Com a crescente busca e necessidade da sociedade por novas tecnologias, a natureza com sua capacidade adaptativa tornou-se uma fonte de inspiração para o desenvolvimento de novos materiais, a biomimética. Há seres vivos que desenvolveram estruturas autolimpantes que repelem a água [1], as superfícies superhidrofóbicas. A folha de lótus (*Nelumbo nucifera*) foi uma das primeiras superfícies superhidrofóbicas a ser estudada e foi possível identificar que as micros e nanoestruturas da superfície possuem uma importância crucial para sua propriedade superhidrofóbica.

O valor do ângulo de contato da água com uma determinada superfície classifica a sua molhabilidade [2]. Partindo da importância desta categorização foram identificados referenciais na literatura que serviram de inspiração para o desenvolvimento de um aparato experimental home-made empregado na investigação da hidrofobicidade de asas de cigarras e de libélula e amostras feitas por litografia. Compreendendo a relevância das estruturas hierarquia para a propriedade superhidrofóbica de algumas superfícies, usou-se da técnica de Microscopia de Força Atômica (AFM), que permite obter imagens da topografia da amostra analisada com altíssima resolução, para o estudo de sua morfologia.

Após caracterização da morfologia e do ângulo de contato da água com as asas, pretende-se utilizá-las para produção de superfícies poliméricas que com nanoporos e nano pilares conforme metodologia proposta por Faria [3]. Essas superfícies são úteis para a realização de testes mecânicos em nanomateriais bidimensionais pois permitem que a sonda utilizada na AFM possa realizar testes de aplicação de força nos flocos depositados sobre os poros. Dessa forma, é possível obter propriedades mecânicas dos materiais na nanoescala. Os poros obtidos por essa técnica têm tamanho ideal para a realização dos testes nanomecânicos em flocos pequenos, como os obtidos por esfoliação em fase líquida.

REFERÊNCIAS

- [1] CELIA, E.; DARMANIN, T. ET AL. RECENT ADVANCES IN DESIGNING SUPERHYDROPHOBIC SURFACES. JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE 402, 1-18 (2013).
- [2] SETHI, S. K.; MANIK, G. RECENT PROGRESS IN SUPER HYDROPHOBIC/HYDROPHILIC SELF-CLEANING SURFACES FOR VARIOUS INDUSTRIAL APPLICATIONS: A REVIEW. POLYMER-PLASTICS TECHNOLOGY AND ENGINEERING 57, 1932-1952 (2018).
- [3] FARIA, A. M. A. FABRICAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO TOPOGRÁFICA DE NANOPOROS E NANOPOSTES DE POLIANILINA OBTIDOS PELA TÉCNICA DE LITOGRAFIA POR NANOIMPRESSÃO VIA CARIMBO REPLICADOR. DISSERTAÇÃO (MESTRADO EM CIÊNCIAS – FÍSICA DE MATERIAIS, UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO) OURO PRETO, 2016.

Caracterização das Propriedades Mecânicas da Celulose Utilizando Dinâmica Molecular

RUAS, Bethina R.¹; de Oliveira, Alan B.¹; MATOS, Matheus J. S.¹

¹Departamento de Física, Universidade Federal de Ouro Preto, UFOP, Ouro Preto, MG, Brasil

