

# PFI/UEM

**25 anos de contribuição  
para a ciência**

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ

07 a 10 de novembro, 2023

[WWW.PFI.UEM.BR/25ANOS](http://WWW.PFI.UEM.BR/25ANOS)



Departamento  
de Física

SETI  
PR.GOV.BR



ANAIS DE EVENTO



## **PFI/UEM – 25 anos de contribuição para a ciência**

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ

Direitos exclusivos para (2023) Programa de Pós-Graduação em Física – Universidade Estadual de Maringá (PFI/UEM)

Reservados todos os direitos.

**ISBN 978-65-272-0152-6**

Para requisição de permissão, entre em contato com o Programa de Pós-Graduação em Física sob o endereço.

Programa de Pós-Graduação em Física  
Universidade Estadual de Maringá  
Av. Colombo, 5790 – Jd. Universitário  
CEP 87020-900 – Maringá – PR – BR

Telefone: +55 44 3011 5938

E-mail: [sec-pfi@uem.br](mailto:sec-pfi@uem.br)





## **PFI/UEM – 25 anos de contribuição para a ciência**

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ

Copyright© (2023) by Programa de Pós-Graduação em Física – Universidade Estadual de Maringá (PFI/UEM)

All rights reserved.

**ISBN 978-65-272-0152-6**

For permission requests, please contact the Programa de Pós-Graduação em Física at the address below.

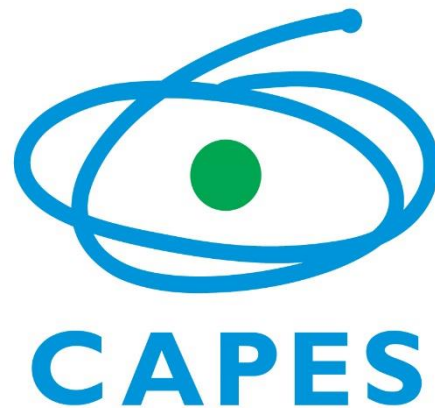
Programa de Pós-Graduação em Física  
Universidade Estadual de Maringá  
Av. Colombo, 5790 – Jd. Universitário  
CEP 87020-900 – Maringá – PR – BR

Phone: +55 44 3011 5938

E-mail: [sec-pfi@uem.br](mailto:sec-pfi@uem.br)



## APOIO



## **Comissão organizadora**

Antonio Medina Neto

Ivair Aparecido dos Santos

Renio dos Santos Mendes

## **Comitê científico**

Antonio Medina Neto

Francielle Sato

Gustavo Sanguino Dias

Haroldo Valentin Ribeiro

Vitor Santaella Zanuto

## **Apresentação**

O Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Estadual de Maringá – PFI/UEM está completando 25 anos, neste período têm se dedicado à formação de pesquisadores e docentes nas diversas áreas da Física e, já formou até o momento 235 mestres e 145 doutores. A maioria de nossos egressos são professores e pesquisadores em Instituições de Ensino Superior e/ou Centros de Pesquisa e Inovação nas diferentes regiões do Brasil, contribuindo de forma significativa para a formação da população tanto nos aspectos científicos quanto tecnológicos. Não obstante, grande parte dos egressos compõe também corpo docente de programas de pós-graduação em diferentes áreas de pesquisa e em diferentes regiões do país.

Com o objetivo de fomentar a interação e as discussões científicas entre nossos egressos e destes com corpo docente atual do PFI/UEM, foi idealizado a realização deste evento, o qual contempla à informação dos participantes das atuais políticas públicas para o desenvolvimento da ciência no país, com a realização de palestras (plenárias) dos gestores das principais agências de fomento e órgãos de planejamento estratégicos nacionais. Concomitantemente, foram realizadas seções temáticas com a apresentação de palestras de egressos do PFI/UEM, nas quais foi apresentado um panorama geral das pesquisas que vêm realizando e suas experiências profissionais desde após a conclusão da pós-graduação, propiciando as discussões entre os diferentes grupos de pesquisa, possibilitando criar e ampliar as interações técnico-científicas entre os pesquisadores egressos do programa.

Os resumos expandidos, aqui compilados e organizados, são referentes aos trabalhos apresentados durante as sessões de pôsteres, nas quais os participantes tiveram a oportunidade de apresentar e discutir as principais pesquisas em andamento.

Esperamos que o acesso ao material aqui apresentado produza novas possibilidades de colaborações entre os autores e os demais pesquisadores, egressos e acadêmicos do PFI/UEM e que possam contribuir para a promoção do progresso da ciência, da tecnologia e da inovação.

Antonio Medina Neto

Presidente da Comissão Organizadora

# SUMÁRIO

## APRESENTAÇÕES CONVIDADAS

<b>História do PFI/UEM.....</b>	<b>1</b>
<i>Prof. Dr. Luiz Roberto Evangelista</i>	
<b>Ciência: Substantivo Feminino.....</b>	<b>2</b>
<i>Profa. Dra. Márcia Cristina Bernardes Barbosa</i>	
<b>Avanços e Desafios da Pós-Graduação Brasileira.....</b>	<b>3</b>
<i>Prof. Dr. Antonio Gomes de Souza Filho</i>	

---

## SESSÕES TEMÁTICAS

<b>Trajétória de uma cientista iniciante à pesquisadora.....</b>	<b>4</b>
<i>Profa. Dra. Roberta R. R. de Almeida</i>	
<b>Um físico perdido na engenharia: relato das possibilidades de colaboração.....</b>	<b>4</b>
<i>Prof. Dr. Leandro Herculano da Silva</i>	
<b>Espectroscopia Fototérmica: do PFI/UEM para a UTFPR e TU Wien.....</b>	<b>4</b>
<i>Prof. Dr. Gustavo Vinicius Bassi Lukasiewicz</i>	
<b>A impedância em Cristais Líquidos.....</b>	<b>4</b>
<i>Dra. Michely Rosseto</i>	
<b>A Educação como instrumento da ascensão e transformação social.....</b>	<b>4</b>
<i>Prof. Dr. Antonio Oliveira de Souza</i>	
<b>Com atrito e resistência do ar: uma partilha a partir do meu referencial.....</b>	<b>4</b>
<i>Profa. Dra. Ana Claudia Nogueira Mulati</i>	
<b>Os desafios e aventuras dos doutorandos e egressos do PFI pelo mundo.....</b>	<b>5</b>
<i>Profa. Dra. Francielle Sato</i>	
<i>Prof. Dr. Vitor Santaella Zanuto</i>	
<i>Ma. Mariana Sversut Gibin</i>	
<i>Dr. Gabriel Antonio Flizikowski Siqueira</i>	
<b>Pesquisando biomateriais no GFAMA da UNICENTRO: uma experiência após a passagem pelo PFI/UEM.....</b>	<b>5</b>
<i>Profa. Dra. Taiana Gabriela Moretti Bonadio</i>	
<b>Um egresso do PFI na terra dos Pinherais.....</b>	<b>5</b>
<i>Prof. Dr. Valdirlei Fernandes Freitas</i>	
<b>Da UEM à UFMA: da criação do PPGCM aos vidros aplicados na fotônica e na regeneração de tecidos.....</b>	<b>5</b>
<i>Profa. Dra. Franciana Pedrochi</i>	

<b>A trajetória do Grupo de Cristais Líquidos ao longo dos 25 anos do PFI/UEM.....</b>	<b>5</b>
<i>Prof. Dr. Anderson Reginaldo Sampaio</i>	
<b>Estudo de vidros e materiais opticamente ativos. De Maringá a Pato Branco, daí.....</b>	<b>5</b>
<i>Prof. Dr. Marcelo Sandrini</i>	
<b>Memórias da minha pós-graduação em Física.....</b>	<b>5</b>
<i>Profa. Dra. Hercília Alves Pereira de Carvalho</i>	
<b>Propriedades físicas de nanomateriais unidimensionais e bidimensionais sob condições extremas de pressão.....</b>	<b>6</b>
<i>Prof. Dr. Antonio Gomes de Souza Filho</i>	
<b>Ciência de dados: o que a academia e a indústria têm em comum.....</b>	<b>6</b>
<i>Dr. Higor Sigaki</i>	
<b>A carreira científica nos EUA.....</b>	<b>6</b>
<i>Dr. Luiz Gustavo de Andrade Alves</i>	
<b>Da física à prevenção de fraudes: uma jornada de aplicação de sistemas complexos e análise de dados.....</b>	<b>6</b>
<i>Prof. Dr. Denner Serafim Vieira</i>	
<b>Me formei, e agora? Desafios e oportunidades no ensino e pesquisa em física.....</b>	<b>6</b>
<i>Profa. Dra. Lilian Felipe da Silva Tupan</i>	

---

## **RESUMOS EXPANDIDOS**

<b>Estudo da bioatividade de vidros boratos de cálcio e sódio utilizando espectroscopia vibracional.....</b>	<b>7</b>
<i>V. Gonzaga, M.S. Gibin, H. Santos, F. Hegeto, W.R. Weinand, F. Sato</i>	
<b>Peer Instruction: Aplicação da metodologia no ensino dos conceitos sobre radiação eletromagnética.....</b>	<b>11</b>
<i>V. Estêrcio, V.S. Zanuto</i>	
<b>Estrelas B do campo 13 da missão Kepler/K2.....</b>	<b>15</b>
<i>B.V.H.V. Silva, M. Emilio, A.W. Pereira, E. Janot-Pacheco</i>	
<b>Point and line defects in checkerboard patterned hybrid nematic films. A computer simulation investigation.....</b>	<b>19</b>
<i>M. Casaroto, C. Chiccoli, L. R. Evangelista, P. Pasini, R.T. de Souza, C. Zannoni, R.S. Zola</i>	
<b>Estudo da interação do 2OHAO com lipossomas de POPC por Espectroscopia Raman.....</b>	<b>23</b>
<i>M.W.C. Silva, S.H.A. Domingues, H. Santos, A.N. Medina, F. Sato, K. Brunaldi</i>	
<b>Síntese e caracterização luminescente de visrods Sódio Cálcio Silica dopados com Európio trivalente de alta emissão.....</b>	<b>27</b>
<i>L.C. Granatto, M.S. Gibin, B.S. Greatti, M.M. Travain, G.O. Marino, J.G.B. Vedovelli, J.W. Berrar, R.F. Muniz, V.S. Zanuto</i>	



<b>Efeito do tratamento térmico em altas pressões nas propriedades luminescentes de vidros e cerâmicas de silicato de cálcio e sódio dopados com terras raras.....</b>	<b>31</b>
<i>G.T. Tel, A.N. Medina, V.S. Zanuto, R.F. Muniz</i>	
<b>Estudo de compósitos de vidro de cálcio-sódio-borato e hidroxiapatita: caracterização e avaliação da bioatividade <i>in vitro</i>.....</b>	<b>35</b>
<i>F.L. Hegeto, R.S. Palácios, M.S. Gibin, A. do Nascimento, A.N. Medina, W.R. Weinand, F. Pedrochi, A. Steimacher, C.V. Nakamura, K.M. Retamiro, N. Fernandes, F. Sato</i>	
<b>Estudo de fotoativação de corantes utilizados na terapia fotodinâmica.....</b>	<b>38</b>
<i>G.O. Marino, A.P.B. Cavalaro, E.V. Bergmann, V.S. Zanuto, L.C. Malacarne</i>	
<b>Medidas magnéticas de nanopartículas de magnetita com diferentes revestimentos.....</b>	<b>42</b>
<i>G.T. Colombo, G.S. Dias, I.A. Santos, P.N. Oliveira, L. David, L.F. Cótica</i>	
<b>Diketopyrrolopyrrole-based organic dyes and their laser-induced photoactive response....</b>	<b>45</b>
<i>J.W. Berrar, V.S. Zanuto, N.G.C. Astrath, L.C. Malacarne, J. Calvo-Castro, M.L. Baesso</i>	
<b>Estudo da influência na resposta bioativa de vitrocerâmicas produzidas a partir do sistema vítreo Boro-Sódio-Cálcio com diferentes tamanhos de partículas.....</b>	<b>49</b>
<i>H. Santos, P.N. Portes, M.S. Gibin, W.R. Weinand, F. Sato</i>	
<b>Avaliação do efeito do ácido 2-A-hidroxioléico na fluidez de membrana de lipossomas de POPC.....</b>	<b>53</b>
<i>S.H.A. Domingues, M.W.C. Silva, P.F.L. Alves, F. Sato, K. Brunaldi</i>	
<b>UV-ômetro - sensor de ultravioleta com arduíno e a saúde humana: uma proposta para o ensino-aprendizagem.....</b>	<b>57</b>
<i>R.A. Leite, R.C. Viscocini, M.A.C. Melo</i>	
<b>Otimizando o <i>design</i> de materiais com o uso de aprendizagem de máquina.....</b>	<b>61</b>
<i>H.N. Machado, G.S. Dias, I.A. Santos, V.F. Freitas, L.F. Cótica</i>	
<b>Desenvolvimento de novos conversores espectrais para células solares híbridas de alto desempenho.....</b>	<b>65</b>
<i>M.M. Travain, L.C. Granatto, J.W. Berrar, B.S. Greatti, G.O. Marino, V.S. Zanuto, M.L. Baesso</i>	
<b>Termometria óptica: uma avaliação do vidro aluminossilicato de cálcio dopado com metais terras raras.....</b>	<b>69</b>
<i>J.G.B. Vedovelli, M.S. Gibin, M.L. Baesso, V.S. Zanuto</i>	
<b>Efeitos de altas pressões nas propriedades estruturais e luminescentes de vidros silicatos de cálcio e sódio dopados e co-dopados com <math>\text{Eu}^{3+}</math>, <math>\text{Nd}^{3+}</math> e <math>\text{Yb}^{3+}</math>.....</b>	<b>73</b>
<i>P.L. Santos, A.N. Medina, R.F. Muniz</i>	
<b>Potencialização da blindagem contra radiação ionizante em vidros silicatos por meio da incorporação de óxidos modificadores.....</b>	<b>77</b>
<i>M.A. Silva, V.S. Zanuto, R.F. Muniz</i>	
<b>Efeitos do tamanho de cristalito e da densidade de discordâncias no comportamento de nanopartículas de <math>\text{BiFeO}_3</math> obtidas por criomoagem.....</b>	<b>81</b>
<i>E.A. Volnistem, G.S. Dias, L.F. Cótica, I.A. Santos</i>	
<b>Desenvolvimento de biomateriais de quarta geração à base de PVDF e fosfatos de cálcio naturais.....</b>	<b>85</b>
<i>A.N. Volnistem, E.A. Volnistem, A.C. Ferreira, W.R. Weinand, E. Radovanovic, T.G.M. Bonadio, V.F. Freitas, I.A. Santos</i>	

<b>Association between productivity and impact across disciplines and career age.....</b>	<b>89</b>
<i>A.S. Sunahara, M. Perc, H.V. Ribeiro</i>	
<b>Trappings versus heterogeneity: Anomalous diffusion in a hybrid comb model.....</b>	<b>91</b>
<i>H.V. Ribeiro, A.A. Tateishi, E.K. Lenzi, R.L. Magin</i>	
<b>Universality of political corruption networks.....</b>	<b>93</b>
<i>A.F. Martins, B.R. da Cunha, Q.S. Hanley, S. Gonçalves, M. Perc, H.V. Ribeiro</i>	
<b>Machine learning partners in criminal networks.....</b>	<b>95</b>
<i>D.D. Lopes, B.R. da Cunha, A.F. Martins, S. Gonçalves, E.K. Lenzi, Q.S. Hanley, M. Perc, H.V. Ribeiro</i>	
<b>Espelho térmico aplicado ao vidro aluminossilicatos de cálcio dopado com <math>\text{Eu}^{3+}</math> variando a concentração de sílica.....</b>	<b>97</b>
<i>G.M. Dias, B.S. Greatti, J.W. Berrar, P.H.B. Librelato, M. Sandrini, A.N. Medina, N.G.C. Astrath, V.S. Zanuto</i>	
<b>Detecção optoacústica de efeitos de lente fotoinduzidos em escala de tempo de nanossegundos em líquidos.....</b>	<b>101</b>
<i>E.V. Bergmann, G.V.B. Lukasiwicz, B. Lendl, A.R. Sampaio, V.S. Zanuto, M.L. Baesso, L.C. Malacarne, N.G.C. Astrath</i>	
<b>Lente Térmica: uma comparação entre os modelos teóricos que descrevem o efeito e seus resultados experimentais.....</b>	<b>105</b>
<i>P.H. Librelato, J.W. Berrar, B.S. Greatti, G.D. Mendonça, N.G.C. Astrath</i>	
<b>Estudo da transferência de energia entre <math>\text{Pr}^{3+}</math> e <math>\text{Yb}^{3+}</math> em vidros LSCAS via espectroscopia fotoacústica.....</b>	<b>109</b>
<i>B.S. Greatti, M.L. Baesso, V.S. Zanuto</i>	
<b>UMA NOVA ABORDAGEM NA INTERPRETAÇÃO DAS TEXTURAS LÍQUIDO CRISTALINAS COM O USO DA PLACA-<math>\lambda</math>.....</b>	<b>113</b>
<i>D. D. Lüders, E. Akpınar, M. L. G. Pereira, N. G. C. Astrath</i>	

## PALESTRA CONVIDADA

# História do PFI/UEM

**Prof. Dr. Luiz R. Evangelista**

Possui graduação em Física pela Universidade Estadual de Maringá (1979), mestrado em Físico-Química pela Universidade Federal de Santa Catarina (1983) e doutorado em Física de Partículas pela Universidade de São Paulo (1988), tendo realizado pós-doutoramento no Politecnico di Torino (Itália, 1989-1990), onde também foi Professor Visitante (1991-1994). Atualmente é professor titular-aposentado na área de Física Teórica do Departamento de Física da Universidade Estadual de Maringá e membro do corpo permanente do Programa de Pós-Graduação em Física do DFI-UEM. Tem experiência na área de Física Teórica, com ênfase em Equação de Estado, Equilíbrio de Fases e Transições de Fase, atuando principalmente nos seguintes temas: adsorção, cristais líquidos, teoria elástica-contínua, difusão anômala e aplicações do cálculo fracionário aos problemas de difusão de íons em sistemas complexos.

Palestra ministrada no dia 07 de novembro de 2023 às 20:00 horas.

Encontra-se disponível para acesso pelos links (a partir do instante 51:40):

[https://www.youtube.com/watch?v=e9EUcdLVM3s&ab\\_channel=PFI-UEMProgramadeP%C3%B3s-Gradua%C3%A7%C3%A3oemF%C3%ADsica](https://www.youtube.com/watch?v=e9EUcdLVM3s&ab_channel=PFI-UEMProgramadeP%C3%B3s-Gradua%C3%A7%C3%A3oemF%C3%ADsica)



## PALESTRA CONVIDADA

# Ciência: Substantivo Feminino

**Profa. Dra. Marcia Cristina B. Barbosa**

Possui graduação (1981), mestrado I (1984) e doutorado (1988) pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Atualmente é professora titular da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, membro titular da Academia Brasileira de Ciências e da Academia Mundial de Ciências (TWAS). Tem experiência na área de Física, com ênfase em Física da Matéria Condensada, atuando principalmente em água e no uso de suas anomalias para processos físicos e biológicos. Pelo estudo das anomalias da água ganhou o prêmio Loreal-Unesco de Mulheres nas Ciências Físicas e o prêmio Claudia em Ciência, ambos em 2013. Em paralelo, atua em questões de gênero pelo que ganhou a Medalha Nicholson da American Physical Society em 2009. Por sua atuação pela pós-graduação ganhou o Prêmio Anísio Teixeira da Capes em 2016 e por seu trabalho em prol da ciência recebeu em 2018 da presidência da república a Medalha do Mérito Científico como Comendadora e, em 2021, a Medalha Silvío Torres da Fapergs.

Palestra ministrada no dia 08 de novembro de 2023 às 20:30 horas.

Encontra-se disponível para acesso pelos links (a partir do instante 59:36):

[https://www.youtube.com/watch?v=oJExC5vWwxk&ab\\_channel=PFI-UEMProgramadeP%C3%B3s-Gradua%C3%A7%C3%A3oemF%C3%ADsica](https://www.youtube.com/watch?v=oJExC5vWwxk&ab_channel=PFI-UEMProgramadeP%C3%B3s-Gradua%C3%A7%C3%A3oemF%C3%ADsica)



## PALESTRA CONVIDADA

# Avanços e Desafios da Pós-Graduação Brasileira

**Prof. Dr. Antonio Gomes S. Filho**

Concluiu o Doutorado em Física pela Universidade Federal do Ceará em 2001 com a realização de estágio sanduíche no MIT-EUA durante o ano de 2000. Atualmente é Prof. Titular do Departamento de Física da UFC e Bolsista de produtividade do CNPq, nível 1A. Publicou 260 artigos em periódicos internacionais especializados. É autor e co-autor de sete artigos de revisão convidados e cinco capítulos de livros (springer-verlag). É co-autor do livro “Solid State Properties From Bulk to Nano” publicado pela Springer-Verlag em 2018. Foi pesquisador visitante nas Universidades de Tohoku (Japão), no MIT (EUA), na Universidade de Lyon-1 (França), e na UNICAMP. Ministrou várias palestras e seminários convidadas no Brasil e no exterior. Foi agraciado em 2009 com o prêmio Somiya Award da International Union of Materials Reserach Societies 2009 for the collaborative work on Carbon nanostructured materials. Foi Pró-Reitor de Pesquisa e Pós-Graduação da Universidade Federal do Ceará de 2016 a 2019. Foi Membro Afiliado da Academia Brasileira de Ciências no período de 2001-2015 e ingressou como Membro titular da Academia Brasileira de Ciências em 2018. Recebeu em 2018, da Presidência da República do Brasil, a Comenda da Ordem Nacional do Mérito Científico - Classe Comendador. Foi membro do conselho da Sociedade Brasileira de Física (2019-2021) e Membro do Conselho Consultivo da Academia Brasileira de Ciências (2019-2021). Foi nomeado Coordenador da área de Astronomia/Física na CAPES pelo período de Dezembro/2022 a Novembro/2026 e integra o Conselho Técnico Científico (CTC) da CAPES como membro titular desde Fevereiro/2023.

Palestra ministrada no dia 09 de novembro de 2023 às 19:30 horas.

Encontra-se disponível para acesso pelos links (a partir do instante 6:50):

[https://www.youtube.com/watch?v=JURQsr7jkew&ab\\_channel=PFI-UEMProgramadeP%C3%B3s-Gradua%C3%A7%C3%A3oemF%C3%ADsica](https://www.youtube.com/watch?v=JURQsr7jkew&ab_channel=PFI-UEMProgramadeP%C3%B3s-Gradua%C3%A7%C3%A3oemF%C3%ADsica)



## SESSÕES TEMÁTICAS – 08/11/2023

**Trajetória de uma cientista iniciante à pesquisadora** (14:00 horas)

*Profa. Dra. Roberta R. R. de Almeida*

**Um físico perdido na engenharia: relato das possibilidades de colaboração** (14:30 horas)

*Prof. Dr. Leandro Herculano da Silva*

**Espectroscopia Fototérmica: do PFI/UEM para a UTFPR e TU Wien** (15:00 horas)

*Prof. Dr. Gustavo Vinicius Bassi Lukasiewicz*

**A impedância em Cristais Líquidos** (16:00 horas)

*Dra. Michely Rosseto*

**A Educação como instrumento da ascensão e transformação social** (16:30 horas)

*Prof. Dr. Antonio Oliveira de Souza*

**Com atrito e resistência do ar: uma partilha a partir do meu referencial** (17:00 horas)

*Profa. Dra. Ana Claudia Nogueira Mulati*

Apresentações ministradas no dia 08 de novembro de 2023 a partir das 14:00 horas.

Encontra-se disponível para acesso pelos links:

[https://www.youtube.com/watch?v=njgbBXOgFTU&ab\\_channel=PFI-UEMProgramadeP%C3%B3s-Gradua%C3%A7%C3%A3oemF%C3%ADsica](https://www.youtube.com/watch?v=njgbBXOgFTU&ab_channel=PFI-UEMProgramadeP%C3%B3s-Gradua%C3%A7%C3%A3oemF%C3%ADsica)



**Os desafios e aventuras dos doutorandos e egressos do PFI pelo mundo** (19:30 horas)

*Profa. Dra. Francielle Sato*

*Prof. Dr. Vitor Santaella Zanuto*

*Ma. Mariana Sversut Gibin*

*Dr. Gabriel Antonio Flizikowski Siqueira*

Apresentações ministradas no dia 08 de novembro de 2023 a partir das 19:30 horas.

Encontra-se disponível para acesso pelos links:

[https://www.youtube.com/watch?v=oJExC5vWwxk&ab\\_channel=PFI-UEMProgramadeP%C3%B3s-Gradua%C3%A7%C3%A3oemF%C3%ADsica](https://www.youtube.com/watch?v=oJExC5vWwxk&ab_channel=PFI-UEMProgramadeP%C3%B3s-Gradua%C3%A7%C3%A3oemF%C3%ADsica)



## SESSÕES TEMÁTICAS – 09/11/2023

**Pesquisando biomateriais no GFAMA da UNICENTRO: uma experiência após a passagem pelo PFI/UEM** (14:00 horas)

*Profa. Dra. Taiana Gabriela Moretti Bonadio*

**Um egresso do PFI na terra dos Pinherais** (14:30 horas)

*Prof. Dr. Valdirlei Fernandes Freitas*

**Da UEM à UFMA: da criação do PPGCM aos vidros aplicados na fotônica e na regeneração de tecidos** (15:00 horas)

*Profa. Dra. Franciana Pedrochi*

**A trajetória do Grupo de Cristais Líquidos ao longo dos 25 anos do PFI/UEM** (16:00 horas)

*Prof. Dr. Anderson Reginaldo Sampaio*

**Estudo de vidros e materiais opticamente ativos. De Maringá a Pato Branco, daí** (16:30 horas)

*Prof. Dr. Marcelo Sandrini*

**Memórias da minha pós-graduação em Física** (17:00 horas)

*Profa. Dra. Hercília Alves Pereira de Carvalho*

Apresentações ministradas no dia 09 de novembro de 2023 a partir das 14:00 horas.

Encontra-se disponível para acesso pelos links:

[https://www.youtube.com/watch?v=RJL9NZyz6\\_g&t=10625s&ab\\_channel=PFI-UEMProgramadeP%C3%B3s-Gradua%C3%A7%C3%A3oemF%C3%ADsica](https://www.youtube.com/watch?v=RJL9NZyz6_g&t=10625s&ab_channel=PFI-UEMProgramadeP%C3%B3s-Gradua%C3%A7%C3%A3oemF%C3%ADsica)



## SESSÕES TEMÁTICAS – 10/11/2023

**Propriedades físicas de nanomateriais unidimensionais e bidimensionais sob condições extremas de pressão** (14:00 horas)

*Prof. Dr. Antonio Gomes de Souza Filho*

**Ciência de dados: o que a academia e a indústria têm em comum** (15:00 horas)

*Dr. Higor Sigaki*

**A carreira científica nos EUA** (16:00 horas)

*Dr. Luiz Gustavo de Andrade Alves*

**Da física à prevenção de fraudes: uma jornada de aplicação de sistemas complexos e análise de dados** (16:30 horas)

*Prof. Dr. Denner Serafim Vieira*

**Me formei, e agora? Desafios e oportunidades no ensino e pesquisa em física** (17:00 horas)

*Profª. Dra. Lilian Felipe da Silva Tupan*

Apresentações ministradas no dia 10 de novembro de 2023 a partir das 14:00 horas.

Encontra-se disponível para acesso pelos links:

[https://www.youtube.com/watch?v=BKID\\_Hd9q6I&ab\\_channel=PFI-UEMProgramadeP%C3%B3s-Gradua%C3%A7%C3%A3oemF%C3%ADsica](https://www.youtube.com/watch?v=BKID_Hd9q6I&ab_channel=PFI-UEMProgramadeP%C3%B3s-Gradua%C3%A7%C3%A3oemF%C3%ADsica)





## ESTUDO DA BIOATIVIDADE DE VIDROS BORATOS DE CÁLCIO E SÓDIO UTILIZANDO ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL

V. Gonzaga\*, M.S. Gibin, H. Santos, F. Hegeto, W. R. Weinand, F. Sato

Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

\*Corresponding author's email: [victoriahsgonzaga@gmail.com](mailto:victoriahsgonzaga@gmail.com)

**Palavras-chave:** Espectroscopia vibracional; Vidros boratos de cálcio e sódio; Bioatividade.

Foi realizada a síntese de vidros bioativos de borato com, e sem, a presença de óxido de fósforo nas composições. Posteriormente realizou-se o teste de bioatividade *in vitro* utilizando Fluido Corpóreo Simulado (SBF) com o objetivo de verificar a contribuição do fósforo na formação da camada apatítica e definir qual foi a camada criada na superfície, fluorapatita (Fap) ou hidroxiapatita (Hap).

### INTRODUÇÃO

O conceito de biovidro levou ao desenvolvimento de uma nova classe de biomateriais, que são conhecidos como vidros bioativos atualmente, podendo ser usados em implantes ou próteses para reparar ou substituir ossos, articulações ou dentes [1]. Tem como objetivo os testes *in vitro* para os materiais bioativos avaliarem a formação de uma camada de hidroxicarbonato de apatita na superfície dele. O SBF é o responsável por simular o plasma humano, mantido sob as mesmas condições fisiológicas de pH e temperatura para ser possível realizar uma simulação fiel ao comportamento que ocorreria no corpo humano [2]. O espalhamento Raman e a FTIR são técnicas de espectroscopia molecular que utilizam a interação da luz com a matéria, são utilizados em vidros bioativos para detectar a camada apatita, onde se pretende ver a existência da formação da fluorapatita ou hidroxiapatita [3].

### MATERIAIS E MÉTODOS

Os vidros bioativos do sistema:  $60\text{B}_2\text{O}_3 - 5\text{CaF}_2 - (20-x)\text{Na}_2\text{O} - (15-x)\text{CaO} - (2x)\text{P}_2\text{O}_5$  ( $x = 0$  e  $0,1$  em % de massa) foram sintetizados no Laboratório de Materiais Metálicos e Biomateriais (DFI/UEM). Foi usado o método de fusão e resfriamento, os vidros foram preparados e cortados em forma de discos e após esse procedimento receberam polimento.

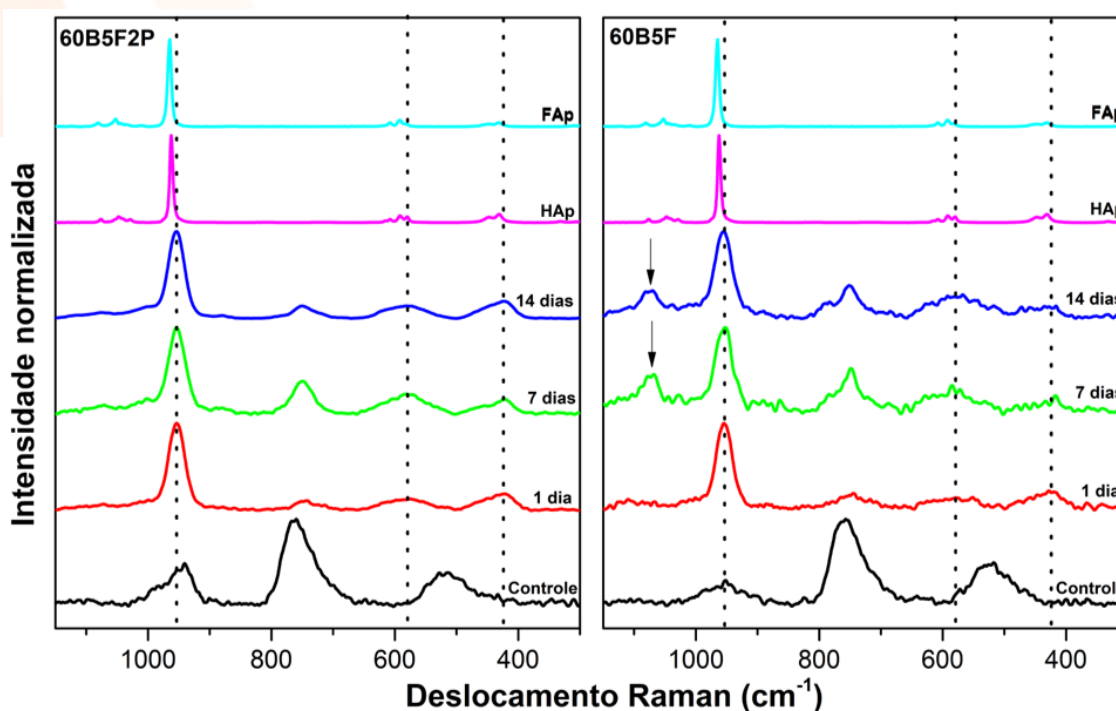
Os testes *in vitro* foram realizados em tubos plásticos de fundo cônico, mantendo a razão do volume de SBF pela área superficial da amostra  $0,1\text{ml}/\text{mm}^2$ , colocado em sequência em banho térmico mantendo a  $36,5^\circ\text{C}$ . As amostras foram submetidas a três diferentes períodos de imersão (1 dia, 7 dias e 14 dias) e ao final de cada estágio as amostras foram retiradas, lavadas ligeiramente com água deionizada para inibir a continuação da interação do vidro com o SBF.

Utilizou-se de amostras em duplicata para o FTIR e o Raman. O material nucleado na superfície do bioativo foi raspado a fim de ser analisado no FTIR-ATR e o restante das amostras foram utilizadas

diretamente sobre a camada formada na superfície para a caracterização no Raman. As medidas foram realizadas utilizando equipamentos disponíveis no COMCAP/UEM.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os vidros 60B5F e 60B5F2P foram submetidos a ensaio de bioatividade *in vitro* por meio da imersão em SBF durante 1, 7 e 14 dias. Antes e após o período de imersão as amostras de vidro foram analisadas utilizando as técnicas de Raman e FTIR-ATR. Os espectros apresentados na Figura 1 foram corrigidos por linha de base e normalizados para melhor visualização dos espectros.



**Figura 1** – Espectros Raman das amostras de vidros bioativos 60B5F2P e 60B5F sem imersão (controle), após 1, 7, 14 dias de imersão em SBF comparados aos espectros da hidroxiapatita (HAp) e fluorapatita (FAp) (RRUFF ID: R040098).