RESUMO

A caracterização de materiais 2D (bidimensionais) é de suma importância não só para a ciência de materiais, bem como para suas aplicações na sociedade. É de se esperar que, para um material orgânico, versátil e renovável como a celulose, isso não seria diferente. As aplicações conhecidas desse material são diversas: é usada na produção de papel, fibras de tecido, comidas veterinárias, indústria farmacêutica e de cosméticos, biomedicina, entre outros. Por isso, é importante estudar suas propriedades físicas e características mecânicas, com atenção especial para seu módulo de Young e como ele pode influenciar nas diferentes aplicações da celulose, além de sua interação com materiais 2D, como grafeno e líquidos, que pode alterar as suas propriedades mecânicas. A celulose é o polímero mais abundante da natureza. É um polissacarídeo de diferentes estruturas cristalinas I- α , I- β , II e III. Sendo assim, o projeto em questão visa estudar, utilizando dinâmica molecular (DM) clássica e por meio do programa LAMMPS [1], as propriedades mecânicas da celulose analisando, principalmente, como o módulo de Young se relaciona com sua estrutura. Escolheu-se a celulose do tipo I- β , e uma superfície que fica exposta como na madeira. As geometrias foram geradas pelo programa Cellulose-Builder [2]. As simulações de DM foram realizadas no ensemble NVT e NPT, usando o algoritmo de Verlet com um timestep de 0.001 fs.

REFERÊNCIAS

- [1] STEVE PLIMPTON. FAST PARALLEL ALGORITHMS FOR SHORT-RANGE MOLECULAR DYNAMICS. JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS, 117, 1-19 (1995).
- [2] THIAGO CF GOMES AND MUNIR S SKAF. CELLULOSE-BUILDER: A TOOLKIT FOR BUILDING CRYSTALLINE STRUCTURES OF CELLULOSE. JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY, 33, 1338–1346 (2012).
- [3] KIMBERLY CHENOWETH, ADRI C. T. VAN DUIN, AND WILLIAM A. GODDARD, REAXFF REACTIVE FORCE FIELD FOR MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS OF HYDROCARBON OXIDATION, THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 112, 1040-1053 (2008)
- [4] WU, X., MOON, R.]. & MARTINI, A. CRYSTALLINE CELLULOSE ELASTIC MODULUS PREDICTED BY ATOMISTIC MODELS OF UNIFORM DEFORMATION AND NANOSCALE INDENTATION. CELLULOSE 20, 43–55 (2013).

Microtubo de Fibra Vegetal Revestida com Polímero Condutivo para Sensoriamento de Amônia

Souza, Mariana Tainná Silva¹; FERREIRA, Giovana Ribeiro²; BIANCHI, Rodrigo Fernando¹

¹Departamento de Física, Universidade Federal de Ouro Preto (UFOP), Ouro Preto, MG, Brasil

²Instituto de Engenharia, Ciência e Tecnologia, Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri (UFVJM), Janaúba, MG, Brasil

RESUMO

O interesse crescente pelo desenvolvimento sustentável tem aumentado a busca por matérias primas naturais, alternativas, para o desenvolvimento de materiais tecnológicos de alto valor agregado [1-5]. Esse é o caso, por exemplo, do uso de fibras vegetais como elemento ativo em dispositivos eletrônicos. Contudo, ainda há poucas evidências da aplicação de tais fibras nessa área. Este trabalho tem por objetivo empregar a fibra de Janaúba (*Calotropis Procera*) recoberta com polianilina (PANI) como elemento ativo de sensoriamento de gás de amônia. Para atingir esse objetivo está sendo realizada a deposição da PANI via polimerização *in situ* nas fibras de Janaúba, virgens e tratadas física e/ou quimicamente, formando, assim, o compósito FVJs/PANI. As fibras recobertas estão sendo caracterizadas por microscopia óptica, espectroscopia no infravermelho (FTIR), molhabilidade, ensaios de adesão do filme polimérico e de resistência mecânica das fibras. Os resultados mostram que os tratamentos com acetona e álcool à quente, com água régia diluída e pelo método RCA promovem alterações na superfície das fibras proporcionando, assim, a deposição de uma camada polimérica homogênea e aderida mais fortemente à fibra em comparação com a deposição no material não tratado.

Por outro lado, os tratamentos químicos aumentaram significativamente a fragilidade das fibras, com a remoção/degradação de moléculas de celulose, hemicelulose e lignina, conforme resultados de FTIR. Além disso, tais resultados apontam a remoção das ceras vegetais, justificando a melhora da deposição e adesão do filme polimérico. Os testes de microscopia e molhabilidade confirmaram a modificação das superfícies externas e internas pela PANI, e as medidas elétricas realizadas na ausência e presença do gás amônia confirmaram a aplicabilidade dos compósitos no sensoriamento desse gás. Até o momento, foi possível adsorver a superfície das fibras com PANI, obtendo, microtubos ocos com superfície externa condutora, sensíveis ao gás amônia.