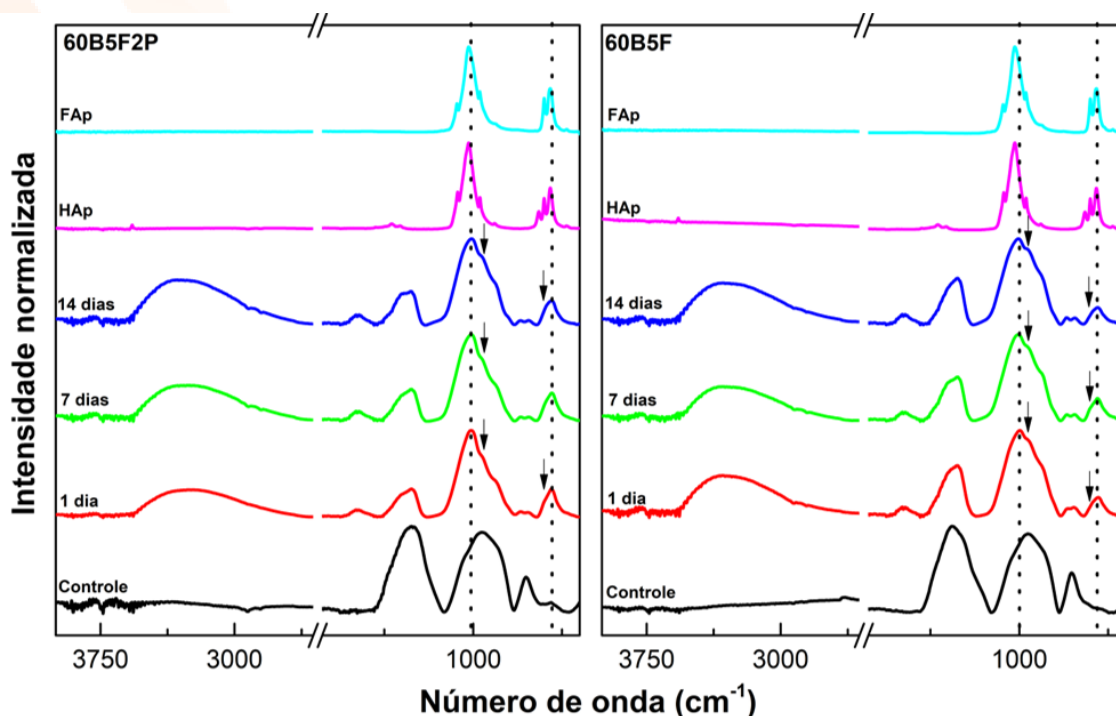
Na Figura 1 estão apresentados os resultados obtidos por meio da espectroscopia Raman, na qual foi possível observar no espectro controle as bandas referentes de grupos pentaborato, em 950, 760, 634 e 520  $\text{cm}^{-1}$ , para a amostra 60B5F. Já para o vidro 60B5F2P a banda de 950  $\text{cm}^{-1}$  desloca para 941  $\text{cm}^{-1}$  devido às ligações entre os grupos borato e fosfato, além disso há um ombro em 980  $\text{cm}^{-1}$  proveniente de estiramentos P-O de unidades de polifosfato.

Após a imersão em SBF observa-se bandas em 953, 580 e 426  $\text{cm}^{-1}$  (linhas pontilhadas na Fig.1) referentes aos modos de vibração  $\nu_1\text{PO}_4^{3-}$ ,  $\nu_4\text{PO}_4^{3-}$  e  $\nu_2\text{PO}_4^{3-}$ , respectivamente, em todos os períodos e ambos os vidros, mostrando a esperada formação da camada apatítica sobre os vidros bioativos.

Na amostra 60B5F há presença da banda em 1070  $\text{cm}^{-1}$  (setas na Fig.1) para 7 e 14 dias de imersão, atribuída a presença de carbonato o que caracteriza uma camada mais amorfa, quando comparada a 60B5F2P que não apresenta esta banda. Cabe ressaltar que para ambos os vidros a camada apatítica

ainda tem características amorfas, quando comparadas aos espectros da hidroxiapatita (HAp) e fluorapatita (FAp), que apresentam bandas Raman estreitas e bem definidas devido à sua alta cristalinidade.

A hidroxiapatita e fluorapatita apresentam uma banda Raman bem definida em 962 e 965  $\text{cm}^{-1}$ , respectivamente, referente a vibração  $\nu_1\text{PO}_4^{3-}$ . Com a espectroscopia Raman não foi possível observar se adição de fósforo ao vidro borato propicia a formação de HAp ou FAp. A banda em 750  $\text{cm}^{-1}$  observada em todos os períodos de imersão pode ser atribuída a presença do vidro, uma vez que a camada apatítica cresce sobre sua superfície.



**Figura 2** – Espectros de FTIR-ATR das amostras de vidros bioativos 60B5F2P e 60B5F sem imersão (controle) e após 1, 7, 14 dias de imersão em SBF comparados aos espectros da hidroxiapatita (HAp) e fluorapatita (FAp) (RRUFF ID: R040098).

A Figura 2 mostra os resultados obtidos por meio da espectroscopia FTIR-ATR. Observa-se nos espectros de controle de ambos os vidros bandas largas referentes aos modos vibracionais do grupo borato, nos intervalos de 1500 a 1200  $\text{cm}^{-1}$  e 1200 a 850  $\text{cm}^{-1}$  dos modos vibracionais  $\nu(\text{B-O})$  de  $\text{BO}_3$  e  $\text{BO}_4$ , respectivamente, e a banda em 705  $\text{cm}^{-1}$  atribuída à  $\delta(\text{B-O-B})$  de  $\text{BO}_3$ . A presença da adição de fósforo na composição é observada no espectro controle da amostra 60B5F2P com a presença da banda em 560  $\text{cm}^{-1}$  do modo  $\delta(\text{P-O-P})$  do fosfato, e uma possível banda sobreposta a banda do borato em 1040  $\text{cm}^{-1}$  do modo de vibração  $\nu(\text{P-O})$  também do fosfato. Após a imersão em SBF, a espectroscopia FTIR-ATR também evidencia a presença da camada apatítica formada sobre a superfície dos vidros, por meio da presença da banda em 560  $\text{cm}^{-1}$  e um ombro em 600  $\text{cm}^{-1}$ , linha pontilhada e setas na Fig. 2, atribuídas ao modo de vibração  $\nu_4\text{PO}_4^{3-}$ , além de outra banda e ombro na região entre 1080 e 900  $\text{cm}^{-1}$  dos modos de vibração de  $\nu_1\text{PO}_4^{3-}$  e  $\nu_3\text{PO}_4^{3-}$ , respectivamente. Todas as atribuições químicas citadas após imersão estão presentes nos espectros de FTIR-ATR na HAp e FAp. Podemos considerar que quanto mais semelhantes os espectros das amostras de vidro após imersão com a HAp e/ou FAp maior a cristalinidade da camada formada.

Em todos os períodos de pós imersão o espectro amostra 60B5F2P apresenta a banda em  $1010\text{ cm}^{-1}$  do modo  $\nu_1\text{PO}_4^{3-}$ , enquanto para amostra 60B5F após 1 dia este modo apresenta banda em  $996\text{ cm}^{-1}$ , deslocando-se para  $1004\text{ cm}^{-1}$  após 14 dias. Sabendo que tanto nos espectros da HAp, quanto da FAp apresentam a banda deste mesmo do modo vibracional em  $1020\text{ cm}^{-1}$ , quanto maior a semelhança entre os espectros dos vidros pós imersão com os da HAp e/ou FAp, podemos dizer que a camada apatítica formada é mais cristalina. Sendo assim, os vidros com adição de fósforo apresentam camada apatítica menos amorfa, corroborando com os resultados obtidos por espectroscopia Raman. É importante mencionar que as camadas apatíticas formadas no período avaliado, ainda possuem mais características amorfas do que cristalinas.

## CONCLUSÕES

Os resultados obtidos foram capazes de qualificar os sistemas vítreos  $60\text{B}_2\text{O}_3 - 5\text{CaF}_2 - (20-x)\text{Na}_2\text{O} - (15x)\text{CaO} - 2x\text{P}_2\text{O}_5$  ( $x=0$  e  $0,1$  em % de massa), tanto a caracterização quanto à bioatividade por meio do ensaio in vitro no SBF.

As técnicas de espectroscopia vibracionais Raman e FTIR mostraram que os vidros de borato 60B5F e 60B5F2P apresentaram a presença de fósforo também nas amostras de controle. O Raman e o FTIR-ATR mostraram que a adição de fósforo ao vidro de borato propiciou a formação de uma camada apatítica menos amorfa.

Com os tempos empregados de 1, 7 e 14 dias nenhuma das técnicas utilizadas conseguiu fazer a diferenciação da camada formada, se seria de HAp ou FAp. Ainda, sim os bioativos demonstram um potencial de bioatividade e formação de uma camada apatítica, mesmo que amorfa. Para perspectivas futuras, a realização de experimentos com o aumento do tempo de exposição do biovidro com o SBF poderá se mostrar mais evidente definir qual a camada formada.

## REFERÊNCIAS

- [1] HENCH. L. The story of Bioglass®. Journal of Materials Science: Materials in Medicine, v.17, n.11, 2006. p. 967-978.
- [2] KOKUBO, T., TAKADAMA, H. How useful is SBF in predicting in vivo bone bioactivity? Biomaterials, v.27, n.15, 2006. p. 2907-2915.
- [3] NOTINGHER, et al. Application of FTIR and Raman spectroscopy to characterisation of bioactive materials and living cells. Journal of Spectroscopy, v.17, n.2-3, 2003. p.275-288.

## *PEER INSTRUCTION*: APLICAÇÃO DA METODOLOGIA NO ENSINO DOS CONCEITOS SOBRE RADIAÇÃO ELETROMAGNÉTICA

V. Estércio\* e V. S. Zanuto

Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

\*Corresponding author's email: [vitoriaestercio@gmail.com](mailto:vitoriaestercio@gmail.com)

**Palavras-chave:** Educação; construção colaborativa; ensino ativo.

O trabalho apresenta a aplicação do método *Peer Instruction* na abordagem do conteúdo de Radiação Eletromagnética, utilizando a plataforma *Socrative*. O método incentiva a participação ativa dos alunos no processo de aprendizagem, promovendo a discussão e a construção colaborativa do conhecimento. O estudo foi conduzido com a colaboração de graduandos em Física da Universidade Estadual de Maringá, que estavam nas primeiras séries do curso e não tiveram contato prévio com o tema na graduação. Portanto, eles possuíam apenas conhecimentos do Ensino Médio sobre o assunto. Os resultados da aplicação do método foram positivos, confirmando a eficácia do método *Peer Instruction* e também quando combinado com a ferramenta de *feedback* imediato, *Socrative*. Essa abordagem pedagógica não apenas envolve os alunos de forma mais ativa em seu próprio processo de aprendizagem, mas também ajuda a melhorar o desempenho e compreensão do conteúdo.

### INTRODUÇÃO

No cenário educacional brasileiro persistem problemas de defasagem e atraso no ensino. O livro "O ponto a que chegamos: duzentos anos de atraso educacional e seu impacto nas políticas do presente" de Antônio Gois explora como a educação do passado contribuiu para a atual defasagem educacional no Brasil [1]. Gois utiliza dados do PISA (Programa Internacional de Avaliação de Estudantes) para destacar a falta de qualidade na educação pública ao longo do tempo e seu impacto nas políticas educacionais atuais.

Em meio a esse contexto de atraso educacional, a importância de focar no ensino de Física se destaca, especialmente com relação ao Novo Ensino Médio. O artigo "A Contribuição da Física para um Novo Ensino Médio" de Maria Regina Dubeux Kawamura e Yassuko Hosoume aborda a perda de conteúdo na Física no currículo do Novo Ensino Médio [2]. A reforma busca uma formação mais abrangente, não apenas para estudantes universitários, mas também para aqueles que encerram seus estudos no ensino médio. Isso implica na necessidade de simplificar o currículo, priorizando conceitos relevantes para o dia a dia dos alunos.

Considerando a falta de conhecimento dos alunos, que muitas vezes decorre da má formação de professores e de métodos de ensino ineficazes, é evidente a necessidade de melhorar a abordagem do ensino de conceitos físicos. É nesse contexto que o método *Peer Instruction*, criado por Eric Mazur, surge como uma ferramenta para aprimorar a aprendizagem [3]. Esse método enfatiza a interação entre os alunos e a compreensão dos conceitos fundamentais.

O *Peer Instruction* envolve dividir a aula em pontos-chave e aplicar testes conceituais entre eles. Os resultados desses testes determinam se a aula prossegue ou se os alunos debatem e respondem novamente às perguntas, ilustrado pelo fluxograma da Figura 1. A interação entre os alunos ajuda a esclarecer conceitos e dificuldades, enquanto o professor adquire insights sobre as áreas problemáticas dos estudantes.

Neste trabalho, método foi aplicado no ensino de Radiação Eletromagnética, um tema relevante, dado o seu papel na vida cotidiana. Os resultados da aula/experiência com estudantes de Física da Universidade Estadual de Maringá sugerem que o *Peer Instruction* pode ser uma ferramenta eficaz no ensino, pelo menos em um contexto específico. Em geral, o trabalho destaca a defasagem educacional no Brasil, a necessidade de simplificar o ensino de Física no Novo Ensino Médio e a potencial eficácia do método *Peer Instruction* como uma ferramenta de melhoria no ensino de conceitos físicos. No entanto, é importante reconhecer que a recuperação do atraso educacional requer esforços abrangentes em vários aspectos do sistema educacional.

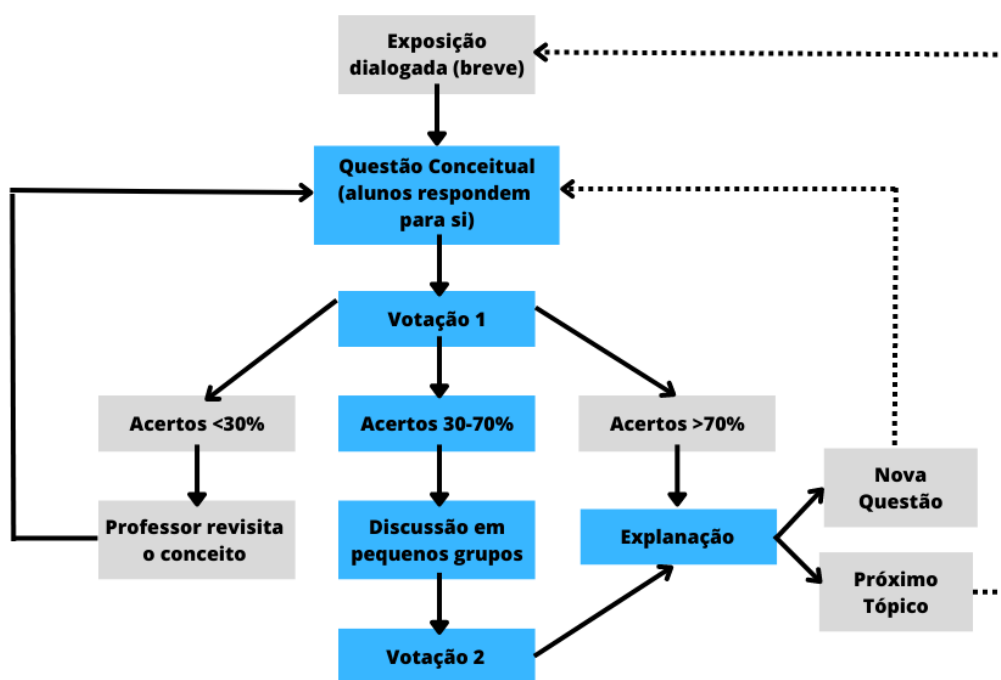


Figura 1 – Fluxograma do método *Peer Instruction*. Fonte: adaptada da Ref. [4].

## MATERIAIS E MÉTODOS

Neste trabalho foi realizada uma aula/experiência com 26 estudantes dos primeiros anos do curso de Física na Universidade Estadual de Maringá, com o objetivo de aplicar o método *Peer Instruction* ao tópico de Radiação Eletromagnética. A aula foi dividida em quatro pontos-chave, com o auxílio de *slides* contendo explicações, exemplos do cotidiano e imagens relacionadas ao conteúdo apresentado.

O método foi aplicado após cada ponto-chave, com a utilização da plataforma *Socrative*, uma ferramenta de avaliação online que permite que os alunos respondam a questões de múltipla escolha, verdadeiro ou falso, entre outras, utilizando seus dispositivos com acesso à internet.

Os quatro pontos-chave abordados na aula/experiência foram os seguintes:

1° Radiações: Explicação sobre o que são radiações, suas características, fontes e tipos (ionizantes e não ionizantes) e como elas são fundamentais no cotidiano.

2° Ondas/Radiações Eletromagnéticas: Abordagem do conceito de ondas eletromagnéticas, onde são encontradas, suas características, origem e características gerais das radiações eletromagnéticas.

3° Efeito Fotoelétrico: Explicação sobre o efeito fotoelétrico, sua relação com as interações das radiações eletromagnéticas com materiais e como funciona.

4° Radiações Eletromagnéticas: Discussão separada das sete radiações eletromagnéticas (ondas de rádio, micro-ondas, infravermelho, luz visível, ultravioleta, raios X e raios gama) e suas características.

O roteiro da aula/experiência incluiu a introdução da aula, um teste conceitual inicial, a apresentação dos quatro pontos-chave e a aplicação de testes conceituais após cada ponto-chave, totalizando 15 questões. O método *Peer Instruction* foi utilizado apenas quando a porcentagem de acertos nas questões dos testes conceituais não atingiu 81%. Após a aplicação dos testes conceituais, houve uma revisão das respostas e uma explicação das respostas corretas aos alunos. O objetivo foi melhorar a compreensão dos conceitos de Radiação Eletromagnética e promover a interação entre os estudantes durante a aula.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

Primeiramente, um Teste Conceitual Inicial foi aplicado, no qual os alunos precisavam identificar quais opções eram consideradas radiações. Os resultados revelaram um bom desempenho dos alunos, com 92% de acerto, tornando desnecessária a aplicação do método *Peer Instruction*.

Posteriormente, os alunos receberam informações sobre radiações, suas fontes e classificações. O Teste Conceitual 1 (2 questões) foi aplicado com 92% de acerto, mais uma vez não necessitando do *Peer Instruction*.

A aula continuou com explicações sobre ondas eletromagnéticas, seguidas por informações detalhadas. O Teste Conceitual 2 (4 questões) foi aplicado, com resultados variados, e o *Peer Instruction* foi utilizado apenas para a questão com menor desempenho, com os alunos alcançando 95% de acerto após a discussão.

O tópico sobre Efeito Fotoelétrico foi abordado, seguido pelo Teste Conceitual 3 (2 questões), no qual os alunos tiveram desempenho satisfatório. Houve alguma comunicação entre os alunos durante a aplicação dos testes, levando à proibição de conversas paralelas.

Na última parte da aula, os alunos receberam informações sobre cada região espectral de radiação eletromagnética. O Teste Conceitual 4 (7 questões) foi aplicado, com resultados variados. O *Peer Instruction* foi empregado para melhorar o desempenho dos alunos, convertendo de 18% de acertos das questões para 75%, demonstrando uma melhora considerável na porcentagem de acertos após a interação entre eles.

A análise dos dados ressaltou a eficácia do método *Peer Instruction* em melhorar a compreensão dos alunos e destacou como os alunos muitas vezes conseguem explicar conceitos uns aos outros de maneira eficaz. A comparação entre a porcentagem de acertos antes e depois da aplicação do método mostrou aumentos significativos em vários casos, reforçando a utilidade do *Peer Instruction* na aprendizagem.

## CONCLUSÕES

Após analisar o método *Peer Instruction*, sua origem, funcionamento e a aplicação desse método no contexto de ensino de Radiações Eletromagnéticas com a utilização do aplicativo *Socrative*, fica evidente que o método desenvolvido por Eric Mazur demonstrou ser altamente eficaz na melhoria da aprendizagem dos estudantes.

Por meio do *Peer Instruction*, os professores têm a capacidade de despertar o interesse dos alunos, aumentar a frequência de participação nas aulas e esclarecer dúvidas, bem como corrigir concepções errôneas que muitas vezes os alunos carregam consigo.

A aplicação do método resultou em alunos mais motivados para aprender, discutir o tópico em questão e compartilhar suas dúvidas com os colegas. No entanto, para obter resultados absolutos e estatísticos que comprovem a melhoria no desempenho do ensino com o uso desse método, seria necessário realizar mais aulas/experiências com um número maior de alunos. Além disso, seria apropriado ajustar a dificuldade das questões aplicadas, um ponto que pode ser abordado em futuros trabalhos e discussões.

## REFERÊNCIAS

- [1] Goiz, A. O ponto a que chegamos: duzentos anos de atraso educacional e seu impacto nas políticas do presente. Rio de Janeiro: FGV Editora, 2022.
- [2] Kawamura, M. R. D.; Housoume, Y. A Contribuição da Física para um Novo Ensino Médio. Física na Escola, São Paulo, v. 4, p. 22-27, 2003.
- [3] E. Mazur e M. D. Somers, Peer instruction: A user's manual. Upper Saddle River, N. J. Prentice Hall, 253 (1997).
- [4] I. S. Araujo e E. Mazur, Instrução pelos Colegas e Ensino sob Medida: uma proposta para o engajamento dos alunos no processo de ensinoaprendizagem de física, Caderno Brasileiro de Ensino de Física v. 30, n. 2: p. 362-384 (2013).
- [5] Mazur, Eric. Peer Instruction: A Revolução da Aprendizagem Ativa. Editora Penso. São Paulo. 2015.



## ESTRELAS B DO CAMPO 13 DA MISSÃO KEPLER/K2

B.V.H.V. Silva<sup>1,\*</sup>, M. Emilio<sup>1</sup>, A.W. Pereira<sup>2</sup> e E. Janot-Pacheco<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Ciência/Física, Universidade Estadual de Ponta Grossa, UEPG – Ponta Grossa-PR, Brasil.

<sup>2</sup>Observatório Nacional, ON – Rio de Janeiro-RJ, Brasil

<sup>3</sup>Departamento de Astronomia, Universidade de São Paulo, USP – São Paulo-SP, Brasil

\*Corresponding author's email: [bergersonvanhallen@gmail.com](mailto:bergersonvanhallen@gmail.com)

**Palavras-chave:** Variabilidade estelar; parâmetros atmosféricos; diagnóstico sísmico.

Apresentamos um estudo de 68 estrelas de tipo espectral B examinadas durante a campanha 13 da missão Kepler/K2. Para investigar suas propriedades, realizamos análises fotométrica, espectroscópica, evolutiva e sísmológica. As curvas de luz foram confeccionadas com o auxílio do código K2SC, enquanto a inspeção de frequências provém dos algoritmos CLEANEST e IvS. Obtemos espectros ópticos na faixa do azul para 24 dessas estrelas. A determinação dos parâmetros astrofísicos foi efetuada utilizando os programas SME e MESA. Adicionalmente, implementamos um método sísmico simplificado para investigar a frequência média de rotação interna ( $\nu_{rot}$ ) e o tempo de deslocamento do empuxo ( $P_0$ ) das estrelas. A classificação da variabilidade estelar foi auxiliada por meio de um diagrama de cor e magnitude.

### INTRODUÇÃO

A missão K2 foi observada pelo telescópio Kepler com cerca de 80 dias. Para a Campanha 13 (C13), os dados fotométricos foram integrados no período de 08/03/2017 a 27/05/2017. Exemplos de variabilidade incluem estrelas do tipo *Slowly Pulsating B-stars* (SPB), híbridas (SPB/  $\beta$  Cep), MAIA, estrelas com excesso de potência em baixas frequências (*Internal Gravity Waves* – IGW ou *Stochastic Low Frequency* - SLF) e estrelas que exibem binariedade (BIN), rotação (ROT) ou ambos. Utilizando o *Data Release 3* (DR3) do GAIA foi possível construir um diagrama cor-magnitude. A frente de pesquisa fotométrica com curvas de luz, espectro de frequências, mapa de cor *Wavelet* e parâmetros fornecidos pelo GAIA DR3 permite uma abrangente caracterização dessas estrelas do C13. O trabalho classifica com maior precisão as estrelas B do C13 em relação às literaturas anteriores, pois parâmetros atmosféricos são obtidos via análise espectral, o que permite caracterizar de forma evolutiva esses alvos. A estrutura do trabalho é a seguinte: apresentação do diagrama cor-magnitude do GAIA, diagnóstico fotométrico, diagnóstico sísmico, espectroscopia estelar e dos parâmetros evolutivos. Em seguida, alguns dos principais resultados obtidos são detalhados, seguidos pelas conclusões.

### MATERIAIS E MÉTODOS

A equação da magnitude absoluta na banda G é descrita da seguinte forma:

$$M_G = G + 5 - 5 \log_{10} r - A_G, \quad (1)$$

com  $G$  sendo a magnitude aparente,  $r$  é a distância e  $A_G$  a extinção. A Eq. (1) é utilizada na confecção do diagrama de cor-magnitude GAIA. As curvas de luz são fornecidas pelo Centro de Pesquisa Ames da NASA. Em seguida, corrigimos as curvas de luz para erros sistemáticos e oscilações usando a Correção Sistemática K2 (K2SC). Foi usado o algoritmo CLEANEST para análise temporal em séries temporais irregulares. A análise incluiu um método de pré- *whitening* que ajusta uma função:

$$F(t_i) = \mu + C + \sum_{i=1}^{n_f} A_i \sin[2\pi(\nu_i t_i + \phi_i)] + \epsilon_i \quad (2)$$

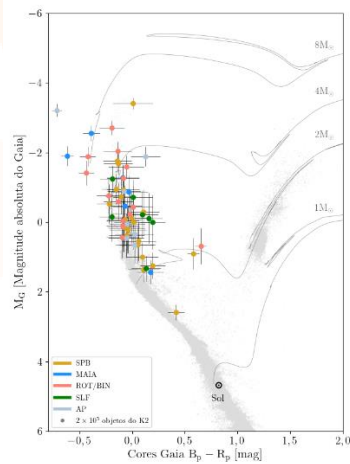
ao sinal original, com  $\epsilon_i$  sendo o ruído gaussiano,  $C$  um parâmetro de correção em  $\mu$  (a mediana do fluxo), e  $A_i$ ,  $\nu_i$  e  $\phi_i$  são a amplitude, frequência e fase, respectivamente. Esse processo auxilia a detectar sinais nas curvas de luz. Takata et al. (2020) descrevem um método simplificado de asterosismologia para identificar a frequência de rotação e os períodos dos modos-g em estrelas SPB baseado na convergência de:

$$f_k(\nu_{rot}) \sqrt{\frac{\Delta_k \nu}{m \Delta_k n}} = \sqrt{P_0} \left( \frac{\nu_{k+\frac{1}{2}}}{m} - \nu_{rot} \right), \quad f_k(\nu_{rot}) = \left\{ \frac{-1}{(m \Delta_k \nu) \Delta_k} \left( \frac{\sqrt{\lambda_{m,m}(s)}}{\nu_{co}} \right) \right\}^{\frac{1}{2}} \left( \nu_{k+\frac{1}{2}} - m \nu_{rot} \right). \quad (3)$$

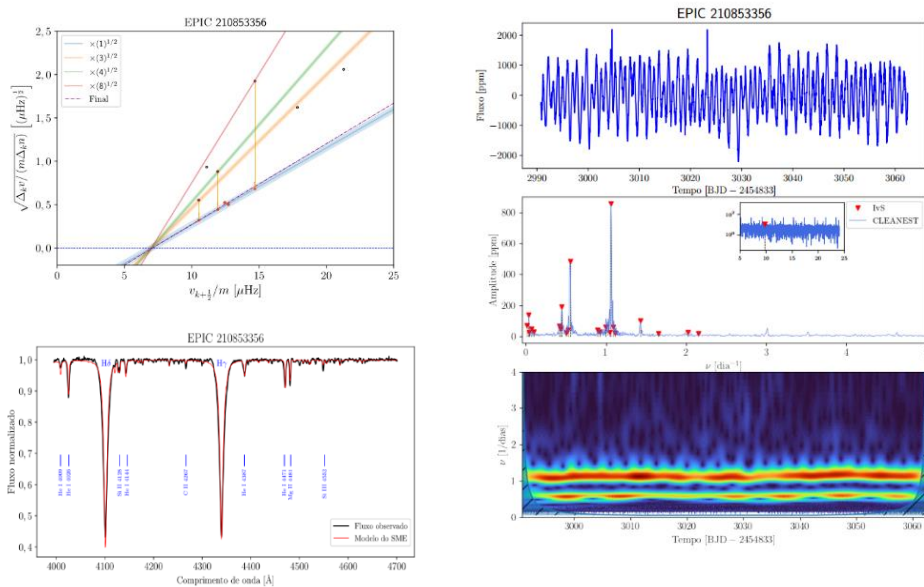
a  $[\nu_{rot}^{(i)} - \nu_{rot}^{(i+1)}]$  e  $[P_0^{(i)} - P_0^{(i+1)}]$ , em que  $k$  é um contador,  $\Delta_k \nu = \nu_{k+1} - \nu_k$  é a diferença entre as frequências e  $\nu_{k+\frac{1}{2}} = (\nu_k + \nu_{k+1})/2$ . Para os modos setoriais  $l = m > 0$ ,  $2\Omega_{core}/\omega_{nlm} > 1$  (frequência de pulsação angular na estrutura de coroa,  $\sqrt{\lambda_{m,m}(s)} \approx m$ . Os espectros na região azul (3900 a 4900 Å) foram obtidos a partir de observações terrestres no Observatório Pico dos Dias/Laboratório Nacional de Astrofísica (OPD/LNA) com o telescópio Perkin-Elmer de 1,6m e espectrógrafo Cassegrain. Outros alvos foram adquiridos pelo banco de dados do LAMOST. Os parâmetros estelares, como  $T_{eff}$ ,  $\log g$  e  $v \sin i$ , são obtidos através de modelos atmosféricos interpolados, com incertezas calculadas pelo método de Monte Carlo. O código evolutivo MESA é adotado com um modelo conservador de queima de hidrogênio no núcleo, sem considerar a rotação estelar. Os parâmetros estimados pelo SME são usados para calcular luminosidade, massa e raio de algumas estrelas.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

Nesta seção são apresentados os principais resultados para as estrelas do C13 da missão K2 por meio de representações gráficas e tabelas. O acervo gráfico auxilia na determinação da classificação em variabilidade estelar e classe espectral baseado na literatura. A Fig. (1) mostra o diagrama cor-magnitude confeccionado a partir dos dados provenientes do GAIA. A Fig. (2) aborda a estrela EPIC 210853356, que tem os seguintes resultados fotométricos:  $N_{tot} = 15$ ,  $\nu_{max} = 1,06 \pm 0,01 d^{-1}$ ,  $A_{max} = 855$  ppm,  $\nu_{rot} = 7,1 \pm 0,6 \mu\text{Hz}$  e  $P_0 = (8,7 \pm 0,8) \cdot 10^3 \text{s}$  de variabilidade SPB e resultados atmosféricos e evolutivos:  $T_{eff} = 13500 \pm 300 \text{K}$ ,  $\log g = 3,8 \pm 0,1$  (dex),  $v \sin i = 110 \pm 30 \text{ Km/s}$ ,  $\log(L/L_{\odot}) = 2,7_{-0,1}^{+0,2}$ ,  $M/M_{\odot} = 4,4_{-0,3}^{+0,5}$ ,  $R/R_{\odot} = 4,9_{-0,7}^{+0,8}$  e Idade =  $(84,9_{-30,7}^{+19,9}) \times 10^6$  anos, da classe B9V. A Tabela 1 mostra os resultados para cinco estrelas SPB analisadas de maneira sísmica. O diagrama Hertzsprung-Russel e a comparação entre as luminosidades do GAIA e do programa MESA são demonstradas na Fig. (3).



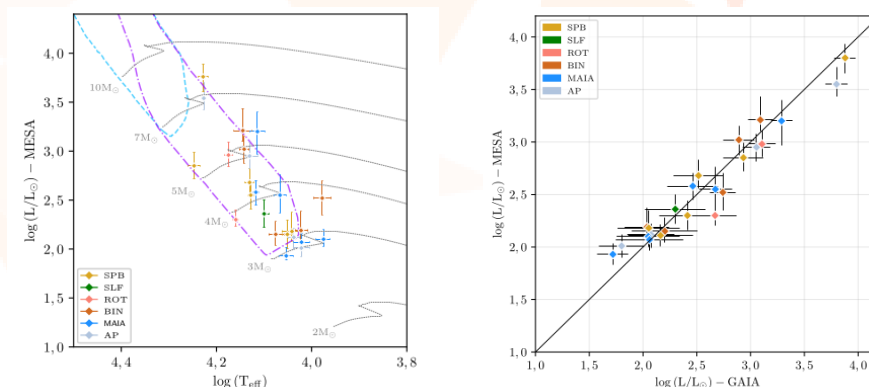
**Figura 1** – Diagrama de cor e magnitude do Gaia para estrelas B da C13. No retângulo são indicados os tipos de variabilidade das estrelas.



**Figura 2** – EPIC 210853356: Diagrama sísmico de frequências, espectro estelar na região do azul, curva de luz, espectro de frequências e mapa *Wavelet*.

**Tabela 1:** Estimativas de  $v_{rot}$  e  $P_0$  para as estrelas SPB do campo 13 da missão K2.

EPIC	$v_{rot}$ [ $\mu\text{Hz}$ ]	$v_{rot}$ [ $\text{dia}^{-1}$ ]	$P_0$ [ $10^3$ s]
210853356	$7,1 \pm 0,6$	$0,61 \pm 0,05$	$8,7 \pm 0,8$
247264203	$3,2 \pm 0,4$	$0,28 \pm 0,03$	$6,6 \pm 0,8$
247430338	$8,0 \pm 0,5$	$0,69 \pm 0,04$	$4,2 \pm 0,4$
248150769	$6,2 \pm 0,4$	$0,54 \pm 0,04$	$4,9 \pm 0,4$
248227339	$5,6 \pm 0,3$	$0,48 \pm 0,03$	$6,4 \pm 0,5$



**Figura 3** – À esquerda: diagrama H-R para estrelas com espectros na região do azul. Faixas de instabilidade:  $\beta$  Cep (azul claro) e SPB (roxo). À direita: comparação entre as luminosidades do GAIA e do MESA.

## CONCLUSÕES

Após analisar as 67 estrelas do C13, destacamos as classes de variabilidade, incluindo 9 SPB, 15 SPB/IGW, 2 SPB/BIN, 1 IGW (SLF), 3 ROT, 13 ROT/BIN, 1 ROT/SPB, 1 ROT/MAIA, 9 MAIA, 5 MAIA/IGW, e 7 AP. A obtenção de dados espectrais para 24 estrelas permitiu a determinação de parâmetros atmosféricos e evolutivos. A temperatura efetiva ( $T_{eff}$ ) desempenhou um papel crucial na separação das classes de variabilidade, e.g., MAIAS. A abordagem sísmica nas estrelas SPB resultou na obtenção de  $\nu_{rot}$  e  $P_0$  para 5 destes alvos. A classe IGW ou SLF se manifestou em várias estrelas de forma híbrida, e o mapa *Wavelet* desempenhou um papel fundamental na identificação das frequências proeminentes em relação ao tempo da amostra, contribuindo para uma compreensão mais profunda da variabilidade estelar.

## REFERÊNCIAS

- Aigrain, S.; Parviainen, H.; Pope, B. J. S. K2SC: flexible systematics correction and detrending of K2 light curves using Gaussian process regression. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 459, p. 2408–2419, jul. 2016.
- Balona, L. A. et. al, Kepler observations of the variability in B-type stars. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 413, p. 2403–2420, jun. 2011.
- Bowman, D. M. et al, Low-frequency gravity waves in blue supergiants revealed by high-precision space photometry. *Nature Astronomy*, v. 3, p. 760–765, ago. 2019.
- Foster, G., The cleanest Fourier spectrum. *The Astronomical Journal*, v. 109, p. 1889–1902, abr. 1995.
- Paxton, B. et. al., Modules for Experiments in Stellar Astrophysics (MESA). *The Astrophysical Journal Supplement Series*, v. 192, p. 3, jan. 2011.
- Takata, M. et. al, A diagnostic for  $\gamma$  Doradus variables and slowly pulsating B type stars. *Astronomy & Astrophysics*, v. 635, p. A106, fev. 2020..