REFERÊNCIAS

- [1] VINOD, A., et al. Renewable and sustainable biobased materials: An assessment on biofibers, biofilms, biopolymers and biocomposites. *J. Clean. Prod.* 258, 120978 (2020).
- [2] COIMBRA, D.B.; OLIVEIRA, F. C. Motivação e condicionantes para a gestão ambiental nas maiores indústrias exportadoras do estado do Ceará. *Cadernos Ebape*, 2005.
- [3] DE CASTRO GONÇALVES, F. A. et al., Fibras Vegetais: Aspectos Gerais, Aproveitamento, Inovação Tecnológica e uso em Compósitos. *Revista Espacios*, 39, 12-28 (2018).
- [4] KARIMAH, A., et al. A review on natural fibers for development of eco-friendly bio-composite: Characteristics, and utilizations. *J. Mater. Res. Technol* 13, 2442–2458 (2021).
- [5] MADHU, P., et al. Effect of various chemical treatments of *Prosopis juliflora* fibers as composite reinforcement: Physicochemical, thermal, mechanical, and morphological properties. *J. Nat. Fibers* 17, 833–844 (2020).

GRAVITAÇÃO NEWTONIANA À G VARIÁVEL

ESCORCIO, Felipe¹; TONIATO, J. D.²

1. Departamento de Física, Universidade Federal de Ouro Preto (UFOP), Ouro Preto, MG, Brasil

2. Departamento de Física, Universidade Federal do Espírito Santo (UFES), Vitória, ES, Brasil

RESUMO

Teorias alternativas da gravitação que preveem um acoplamento gravitacional variável são bastante comuns. No entanto, não existe contrapartida para essa propriedade na gravitação newtoniana. Recentemente, foi proposto um modelo newtoniano para a gravitação baseado na lagrangiana da teoria de Brans-Dicke, o que nos permite obter, ao invés de uma constante gravitacional G , uma variável dependente de um campo escalar. Neste trabalho, mostraremos que o referido modelo introduz um termo de correção na força gravitacional newtoniana e utilizaremos os dados observacionais do avanço do periélio orbital de Mercúrio para vincular o único parâmetro livre existente na teoria.

REFERÊNCIAS

[1] FABRIS, J. C.; TONIATO, J. D.; VELTEN, H. Gravitação. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2021.

[2] FABRIS, J. C.; GOMES, T.; TONIATO, J. D.; VELTEN, H. Newtonian-like gravity with variable g . Eur. Phys. J. Plus, v. 136, n. 2, p. 143, 2021.

[3] PARK, R. S.; FOLKNER, W. M.; KONOPLIV, A. S.; WILLIAMS, J. G.; SMITH, D. E.; ZUBER, M. T. Precession of mercury's perihelion from ranging to the MESSENGER Spacecraft. The Astronomical Journal, v. 153, n. 3, p. 121, feb 2017.

[4] LUCCHESI, D. M.; PERON, R. Accurate measurement in the field of the earth of the general-relativistic precession of the Lageos II pericenter and new constraints on non-newtonian gravity. Physical Review Letters, Woodbury, v. 105, n. 23, Nov 2010.