## POINT AND LINE DEFECTS IN CHECKERBOARD PATTERNED HYBRID NEMATIC FILMS. A COMPUTER SIMULATION INVESTIGATION

M. Casaroto<sup>1,\*</sup>, C. Chiccoli<sup>2</sup>, L.R. Evangelista<sup>1</sup>, P. Pasini<sup>2</sup>, R. T. de Souza<sup>3</sup>, C. Zannoni<sup>4</sup> e

R.S. Zola<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

<sup>2</sup>Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Itália.

<sup>3</sup>Departamento Acadêmico de Física, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, UTFPR – Apucarana-PR, Brasil

<sup>4</sup>Dipartimento di Chimica Industriale “Toso Montanar”, Università di Bologna, Bologna, Itália.

\*Corresponding author’s email: [mariana.fcasaroto@gmail.com](mailto:mariana.fcasaroto@gmail.com)

We consider a nematic liquid crystal film confined to a flat cell with homeotropic and planar-patterned hybrid anchoring, similar to a chessboard pattern, with alternating square domains featuring uniform and random anchoring. By employing Monte Carlo simulations, it was feasible to demonstrate the system’s capability to stabilize line and point defects. Our results show that the interplay between domain size, anchoring conditions, and system size plays a crucial role in determining the types of defects that emerge. The simulations show only line defects when the individual domains are small enough, but also point defects when the domain size is significantly larger than the sample thickness. In the latter case, defect lines are not observed in domains with random surface anchoring, although lines and points are connected by a “thick line”, which separates two regions with different director tilt. These findings can be valuable for designing and manipulating liquid crystal systems for various applications, from displays to advanced materials.

### THE SIMULATION MODEL

We considered a nematic liquid crystal film confined to a flat cell with homeotropic and planar-patterned hybrid anchoring. The bottom surface pattern can be seen as a chessboard-shaped grid with arbitrary  $n \times n$  domains, where  $n > 2$  and is even, with alternating square domains featuring uniform and random anchoring, respectively. This simulated patterned surface provides both planar degenerate and uniform alignment side by side. The simulation was done using a set of headless spins  $N + N_S$  placed at the sites of a cubic lattice of dimensions  $L \times L \times (h+2)$ , mimicking a square film with thickness  $h$  confined between those two flat boundary layers. Let the orientation of the  $i$ -th spin be as:

$$\mathbf{u}_i = u_{ix}\hat{x} + u_{iy}\hat{y} + u_{iz}\hat{z}, \quad (1)$$

The Hamiltonian of this system is given by

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \in I \\ i \neq j}} \Phi_{ij} + J_{bot} \sum_{\substack{i \in B \\ j \in S_{bot}}} \Phi_{ij} + J_{top} \sum_{\substack{i \in B \\ j \in S_{top}}} \Phi_{ij}, \quad (2)$$

where the parameters  $J_{bot}$  and  $J_{top}$  model the anchoring strength at the bottom and top surfaces. The attractive pair potential  $\Phi_{ij}$  is the Gruhn–Hess–Romano–Luckhurst one

$$\begin{aligned} \Phi_{ij} = \epsilon_{ij} \{ & \lambda [P_2(\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{s}_{ij}) + P_2(\mathbf{u}_j \cdot \mathbf{s}_{ij})] \\ & + \mu [(\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{s}_{ij})(\mathbf{u}_j \cdot \mathbf{s}_{ij})(\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_j) - 1/9] \\ & + \nu P_2(\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_j) + \rho [P_2(\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{s}_{ij}) + P_2(\mathbf{u}_j \cdot \mathbf{s}_{ij})] P_2(\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_j) \}, \end{aligned} \quad (3)$$

with the strength of the pair interaction  $\epsilon_{ij} = \epsilon$  if  $i$  and  $j$  are nearest neighbors, and 0 otherwise. Simulations are performed at a reduced temperature  $T_R = k_B T / \epsilon$ ;  $k_B$  is the Boltzmann constant and  $T$  is the absolute temperature. The potential parameters are a combination of the Frank elastic constants, Splay, Twist and Bend,  $K_1 = 7.0$ ,  $K_2 = 4.4$ ,  $K_3 = 9.7$ , respectively, and are written as:

$$\lambda = \frac{1}{3} \Lambda (2K_1 - 3K_2 + K_3) \quad (4a)$$

$$\mu = 3\Lambda (K_2 - K_1) \quad (4b)$$

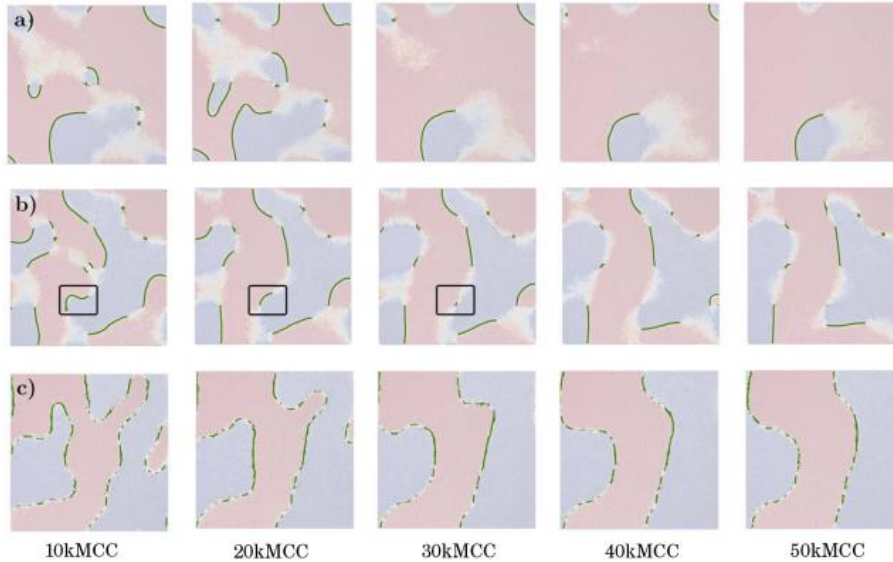
$$\nu = \frac{1}{3} \Lambda (K_1 - 3K_2 - K_3) \quad (4c)$$

$$\rho = \frac{1}{3} \Lambda (K_1 - K_3) \quad (4d)$$

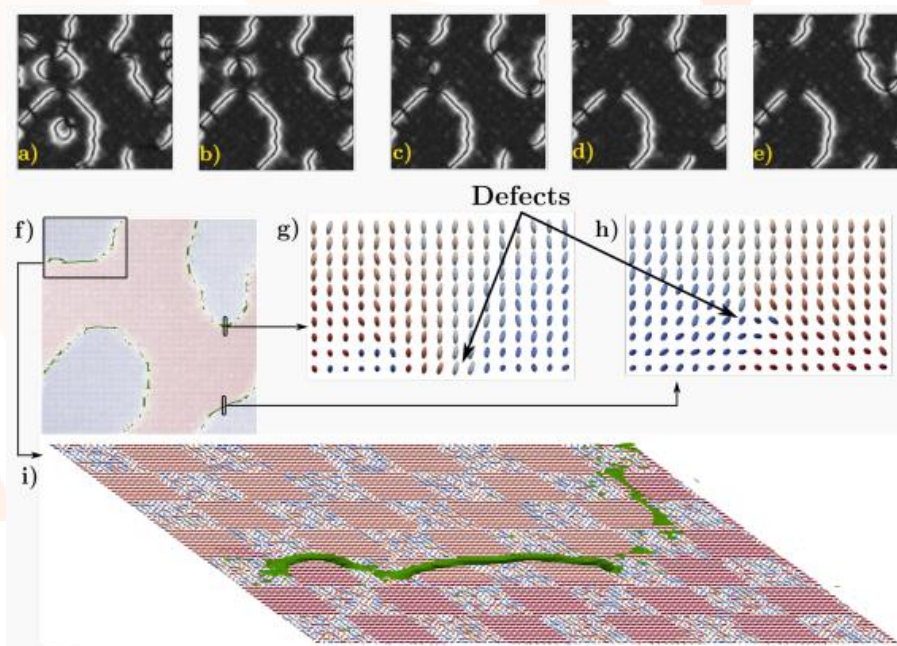
where  $\Lambda$  is a length related to the dimension of the unit cell, and  $\mathbf{s}_{ij} = \mathbf{r}/|\mathbf{r}|$ ,  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ , with  $\mathbf{r}_i$ ,  $\mathbf{r}_j$  the position vectors of the  $i$ -th and  $j$ -th lattice points. Finally,  $P_2$  is the well known second rank Legendre polynomial.

## RESULTS

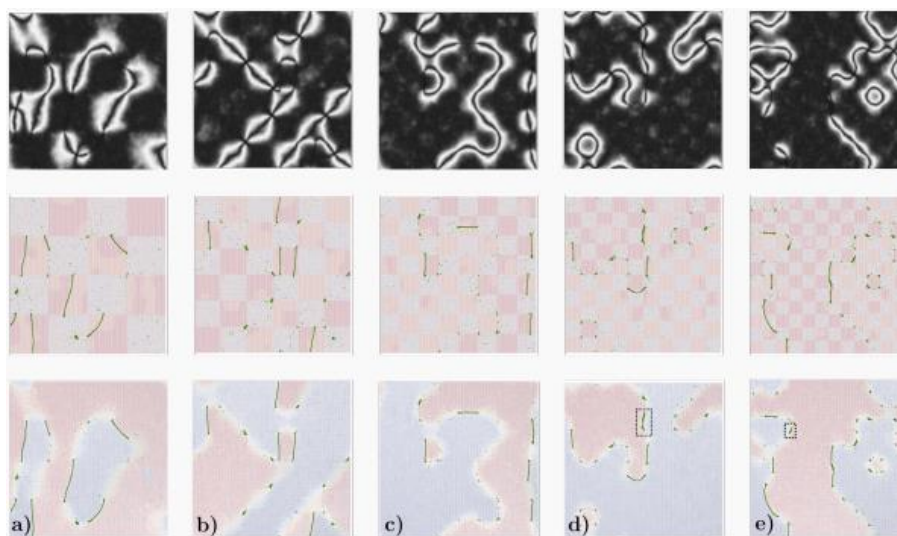
MC evolution for samples with  $J_{bot} = J_{sup} = 0.5$  and  $n = 2$  (a), 4 (b) and 12 (c) showing how defect lines relax after 10, 20, 30, 40, 50 kMCC and, eventually, vanish.



Evolution of the sample with  $J_{bot} = 0.7$  and  $J_{sup} = 0.5$  and  $n = 24$  from 10 kMCC (a) to 50 kMCC (e) in steps of 10 kMCC. In (f), the snapshot of the fifth layer of free spins above the patterned surface. The regions marked by dotted lines in (f), showing the defect positions are shown in (g) and (h). In (i) we show a 3D view of the order isosurface for the small region marked in the top left of (f) showing how some defects leave the surface plane, while others still lie on it.



The effects of the size domain on the position of the defect line for  $n = 4$  (a), 6 (b), 8 (c), 10 (d) and 12 (e), with  $J_{bot} = 0.7$  and  $J_{sup} = 0.5$ . Defects completely placed on the surface as, for instance, those marked in the last line, are observed in d) and e), although in all values, the small line in the domain corner is also placed in the surface. Defects placed above the surface, in the bulk, are observed in all the values of  $n$ .



## DISCUSSION AND CONCLUDING REMARKS

By employing Monte Carlo simulations, we have been able to demonstrate the system's capability to stabilize line and point defects. We have observed that the interplay between domain size, anchoring conditions, and system size plays a crucial role in determining the types of defects that emerge. For smaller domain sizes (up to  $40 \times 40$  spins), point defects with a topological charge  $\pm 1/2$  can be observed alongside line defects, whereas for larger domains, we only observe line defects at the

domain corners. Point defects tend to annihilate in pairs or move towards regions with uniform alignment anchoring. Line defects, on the other hand, tend to persist for longer simulation times and can even close themselves to annihilation. The anchoring strength on the bottom surface has a significant influence on the behavior of the defect. Stronger anchoring leads to the formation of defect lines deeper in the bulk of the system, rather than just at the surface. These deeper defects are characterized by being located several layers above the surface and can be connected to surface-aligned domains.

In conclusion, our extensive simulations of liquid crystal systems within different domain sizes and anchoring strengths have provided valuable insights into the formation and behavior of topological defects. In particular, our findings give us a clear picture of how defects form and behave in liquid crystal systems, helping us to understand how different factors influence defect behavior. These findings can be valuable for designing and manipulating liquid crystal systems for various applications, from displays to advanced materials.



## ESTUDO DA INTERAÇÃO DO 2OHAO COM LIPOSSOMAS DE POPC POR ESPECTROSCOPIA RAMAN

M.W.C. Silva<sup>\*1</sup>, S.H.A. Domingues<sup>1</sup>, H. Santos<sup>1</sup>, A.N. Medina<sup>1</sup>, F. Sato<sup>1</sup>, K. Brunaldi<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

<sup>2</sup>Departamento de Ciências Fisiológicas, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

\*Corresponding author's email: [mwcrisostomo@gmail.com](mailto:mwcrisostomo@gmail.com)

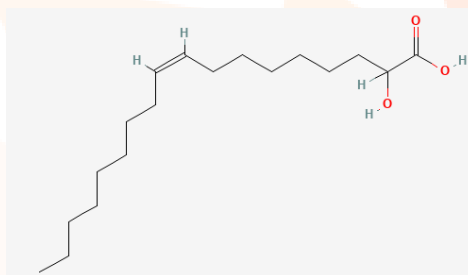
**Palavras-chave:** Bicamada lipídica; Minerval; Fluidez de membrana.

O ácido 2 $\alpha$ -hidroxiloléico (2OHAO) é uma alternativa promissora ao tratamento do glioblastoma multiforme humano (GBM), um tumor cerebral incurável. O 2OHAO promove alterações na composição lipídica da membrana celular, que impactam na sua fluidez. Entretanto, ainda não está esclarecido se tal efeito ocorre devido à interação direta do 2OHAO com os componentes lipídicos da membrana celular. Portanto, o objetivo deste trabalho foi investigar a interação do 2OHAO com a bicamada lipídica de lipossomas por espectroscopia Confocal Raman. Lipossomas de palmitoil-oleoil-fosfatidilcolina (POPC) do tipo LUV (*large unilamellar vesicles*) foram formados pelo método de filme fino seguido de extrusão. Os espectros Raman foram obtidos por meio de um microscópio Raman Confocal (laser de 532 nm e 20 mW de potência). Para tal, 1  $\mu$ L da suspensão de LUV foi depositada e evaporada sobre uma lâmina de ouro, levando a formação de um anel regular. Apenas os espectros obtidos na borda do anel apresentaram as 5 bandas características do POPC. Na presença de 2OHAO foi observado: aumento na intensidade em 1654  $\text{cm}^{-1}$  (estiramento C=C, banda IV), atribuído à cadeia insaturada do 2OHAO; e pequenos deslocamentos nas frequências de estiramento simétrico do CH<sub>3</sub> e assimétrico do CH<sub>2</sub> (banda V). As razões de intensidade CH<sub>terminal</sub>/CH<sub>assimétrica</sub> e CH<sub>terminal</sub>/CH<sub>simétrica</sub> (banda V) sugerem diminuição na desordem e liberdade rotacional da bicamada lipídica, e aumento na interação intramolecular e intermolecular (empacotamento dos fosfolipídios). Conjuntamente, os nossos resultados apontam para um efeito redutor de fluidez de membrana em decorrência da interação direta do 2OHAO com os fosfolipídios.

### INTRODUÇÃO

O ácido 2 $\alpha$ -hidroxiloléico (2OHAO – Minerval<sup>®</sup>; Figura 1) é uma alternativa promissora ao tratamento do glioblastoma multiforme humano (GBM), um tumor cerebral incurável. O 2OHAO aumenta o conteúdo de esfingomielina na membrana celular, modulando a fluidez de membrana e a atividade de proteínas de membrana envolvidas na proliferação celular [1].

No entanto, é desconhecido o papel da interação direta do 2OHAO com os componentes lipídicos da membrana celular na fluidez de membrana. Portanto, o objetivo deste trabalho foi avaliar a interação do 2OHAO com lipossomas livres de proteínas por espectroscopia Raman Confocal.



**Figura 1** - Estrutura do ácido 2OHOA; Retirado de PubChem.

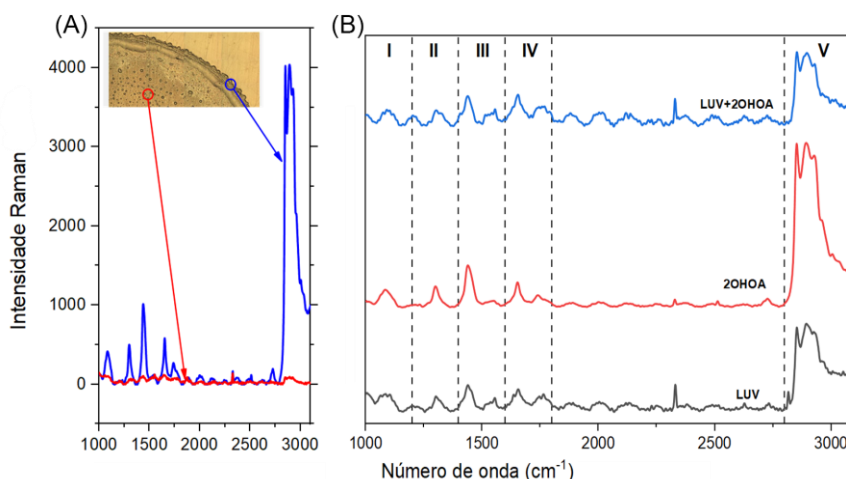
## MATERIAIS E MÉTODOS

### Preparação de lipossomas do tipo LUV e da solução de 2OHAO

Lipossomas do tipo LUV (*large unilamellar vesicles*) de POPC (palmitoil-oleoil-fosfatidilcolina) foram formadas pelo método do filme fino seguido por extrusão [2]. A solução tampão utilizada foi trizma 25 mM e KCl 150 mM (pH 7,4). A solução estoque de 2OHAO (sal sódico) foi preparada em KOH 1 M na concentração de 56 mM.

### Espectroscopia Raman

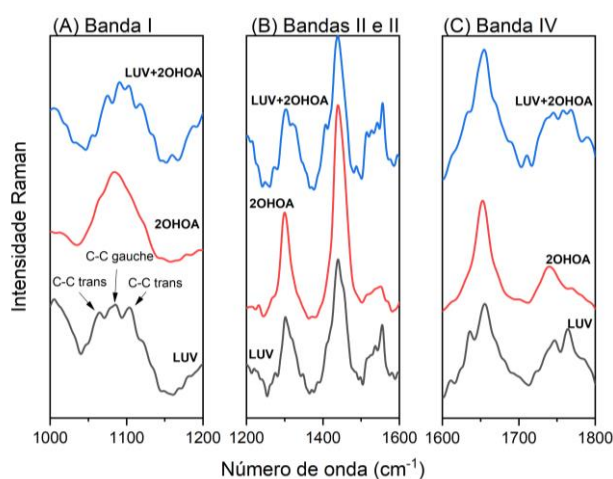
Uma alíquota de 1  $\mu\text{L}$  da suspensão de LUV, depositada em uma lâmina de ouro polido, foi evaporada à temperatura ambiente por 20 minutos, levando a formação de um anel regular. Espectros Raman dentro e no anel foram obtidos utilizando-se um microscópio Raman Confocal modelo Senterra (Bruker Optik GmbH, Ettling, DEU) equipado com um laser de 532 nm e potência nominal de 20 mW e uma lente de magnificação de 20x. A resolução espectral foi de 9 a 15  $\text{cm}^{-1}$ , no intervalo de 4000 a 400  $\text{cm}^{-1}$ . Os registros apresentados compreendem uma média de 10 espectros e com tempo de integração do detector de 5 segundos. Os espectros foram normalizados por meio do vetor de normalização.



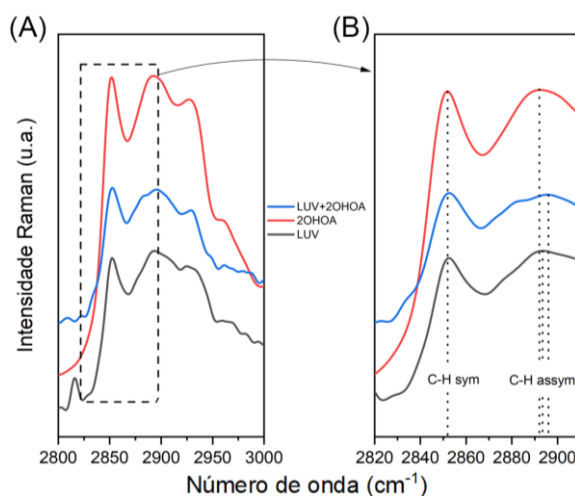
**Figura 2** - (A) Espectros Raman da região central (vermelho) e borda (azul) do anel resultante da suspensão de LUV evaporada na superfície de uma lâmina de ouro. Concentração de POPC de 1mM. (B) Espectros Raman de uma mesma preparação de LUV (POPC de 0,1 mM) antes e após a adição de 2OHAO (0,38 mM), destacando as bandas I (1000 a 1200  $\text{cm}^{-1}$ ), II (1300 a 1400  $\text{cm}^{-1}$ ), III (1440 a 1600  $\text{cm}^{-1}$ ), banda IV (1650 a 1800  $\text{cm}^{-1}$ ) e V (2800 a 3100  $\text{cm}^{-1}$ ). O espectro Raman do sal sódico no estado sólido do 2OHAO é também apresentado.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

Como apresentado na Figura 1, a evaporação da suspensão de LUV resultou na formação de um anel regular com um espectro Raman característico para o POPC (5 bandas) na borda. Os espectros do 2OHAO e do POPC (LUV) devem-se à presença da cadeia hidrocarbônica, sendo o “*fingerprint*” destas moléculas (lipídios) as regiões  $1500\text{--}1400\text{ cm}^{-1}$  (vibração tesoura dos  $\text{CH}_2$ ),  $1300\text{--}1250\text{ cm}^{-1}$  (deformação dos  $\text{CH}_3$ ) e  $1200\text{--}1050\text{ cm}^{-1}$  (estiramento C-H). Além disso, são observadas bandas na faixa de  $\sim 3100\text{--}2800\text{ cm}^{-1}$  correspondentes ao estiramento C-H [3,4]. Nas Figuras 3 e 4 são apresentadas as bandas Raman do POPC em maior detalhamento. As bandas I, II e III não foram afetadas pela incorporação de 2OHAO as LUV. A análise das bandas IV e V indicam mudanças estruturais na bicamada lipídica. Observamos aumento na intensidade a  $1654\text{ cm}^{-1}$  (estiramento  $\text{C}=\text{C}$ ) atribuído à presença da cadeia insaturada do 2OHAO na membrana; e pequenos deslocamentos nas frequências de estiramento simétrico do  $\text{CH}_3$  (de  $2925$  para  $2930\text{ cm}^{-1}$ ) e assimétrico do  $\text{CH}_2$  (de  $2893$  para  $2896\text{ cm}^{-1}$ ). As razões de intensidade  $\text{CH}_{\text{terminal}}/\text{CH}_{\text{assimétrica}}$  e  $\text{CH}_{\text{terminal}}/\text{CH}_{\text{simétrica}}$ , marcadores de mudanças conformacionais na cadeia sn-1, sugerem diminuição na desordem e liberdade rotacional da bicamada lipídica, e aumento na interação intramolecular e intermolecular (empacotamento das cadeias dos fosfolipídios).



**Figura 3** – Bandas I, II, III e IV do espectro Raman do POPC e os modos vibracionais correspondentes.



**Figura 4** – (A) Efeito do 2OHAO na banda V e (B) aproximação dos picos.

**Tabela 1** - Razões entre os picos da região V para LUV antes e depois da adição do ácido.

	LUV	LUV+2OHOA	2OHOA
CH <sub>terminal</sub> /CH <sub>assimétrica</sub>	0,84	0,55	0,93
CH <sub>terminal</sub> /CH <sub>simétrica</sub>	0,89	0,63	0,95

## CONCLUSÕES

Os nossos resultados apontam para um efeito redutor de fluidez da bicamada lipídica pelo 2OHAO dado por uma interação direta com os fosfolipídios. Esses achados tem potenciais aplicações clínicas do 2OHAO no tratamento do GBM, explorando sua capacidade de afetar a fluidez da membrana de maneira direta e controlada.

## AGRADECIMENTOS

Ao CNPq, a UEM e ao grupo de pesquisa GEOPT pelo incentivo à pesquisa e concessão da bolsa de iniciação científica.

## REFERÊNCIAS

- [1] BRUNALDI, Kellen et al. Fluorescence assays for measuring fatty acid binding and transport through membranes. *Methods in Membrane Lipids*, p. 237-255, 2007.
- [2] GIANCASPRO, Joseph et al. Structural determination of model phospholipid membranes by Raman spectroscopy: Laboratory experiment. *Biochemistry and Molecular Biology Education*, v. 50, n. 2, p. 181-192, 2022.
- [3] MARTIN, M. L.; LIEBISCH, G.; et al. Sustained activation of sphingomyelin synthase by 2-hydroxyoleic acid induces sphingolipidosis in tumor cells.” *Journal of Lipid Research*, v. 54, p. 1457-1465. 2013.
- [4] National Center for Biotechnology Information. PubChem Compound Summary for CID 9796304, 2-Hydroxyoleic acid. <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/2-Hydroxyoleic-acid>. Accessed Nov. 3, 2023.

## SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO LUMINESCENTE DE VIDROS SÓDIO CÁLCIO SILICA DOPADOS COM EURÓPIO TRIVALENTE DE ALTA EMISSÃO

L.C. Granatto<sup>\*1</sup>, M.S. Gibin<sup>1</sup>, B.S. Greatti<sup>1</sup>, M.M. Travain<sup>1</sup>, G.O. Marino<sup>1</sup>, J.G.B. Vedovelli<sup>1</sup>, J.W. Berrar<sup>1</sup>, R.F. Muniz<sup>2</sup>, V.S. Zanuto<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

<sup>2</sup>Departamento de Ciências, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Goioerê-PR, Brasil.

\*Corresponding author's email: [lcgranatto@gmail.com](mailto:lcgranatto@gmail.com)

**Palavras-chave:** SCS; Eu<sup>3+</sup>; Luminescência.

Neste trabalho foi realizado a síntese e a caracterização de vidros Sódio Cálcio Silica (SCS) dopados com o íon trivalente Európio por meio de um processo de fusão e resfriamento à ar, em que foram escolhidas diferentes concentrações a fim de obter a relação entre a concentração e as medidas realizadas nas amostras. Foi utilizado um espectrofotômetro para obter as curvas de absorção presentes no vidro dopado a fim de confirmar a presença do dopante na matriz. A técnica de luminescência foi utilizada à fim de obter as curvas de emissão associadas ao íon, observando uma clara relação entre o aumento da concentração das amostras e o aumento do sinal das bandas de emissão.

### INTRODUÇÃO

A produção de novos materiais para seu uso como componentes ativos de lasers, dispositivos fotônicos (amplificadores e switches ópticas, por exemplo), dispositivos para iluminação artificial e displays coloridos de alto contraste, são atualmente uma das principais linhas de pesquisa no campo da física e desenvolvimento de materiais [1-3]. Em particular, sistemas que fluorescem na região do infravermelho são de grande interesse para aplicações nas áreas de comunicação óptica e biomedicina, enquanto aqueles que fluorescem na região visível do espectro eletromagnético tem sido amplamente estudado para fins de imagem. Neste contexto, o estudo de matrizes vítreas dopadas com metais terras-raras tem atraído a atenção da comunidade científica, por conta de diversos fatores, como a facilidade de preparação do material, redução em custos de produção, alta solubilidade de íons terras-raras em algumas matrizes vítreas, larga janela de transmissão óptica, resistência de choque térmico, alta eficiência quântica, etc.

Recentemente, nós estudamos os sistemas vítreos Sódio Cálcio Silica (SCS), com diferentes composições e dopados Com Nd<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, que demonstrou propriedades mecânicas, térmicas, termo-ópticas e espectroscópicas superiores à outros vidros comercialmente utilizados.

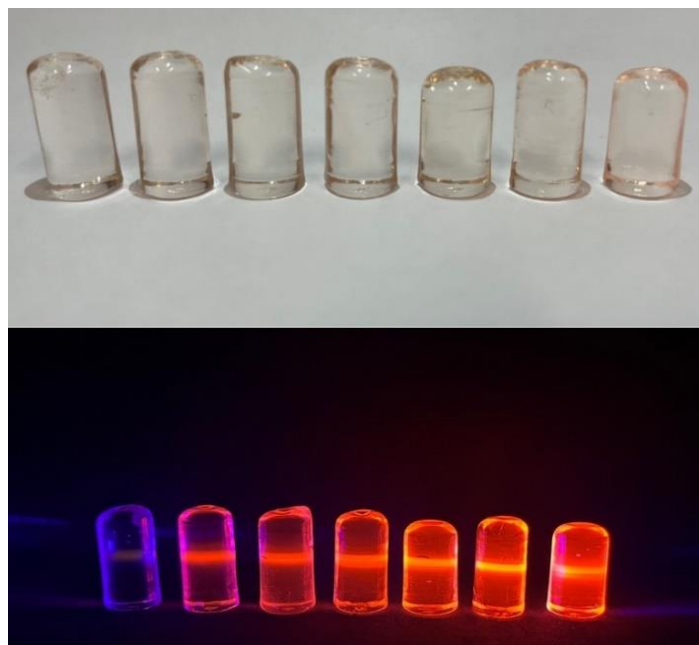
Neste trabalho, nós continuamos os estudos visando a produção de materiais com alta emissão na região visível, em particulas sistemas dopados com Eu. Para a caracterização, técnicas foto térmicas

e termo-ópticas vão ser utilizadas para determinar as propriedades térmicas, ópticas e termo-ópticas como uma função da concentração e temperatura. Porém parte das características espectroscópicas do material estão sendo estudadas utilizando espectroscopia óptica (UV-VIS-IR) e espectroscopia de emissão. Baseado nos resultados desta fase, realizaremos estudos na viabilidade da utilização destes materiais para a produção de luz artificial e displays.

## MATERIAIS E MÉTODOS

Os vidros foram sintetizados utilizando o método de melting-quenching no forno comercial Mufla 3000 10 da EDG. Os reagentes foram pesados, homogeneizados e postos num cadinho de Platina e subsequentemente fundidos. A temperatura de fusão era de 1200 °C. Depois de duas horas de fusão, o eutético fundido foi despejado do cadinho em um molde de aço inox pré-aquecido à uma temperatura de 400 °C, provocando um resfriamento rápido.

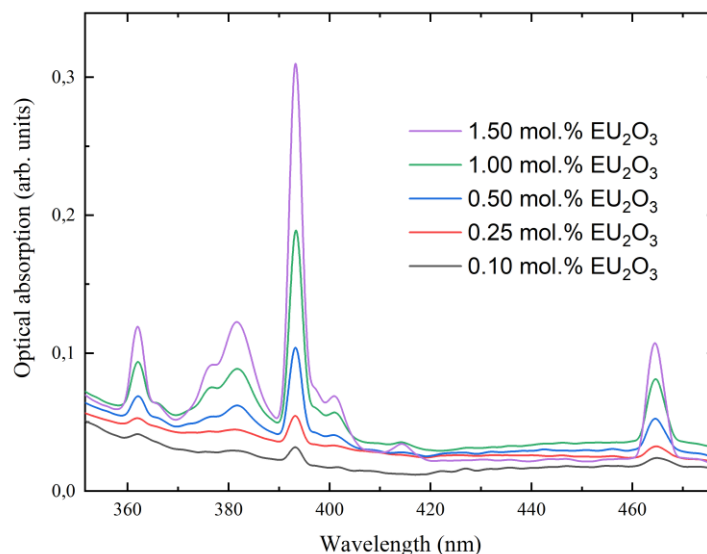
As amostras foram devidamente cortadas e polidas, sendo elas apresentadas na Figura 1.



**Figura 1** - Amostras de SCS dopadas com Eu utilizadas no trabalho, demonstrando uma maior emissão no visível de acordo com o aumento da concentração do dopante.

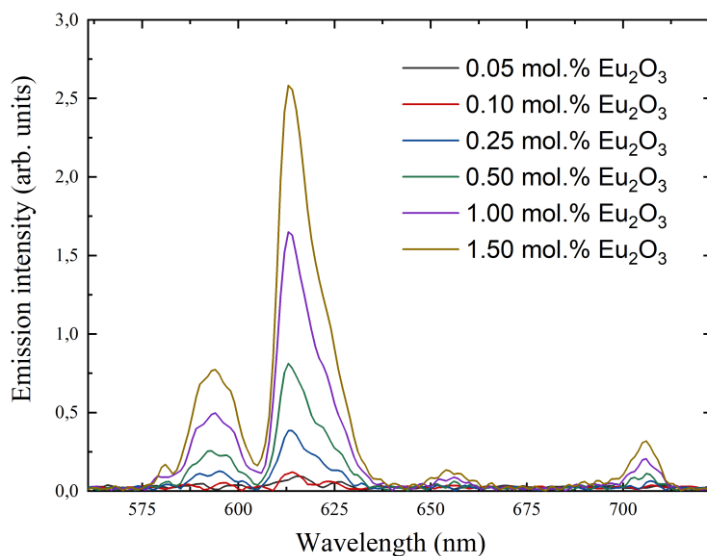
## RESULTADOS E DISCUSSÃO

Primeiramente foi realizada a caracterização das amostras a partir de espectroscopia óptica (UV-VIS-IR), obtendo diferentes curvas de acordo com a concentração das amostras, mostrada na Figura 2.



**Figura 3** – Absorção óptica das amostras em função do comprimento de onda.

Na Figura 2 podemos notar os picos característicos próximos 365 nm, 385 nm, 395 nm e 465 nm, é claro notar que com um aumento da concentração há também um aumento do sinal de absorção das amostras.



**Figura 4** – Intensidade de emissão das amostras em função do comprimento de onda.

Na Figura 3, observamos duas bandas principais, a primeira em torno de 575 nm e 600 nm e a segunda entre 605 nm e 630 nm, novamente é possível observar a dependência da intensidade do sinal de acordo com o aumento da concentração do dopante.

## CONCLUSÕES

Em conclusão, as amostras de Sódio Cálcio e Silica dopados com o íon trivalente Európio foram preparadas com uma qualidade óptica excelente. As amostras demonstraram baixos valores de

absorção, o que já é esperado das transições do tipo 4f-4f. Entretanto, elas demonstram uma emissão intensa no vermelho, quando comparadas com outros materiais vítreos, também dopados com Európio. Ainda assim, as amostras se demonstraram bons candidatos para a utilização em iluminação artificial e displays, necessitando um estudo ainda mais aprofundado em suas propriedades.