SENSOR POLIMÉRICO EM SUBSTRATO DE PAPEL PARA MONITORAMENTO DE RADIAÇÃO UVC (222 nm)

¹DUARTE. Lauro de Assis J. ¹BIANCHI. Rodrigo Fernando. ¹DA SILVA. André Talvani Pedrosa

¹Universidade Federal de Ouro Preto. UFOP

RESUMO

Os sistemas de desinfecção por luz ultravioleta (UV) têm sido cada vez mais utilizados em ambientes de saúde para minimizar a transmissão de patógenos e prevenir, assim, infecções associadas ao ambiente hospitalar. Estudos recentes relatam que a radiação UVC em 222 nm tem se mostrado uma alternativa de baixo custo para, por exemplo, inativação de vírus em ambientes cirúrgicos, tais como os vírus da influenza H1N1 e do SARS-CoV-2. Por se tratar de uma tecnologia de empregabilidade relativamente nova, faz-se necessário, portanto, o desenvolvimento de sistemas, tais como dosímetros, para monitorar e, conseqüentemente, garantir os processos de radiação UVC de forma eficiente e segura. Neste trabalho são apresentados o desenvolvimento e a caracterização ótica de um novo dosímetro colorimétrico flexível e polimérico para monitoramento da radiação UVC na região de 222 nm. Para tanto, foram utilizados o papel como substrato flexível, que absorve a radiação UVC com emissão na faixa de 400-550 nm (pico 450 nm), recoberto, por sua vez, com uma ou mais camadas de poli(2-metoxi,5-etil(2hexiloxi)p-fenilenovinileno) (MEH-PPV), um polímero luminescente sensível a radiação visível, que absorve na faixa de 400-500 nm (pico 500 nm), e apresenta emissão na faixa do laranja-vermelho 500-750 nm (pico 600 nm).

Os resultados prévios mostram que o dosímetro fabricados apresenta mudança de cor do vermelho ao branco, enquanto sua emissão cai do vermelho ao amarelo e, finalmente, azul claro à medida que o sistema é exposto à UVC. A alteração na escala vermelho-amarelo-branco selo laranja é característica do processo de fotodegradação do MEH-PPV excitado pela emissão do papel. Já a cor final em azul claro é característica da emissão do papel. A velocidade de tais mudanças é inversamente proporcional ao número de camadas de MEH-PPV, e diretamente proporcional a radiância utilizada. Tais resultados são promissores para o desenvolvimento de dosímetros com tempo de resposta (ou dose administrada) específico para uma dada aplicação tecnológica, cujo monitoramento da radiância, ou dose administrada de radiação, é relevante. Como próximos passos pretende-se estabelecer os mecanismos que levam as mudanças de cor e emissão do dosímetro, bem como o desenvolvimento do design e do acompanhamento do tempo de resposta desse dispositivo como função da dose administrada de UVC em 222 nm.

REFERÊNCIAS

- DOLL, MICHELLE ET AL. TOUCHLESS TECHNOLOGIES FOR DECONTAMINATION IN THE HOSPITAL: A REVIEW OF HYDROGEN PEROXIDE AND UV DEVICES. CURRENT INFECTIOUS DISEASE REPORTS, V. 17, N. 9, P. 1-11, 2015.
- DOS SANTOS, TAMIRES; DE CASTRO, LÍVIA FURQUIM. EVALUATION OF A PORTABLE ULTRAVIOLET C (UV-C) DEVICE FOR HOSPITAL SURFACE DECONTAMINATION. PHOTODIAGNOSIS AND PHOTODYNAMIC THERAPY, V. 33, P. 102161, 2021.
- HESSLING, MARTIN ET AL. THE IMPACT OF FAR-UVC RADIATION (200–230 NM) ON PATHOGENS, CELLS, SKIN, AND EYES—A COLLECTION AND ANALYSIS OF A HUNDRED YEARS OF DATA. GMS HYGIENE AND INFECTION CONTROL, V. 16, 2021.
- KAIKI, YUKI ET AL. METHICILLIN-RESISTANT STAPHYLOCOCCUS AUREUS CONTAMINATION OF HOSPITAL-USE-ONLY MOBILE PHONES AND EFFICACY OF 222-NM ULTRAVIOLET DISINFECTION. AMERICAN JOURNAL OF INFECTION CONTROL, V. 49, N. 6, P. 800-803, 2021.



UFOP

Universidade Federal
de Ouro Preto