## REFERÊNCIAS

- [1] S. Pravinraj et al., Phys. B Condens. Matter, 509 (2017), pp. 84-93, 10.1016/j.physb.2017.01.008.
- [2] H. Fu et al., Mater. Lett., 71 (2012), pp. 15-17, 10.1016/j.matlet.2011.12.004.
- [3] C.R. Kesavulu et al., Ceram. Int., 44 (2018), pp. 1737-1743, 10.1016/j.ceramint.2017.10.105.



## EFEITO DO TRATAMENTO TÉRMICO EM ALTAS PRESSÕES NAS PROPRIEDADES LUMINESCENTES DE VIDROS E CERÂMICAS DE SILICATO DE CÁLCIO E SÓDIO DOPADOS COM TERRAS RARAS

G.T. Tel<sup>\*1</sup>, A.N. Medina<sup>1</sup>, V.S. Zanuto<sup>1</sup>, R.F. Muniz<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

<sup>2</sup>Departamento de Ciências, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Goioerê-PR, Brasil.

\*Corresponding author's email: [guilherme.tel1996@gmail.com](mailto:guilherme.tel1996@gmail.com)

**Palavras-chave:** Vidro; Altas pressões; Luminescência.

O presente trabalho estudou as alterações nas propriedades luminescentes de vidros e cerâmicas de silicato de cálcio e sódio (SCS) dopados com terras raras, quando submetidas a tratamentos térmicos sob pressão ambiente e sob 7,7GPa. Foram preparadas amostras da matriz SCS sem dopante, dopada com európio, itérbio, neodímio. As amostras foram submetidas à tratamentos em 550°C e 665°C por uma hora, tanto nos procedimentos sob pressão ambiente, quanto sob alta pressão. Análises de DRX tornaram possível identificar a presença de uma fase romboédrica R-3m, solução sólida de  $\text{Na}_{4+2x}\text{Ca}_{4-x}[\text{Si}_6\text{O}_{18}]$  com  $X \geq 0,5$ , cujos parâmetros de rede se contraíram durante o tratamento sob pressão. Os dados obtidos por espectroscopia Raman revelam informações sobre as ligações presentes nas amostras, como as ligações Si-O-Si e as ligações formadas nos tetraedros de silício e oxigênio não ligados (NBO). Alterações observadas nas intensidades dos espectros Raman corroboram com as informações obtidas por DRX. O espectro de absorção óptica foi obtido a fim de identificar os níveis de energia dos dopantes, pela superposição observada entre o nível  $^4\text{F}_{3/2}$  do  $\text{Nd}^{3+}$  e do nível  $^2\text{F}_{5/2}$  do  $\text{Yb}^{3+}$ , pode-se concluir que um sistema co-dopado com esses é um excelente candidato a apresentar alta eficiência de transferência de energia. Os espectros de luminescência observados revelam os efeitos dos tratamentos nos campos cristalinos das matrizes, sendo possível notar alterações na simetria das amostras devido a alterações nas bandas de emissão dos dopantes. Uma análise do tempo de vida do neodímio revela que o tempo de vida desse diminui quando o itérbio está presente na matriz, indicando que há transferência de energia do neodímio para o itérbio. Por fim, ao calcular a eficiência de transferência de energia, observa-se que a eficiência aumenta quando a amostra passa por tratamento térmico e aumenta ainda mais quando submetida a tratamento térmico sob pressão.

### INTRODUÇÃO

Materiais vítreos são alvos de pesquisas há décadas, isso se deve tanto pelas suas diversas propriedades, quanto por suas aplicações. É de se esperar que as propriedades sejam diferentes para cada composição vítrea, entretanto, alterar os componentes do material não é a única forma de alterar as propriedades de um vidro, por exemplo: uma mesma amostra pode apresentar qualidades ópticas diferentes antes e depois de ser submetida a um tratamento térmico. O tratamento térmico pode alterar consideravelmente a estrutura do vidro, causando a sua cristalização parcial ou total, levando-o de

um material com estrutura desordenada, para um com a estrutura ordenada, ou seja, cristalina. O novo material formado é chamado cerâmica [1], podendo ser formada por uma ou mais fases.

O objetivo do presente trabalho é investigar como a introdução de alta pressão no processo de cristalização pode afetar as propriedades estruturais e espectroscópicas da cerâmica formada a partir de vidros de silicato de cálcio e sódio (SCS) dopados com elementos terras raras, como európio, neodímio e itérbio.

## MATERIAIS E MÉTODOS

As propriedades estruturais das amostras vítreas, cristalizadas e cristalizadas sob alta pressão foram investigadas empregando-se a técnica de difratometria de raios-X (DRX), sendo essa utilizada para identificar as fases cristalinas formadas e determinar seus parâmetros de rede.

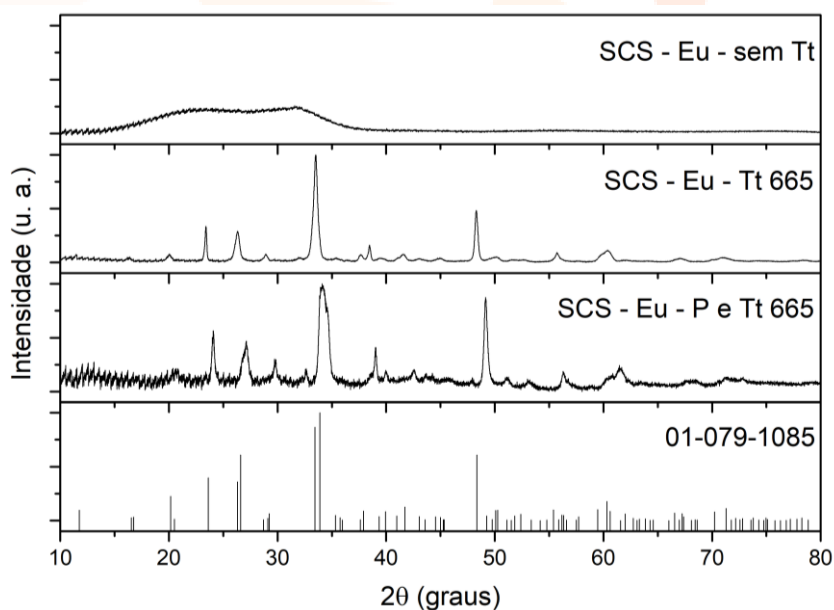
As propriedades espectroscópicas foram analisadas por absorção óptica (UV-vis-NIR), luminescência e tempo de vida de emissão. A partir das alterações nas intensidades relativas dos picos dos espectros de luminescência foi possível verificar o efeito dos tratamentos aplicados nas amostras. Pelo espectro de luminescência, escolheu-se o comprimento de onda relacionado a uma emissão do terra rara desejado, o qual foi escolhido para determinar alterações no tempo de vida de decaimento da luminescência em razão dos tratamentos.

Por fim, graças aos dados de tempo de vida obtidos para amostras dopadas com neodímio e itérbio e co-dopadas com os mesmos, realizou-se o cálculo da eficiência de transferência de energia no sistema.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

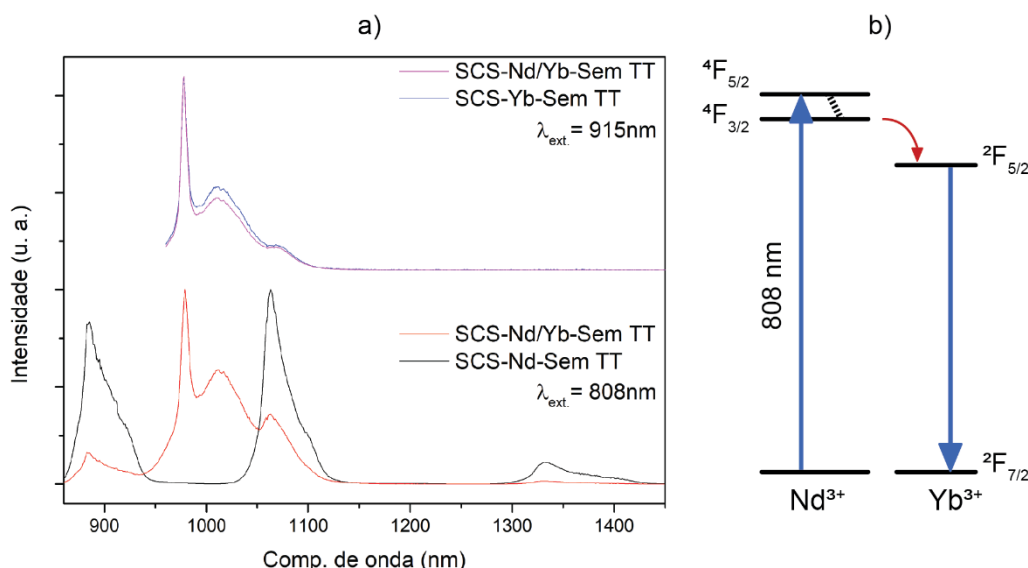
Os difratogramas das amostras sem tratamentos não apresentam formação de nenhum pico característico de fase cristalina, apenas um halo de difração, característico de materiais amorfos, logo, pode-se concluir que as amostras estão vítreas. Já os difratogramas das amostras tratadas em 665°C durante 1 hora, em pressão ambiente e pressão de 7,7GPa, contém picos característicos de uma amostra cristalizada, tais picos, a Figura 1 apresenta os difratogramas das amostras de SCS dopado com európio (SCS-Eu) e seus respectivos tratamentos, assim como os picos da referência 01-079-1085, encontrada no banco de dados de estruturas cristalinas inorgânicas (ICSD).

Com base na literatura e análise da estrutura formada, pode-se determinar a presença de uma fase romboédrica R-3m, solução sólida de  $\text{Na}_{4+2x}\text{Ca}_{4-x}[\text{Si}_6\text{O}_{18}]$  com  $x \geq 0,5$  [2,3], cujos parâmetros de rede se contraem durante o tratamento sob pressão.



**Figura 1** – DRX das amostras de SCS – Eu e 01-079-1085.

A seguir, foram comparados os espectros dos materiais dopados com Nd e com Yb e o material co-dopado, tais espectros estão mostrados na Figura 2-a). Ao se analisar os espectros das amostras SCS-Yb e SCS-Nd/Yb excitadas com o comprimento de onda 915nm, é possível observar apenas a luminescência do Yb, enquanto os espectros de SCS-Nd e SCS-Nd/Yb excitados por 808nm além de apresentarem os picos associados ao neodímio, a amostra co-dopada contém os picos de emissão do itérbio, mesmo com esse não apresentando banda de absorção para o comprimento de onda 808nm. A luminescência do Yb pode ser justificada pelo mecanismo de transferência de energia dos íons excitados  $\text{Nd}^{3+}$  para os íons de itérbio,  ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4F_{5/2}$ , Figura 2-b).



**Figura 2** – a) Luminescências de Nd, Yb e Yb; b) Transferência de energia do Nd para Yb.

O tempo de vida foi medido para as amostras dopadas com neodímio e co-dopadas com Nd/Yb, com isso foi possível identificar o tempo de decaimento das emissões do neodímio nas diferentes amostras, para isso, o neodímio foi excitado em 808nm e investigou-se o tempo necessário para a intensidade de emissão do comprimento de onda selecionado, 1325nm, decair. A Tabela 1 apresenta os tempos de vida obtidos para cada amostra.

**Tabela 2.** Tempos de vida as amostras.

Amostra	Tempo de vida médio (ms $\pm$ 5%)
SCS - Nd – sem Tt	0,461
SCS - Nd –Tt 665	0,917
SCS – Nd/Yb – sem Tt	0,326
SCS - Nd/Yb –Tt 665	0,358
SCS - Nd/Yb – P e Tt 665	0,224

## CONCLUSÕES

O presente trabalho visou estudar as características estruturais e espectroscópicas de cerâmicas e vidros SCS, sem dopantes, dopado com európio, neodímio, itérbio e co-dopado com Nd e Yb.

Para as amostras cristalizadas pode-se encontrar a formação de uma solução sólida cristalina do tipo  $\text{Na}_{4+2x}\text{Ca}_{4-x}[\text{Si}_6\text{O}_{18}]$ , com  $x > 0,5$ , com estrutura romboédrica (R-3m), a qual se mantém, porém, compactada para a amostra cristalizada sob alta pressão. A luminescência das amostras tratadas revela espectros diferentes dos obtidos para as amostras vítreas, devido a alterações de simetria na rede cristalina. O tempo de vida observado para essas amostras apresenta uma diminuição do tempo de vida do neodímio na presença do itérbio, apontando para uma transferência de energia do  $\text{Nd}^{3+}$  para o  $\text{Yb}^{3+}$  (*down-conversion*), fenômeno que se intensifica ao cristalizar a amostra e ainda mais ao cristalizá-la sob alta pressão. A eficiência de transferência de energia da amostra co-dopada é de 29%, 61% e 75%, para as amostras sem tratamento, cristalizada e cristalizada sob 7,7GPa, respectivamente.

## REFERÊNCIAS

- [1] CALLISTER, W. D.; RETHWISCH, D. G. Ciência e engenharia de materiais: uma introdução. 9. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2018.
- [2] SILVEIRA, R. A. da; EVARISTO, L. de L.; FAITA, F. L.; BUCHNER, S. Effect of high pressure and high temperature on the  $\text{Na}_2\text{O}-2\text{CaO}-3\text{SiO}_2$  glass-ceramic's structural properties. Journal of Non-Crystalline Solids, v. 570, out. 2021.
- [3] OHSATO, H.; TAKÉUCHI, Y.; MAKI, I. Structural Study of the Phase Transition of  $\text{Na}_4\text{Ca}_4[\text{Si}_6\text{O}_{18}]$  Acta Crystallographica Section B, v. B46, p. 125-131, set. 1989.

## ESTUDO DE COMPÓSITOS DE VIDRO DE CÁLCIO-SÓDIO-BORATO E HIDROXIAPATITA: CARACTERIZAÇÃO E AVALIAÇÃO DA BIOATIVIDADE *IN VITRO*

F.L. Hegeto<sup>\*,1</sup>, R.S. Palácios<sup>1</sup>, M.S. Gibin<sup>1</sup>, A. do Nascimento<sup>1</sup>, A.N. Medina<sup>1</sup>, W.R. Weinand<sup>1</sup>, F. Pedrochi<sup>2</sup>, A. Steimacher<sup>2</sup>, C.V. Nakamura<sup>3</sup>, K.M. Retamiro<sup>3</sup>, N. Fernandes<sup>3</sup>, F. Sato<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

<sup>2</sup>Centro de Ciências Sociais, Saúde e Tecnologia, Universidade Federal do Maranhão, UFMA – Imperatriz-MA, Brasil.

<sup>3</sup>Departamento de Ciências Básicas da Saúde, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

\*Corresponding author's email: [hegetofl@gmail.com](mailto:hegetofl@gmail.com)

**Palavras-chave:** Vidro bioativo; Hidroxiapatita; Compósitos bioativos.

O presente trabalho apresenta a preparação e caracterização de compósitos bioativos a partir de vidro bioativo de cálcio – sódio – borato com HAp em três diferentes proporções. Nos compósitos foram identificadas as fases cristalinas  $\text{CaNa}_3\text{B}_5\text{O}_{10}$ ,  $\text{CaNaB}_5\text{O}_9$ , fluorapatita, também presentes no vidro, além da  $\text{NaCaPO}_4$  e  $\text{CaB}_2\text{O}_4$ , resultantes da decomposição das fases de borato e reação com hidroxiapatita, e a hidroxiapatita, por meio da técnica de DRX. A espectroscopia Raman fases cristalinas adicionais como a fase  $\beta$ -TCP no compósito 25VB75HAp. Os compósitos foram submetidos a teste de bioatividade *in vitro* com imersão em SBF durante 28 dias. Foram observadas variação no pH da solução de imersão e perda de massa, sendo a maior nas primeiras horas. A técnica de DRX mostrou a ausência das fases com borato nos compósitos, diminuição  $\text{NaCaPO}_4$  e presença da HAp. Os compósitos 75VB25HAp, 50VB50HAp e 25VB75HAp se apresentaram bioativos, e potencialmente promissores como agentes cicatrizantes.

### INTRODUÇÃO

As novas gerações de biomateriais têm sido desenvolvidas e, permitido processos de renovação e regeneração de tecidos vivos por meio de estímulos em nível molecular com a combinação das propriedades bioativas e reabsorvíveis [1,2]. Desta forma o presente trabalho tem como objetivo principal combinar as propriedades de biocompatibilidade e bioatividade por meio da preparação de compósitos de hidroxiapatita (HAp) com vidros bioativos (VB). Após a obtenção do compósito HAp+VB estes serão caracterizados quanto a estrutura formada, e posteriormente submetidos aos testes de bioatividade e biológicos *in vitro*; estes ensaios permitem avaliar o potencial dos compósitos para futuras aplicações em regeneração óssea.

### MATERIAIS E MÉTODOS

Para a produção das amostras foram produzidos vidro com estequiometria de  $60\text{BO}_3\text{-}8\text{CaO-}4\text{P}_2\text{O}_5\text{-}18\text{Na}_2\text{O-}10\text{CaF}_2$ , e triturados e peneirados ( $\leq 45\mu\text{m}$ ) e a HAp foram obtidas através dos ossos de peixes com 420 dias e calcinados  $900^\circ\text{C}$  por 8 horas, e triturados e peneirados ( $\leq 45\mu\text{m}$ ), para os VB e HAp foram misturados em um moinho de baixa energia e separados nas concentrações de 75, 50 e 25%, em massa, denominados 75VB25HAp, 50VB50HAp e 25VB75HAp, como mostra a Tabela 1. Após a mistura, as amostras foram compactadas uniaxialmente a 55 MPa, em discos de 5mm de diâmetro e espessura de 2mm, em seguida os discos foram acondicionados em cadinhos de platina e tratados termicamente a  $810^\circ\text{C}$ .

**Tabela 1.** Concentrações das amostras

<i>Amostras</i>	<i>% de VB</i>	<i>% de HAp</i>
VB <sub>st</sub>	100	0
75VB25HAp	75	25
50VB50HAp	50	50
25VB75HAp	25	75
HAp	0	100

Para análises dos compósitos foram utilizadas as técnicas de difratometria de Raios X (DRX), espectroscopia Raman, e teste de bioatividade nos compósitos de HAp e vidro bioativo borato tratado termicamente (VBt), em diferentes proporções

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

Com os resultados DRX foram identificadas as fases cristalinas presentes no VBt, foram identificadas como o Pentaborato de Sódio e Cálcio ( $\text{CaNaB}_5\text{O}_9$ ), o Pentaborato Trissódico de Cálcio ( $\text{CaNa}_3\text{B}_5\text{O}_{10}$ ) e a Fluorapatita (FAP). O difratograma obtido para a HAp, após o tratamento térmico contém fases adicionais. Foi utilizado o método semiquantitativo RIR (*Reference Intensity Ratio*) [3] para estimar o percentual de cada fase, a amostra 75VB25HAp, foi 55% de  $\text{CaNaB}_5\text{O}_9$ , 15% de FAP, 15% de HAp e 15% de  $\text{NaCaPO}_4$ . O compósito 50VB50HAp  $\text{CaNaB}_5\text{O}_9$  (27%), HAp (28%),  $\text{NaCaPO}_4$  (17%),  $\text{CaB}_2\text{O}_4$  (19%) e a FAP (9%). Nesta concentração há a presença de uma de uma fase não identificada no compósito anterior, o  $\text{CaB}_2\text{O}_4$ . Esta fase pode ser proveniente da decomposição da  $\text{CaNaB}_5\text{O}_9$  em  $\text{CaB}_2\text{O}_4$  e  $\text{Na}_2\text{O}$ , o que poderia justificar a diminuição da  $\text{CaNaB}_5\text{O}_9$  de 55% para 27% e constância da fase  $\text{NaCaPO}_4$  de 15% para 17%, quando comparados aos compósitos 75VB25HAp e 50VB50HAp. Nos compósitos 25VB75HAp foram identificadas as fases cristalinas HAp (60%),  $\text{CaB}_2\text{O}_4$  (19%),  $\text{NaCaPO}_4$  (12%) e FAP (9%).

Apesar de algumas sobreposições de bandas das fases identificadas na técnica de DRX, foi possível observar bandas dos modos vibracionais das mesmas três fases por meio da espectroscopia Raman na amostra VBt.

Os espectros dos compósitos 75VB25HAp, 50VB50HAp e 25VB75HAp com a indexação das fases observadas. Em todas as concentrações dos compósitos foi possível observar a presença da HAp pela presença das bandas em  $3572\text{cm}^{-1}$ . As demais bandas de HAp, modos de vibração do  $\text{PO}_4^{3-}$ , tem

superposição com as outras fases indexadas, principalmente com a FAp, pois as composições químicas de ambas são semelhantes. A FAp está presente nos compósitos decorrentes da presença do VB na composição. Entretanto, com o aumento da concentração de HAp, nota-se deslocamentos de bandas da FAp em direção às bandas da HAp.

Para os testes de bioatividade, de modo geral, as reações *in vitro* de biomateriais, como HAp e vidros bioativos, são estudadas em soluções tamponadas para avaliar a precipitação do Fosfato de Cálcio (CaP) na superfície da amostra, visto que ela é usada como indicador de bioatividade. O grau de bioatividade é classificado de acordo com o tempo necessário para que ocorra o aparecimento da camada [4]. A solução de imersão mais utilizada para este ensaio foi desenvolvida por Kokubo e colaboradores [5], conhecida como SBF do inglês *Simulated Body Fluid*. Para a amostra 50VB50HAp e 75VB25HAp houve uma maior perda de massa quando comparadas à amostra de 25VB75HAp, que pode indicar, assim como o pH, uma maior troca iônica com a solução. A amostra 25VB75HAp apresenta maior perda de massa em função do tempo de imersão quando comparada a HAp, entretanto, seus comportamentos são similares, possivelmente pela alta concentração de HAp.

## CONCLUSÕES

Com os resultados obtidos neste trabalho foi possível avaliar os compósitos produzidos da mistura dos pós de hidroxiapatita e vidro bioativo borato tratados termicamente à 810°C, em diferentes proporções. Tanto com relação à caracterização das amostras, estrutural e molecular, quanto à bioatividade e efeitos biológicos em ensaios *in vitro*. A temperatura de 810°C está acima da temperatura de cristalização do VB, resultando em um material com características cristalinas.

Após os testes de bioatividade *in vitro*, todas as amostras foram analisadas pelas técnicas de MEV, e DRX, além da análise da variação de pH do meio de imersão e perda de massa das amostras. Para os compósitos e VBt ocorreram a maior variação de pH e perda de massa nas primeiras horas, sendo o VBt com a maior taxa de variação, já para HAp as variações foram menores e mais lentas.

## REFERÊNCIAS

- [1] Hench, L. L. e Polak, J. M. Third-Generation Biomedical Materials. *Science*, 295, 1014 – 1017, 2002.
- [2] Ning, C., Zhou, L. e Tan, G. Fourth-Generation Biomedical Materials. *Materials Today*, 19, 2-3, 2016.
- [3] Hubbard C. R e Snyder, R. L. RIR - measurement and use in quantitative XRD, *Powder Diffraction*, 3, 74 - 77, 1988.
- [4] Kim, H.-M.; et al. The Mechanism of Biomineralization of Bone-like Apatite on Synthetic Hydroxyapatite: An *in Vitro* Assessment. *Journal The Royal Society Publishing*, 1, 17 – 22, 2004.
- [5] Kokubo, T. e Takadama, H. How useful is SBF in predicting *in vivo* bone bioactivity? *Biomaterials*, 27, 2907 - 2915 2006.

## ESTUDO DE FOTOATIVAÇÃO DE CORANTES UTILIZADOS NA TERAPIA FOTODINÂMICA

**G.O. Marino\***, A.P.B. Cavalaro, E.V. Bergmann, V.S. Zanuto, L.C. Malacarne

Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

\*Corresponding author's email: [marinogdo@gmail.com](mailto:marinogdo@gmail.com)

**Palavras-chave:** Espectroscopia de Lente Térmica; Corantes Xantenos; Geração de Oxigênio Singlete.

Este trabalho tem como objetivo estudar técnicas espectroscópicas, como a Espectroscopia de Lente Térmica (ELT) juntamente com outras técnicas, e aplicá-las em corantes fotossensíveis que são utilizados na terapia fotodinâmica. Foram estudados os corantes xantênicos e o corante *Sirius Red* (SR), investigando a caracterização do processo de fotodegradação e geração de oxigênio singlete desses corantes.

### INTRODUÇÃO

O princípio da interação radiação-matéria baseia-se na conversão de parte da energia transportada pelas ondas eletromagnéticas (luz) em energia térmica, que provoca o aquecimento do material exposto à radiação. Esse fenômeno é chamado de efeito fototérmico [1]. Este efeito é de grande interesse para a análise de propriedades termo-ópticas de certos materiais. Existem várias técnicas baseadas em efeitos induzidos pela absorção da luz e subsequentes processos de relaxamento dos estados excitados. Uma dessas técnicas é a espectroscopia de lente térmica (TL), que usa lasers para estudar os processos fotofísicos de materiais líquidos e sólidos [2]. Esta é uma técnica resolvida no tempo que permite a determinação das propriedades dinâmicas de uma amostra e é de natureza não destrutivo. A alta sensibilidade da técnica, capaz de analisar soluções em concentração nano-molar, representa uma vantagem sobre a espectroscopia convencional.

A ajuste dos transientes produzidos por LT utilizando os modelos apropriados permite a determinação parâmetros como a difusividade térmica, o coeficiente de difusão de massa, eficiência quântica de geração de calor e a taxa de fotodegradação [3]. Portanto, mesmo sistemas físicos que exibem reações fotoquímicas podem ser estudados usando LT, como é o caso deste estudo. Aplicamos esta técnica para a caracterização de uma classe de corantes fotossensíveis. Essas amostras contêm espécies fotoativas que produzem efeitos adicionais além do efeito térmico ao interagir com a radiação, os quais são de fundamental importância na terapia fotodinâmica.

A terapia fotodinâmica (TFD) é um conjunto de técnicas e procedimentos para o tratamento de doenças epidérmicas e tumores e na inativação de microrganismos [4]. O mecanismo relacionado a TFD ocorre quando a absorção de luz faz com que o material fique excitado e reaja com moléculas de oxigênio no meio, resultando na formação de espécies reativas de oxigênio, especialmente oxigênio singlete. Essas espécies reativas podem danificar o ambiente biológico e causar a morte celular. Esta tecnologia é uma grande promessa no combate a vários tumores cancerígenos e doenças não cancerígenas. A qualidade do fotossensibilizador é importante para a eficácia da TFD, e as



características de um fotossensibilizador ideal incluem pureza química, eliminação rápida dos tecidos, meia-vida curta e alta eficiência de produção de oxigênio singlete e falta de toxicidade na ausência de luz.

Para obter melhores resultados com a técnica de TFD, é importante conhecer o mecanismo de fotoativação dos fotossensibilizadores, que depende de fatores como temperatura, pH, tipo de solvente, concentração e propriedades físico-químicas. Os corantes xantênicos são compostos orgânicos com estrutura química básica constituída por dois anéis de benzeno unidos por um átomo de carbono e um átomo de oxigênio. Esses compostos apresentam uma alta capacidade de gerar oxigênio singlete em meio aquoso.

A estrutura básica do xanteno forma a espinha dorsal de vários compostos, como derivados do xanteno (DX), eritrosina (ERY), eosina (EOS) e rosa bengala (RB). Esses compostos tendem a apresentar fluorescência em cores fortes cobrindo todo o espectro visível. O corante *Sirius Red* (SR) também foi usado neste estudo como corante de controle, pois absorve na mesma faixa e não apresenta fotoatividade aparente.

Neste trabalho, utilizamos métodos espectroscópicos, incluindo a LT, na caracterização dos processos de fotodegradação e geração de oxigênio singlete do fotossensibilizadores xantênicos.

## MATERIAIS E MÉTODOS

A configuração experimental de LT utilizada neste estudo foi configuração de feixe duplo com modo descasado e colinear. Um deles produz um efeito de lente térmica (chamado de laser de excitação) e o outro é posicionado de forma colinear com o laser de excitação para testar a lente térmica (chamado de laser de prova). Os efeitos térmicos surgem do aquecimento que o feixe de excitação induz na amostra, e a distribuição de temperatura causa mudanças no caminho do laser. A amplitude deste efeito está diretamente relacionada com a absorção óptica da amostra.

Um laser de íon argônio emitindo em  $\lambda=514$  nm foi usado para excitar a amostra e um laser He-Ne emitindo em  $\lambda=632,8$  nm foi usado para detectar o efeito de LT. Este arranjo usa quatro lentes de focagem e vários espelhos (dois espelhos dicróicos para obter um arranjo colinear). Todos os elementos ópticos distribuídos servem para direcionar e focar o feixe na amostra. Um obturador chamado 'shutter' foi usado para controlar o tempo de exposição da luz de excitação à amostra. Dois fotodiodos também foram usados, um para analisar o efeito e outro para disparar a aquisição de dados assim que o feixe de excitação atingisse a amostra (o chamado "gatilho").

Amostras dos corantes xantênicos (eritrosina (ERY), eosina (EOS), rosa bengala (RB)) e o corante *Sirius Red* (SR) foram inicialmente preparadas como soluções estoque em concentrações de 25  $\mu\text{M}$ . Eles foram então diluídos para atingir uma concentração de 1,5  $\mu\text{M}$ .

Adicionado a LT, foi utilizado um espectrômetro para análise da cinética de geração de oxigênio singlete. Uma substância que interage com o oxigênio singlete gerado pelo fotossensibilizador na presença de luz, conhecido como uma prova química para detecção da geração de oxigênio singlete (ácido 9,10 antraceniil-bis(metileno) dimalônico-ABDA), foi adicionada à solução contendo os corantes xantênicos.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

Na figura 1 temos os transientes de lente térmica obtidos para cada um dos corantes. Foram feitos ajustes teóricos para os dados utilizando o modelo Shen-Pedreira para os corantes xantênicos já que apresentavam efeitos além do efeito térmico, enquanto os dados do Sirius Red foram ajustados utilizando o modelo Shen.

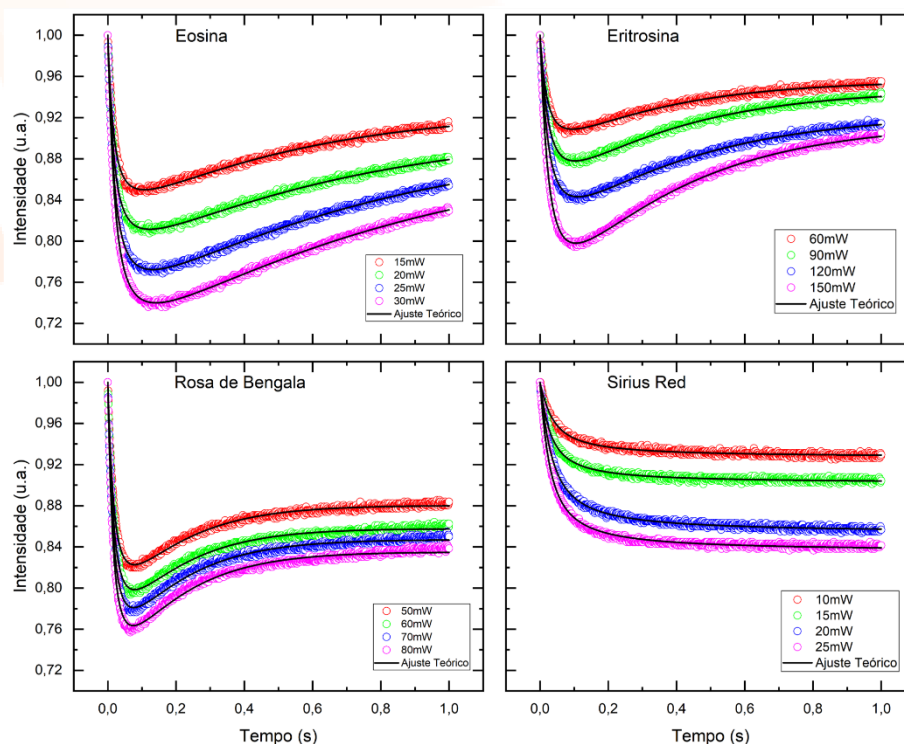


Figura 1

Com a amplitude da fase  $\theta_{TL}$  do transiente de lente térmica e o coeficiente de absorção óptica  $\beta$  que pode ser obtido da transmitância podemos então calcular o coeficiente de conversão térmica  $\phi_T$  para cada corante, os valores de  $\phi_T$  calculados estão expostos na Tabela 1.

**Tabela 1:** Coeficientes de conversão térmica calculados.

Corante	$\Phi_T$
Eosina	$0,24 \pm 0,03$
Eritrosina	$0,25 \pm 0,04$
Rosa de Bengala	$0,28 \pm 0,01$
Sirius Red	1

Foi observado que cada transiente se comporta de maneira diferente em relação ao efeito de foto resposta. Esse resultado demonstra uma taxa de fotodegradação diferente entre os corantes xantênicos. Como esperado, a transição do corante SR (usado como corante de controle) é puramente térmica e não tem efeito adicional, independentemente da potência usada.

Medições dos espectros de absorção dos corantes em função da concentração também foram feitas. Isso é útil para interpretar os dados de LT, pois permite estimar o coeficiente de absorção óptica ( $\beta_0$ ) no comprimento de onda de interesse (514 nm neste caso), e com isso determinar a eficiência de

geração de calor de cada corante. Para a cinética de fotoativação na presença de ABDA, foi utilizada uma concentração de 3,125  $\mu\text{M}$  para cada corante. A taxa de mudança dos picos característicos do espectro de absorção ABDA permitiu a determinação da eficiência química de geração de oxigênio singlete para os corantes utilizados neste trabalho.

## CONCLUSÕES

A utilização da técnica LT se mostrou muito útil para o estudo e caracterização de fotossensibilizadores utilizados em TFD. Além disso, esta técnica permite a determinação de parâmetros-chave de propriedades termo-ópticas, fornecendo informações sobre a fotodegradação e taxa de geração de calor dos corantes. Além da LT, outras técnicas espectroscópicas também são adequadas para caracterizar as propriedades dos corantes utilizados e são importantes para otimizar a dosimetria utilizada na TFD.

## REFERÊNCIAS

- [1] ALMOND, D. P.; PATEL, P. M. *Photothermal Science and Techniques.*, volume 10. (Chapman and Hall, London), 1996.
- [2] BIALKOWISK, S. E. *Photothermal Spectroscopy Methods for Chemical Analysis.* (Wiley, New York), 1996.
- [3] CAMARGO, V. G. *A utilização de técnicas fototérmicas na caracterização de fotossensibilizadores aplicados na terapia fotodinâmica. Tese (Doutorado). - Programa de Pós-graduação em Física, Universidade Estadual de Maringá, Maringá, 2019.*
- [4] GUNAYDIN, G.; GEDIK, M. E. and AYAN, S. *Photodynamic Therapy—Current Limitations and Novel Approaches, Frontiers in Chemistry* 9, 2021.

## MEDIDAS MAGNÉTICAS DE NANOPARTÍCULAS DE MAGNETITA COM DIFERENTES REVESTIMENTOS

G.T. Colombo<sup>\*1</sup>, G.S. Dias<sup>1</sup>, I.A. Santos<sup>1</sup>, P.N. Oliveira<sup>1</sup>, L. David<sup>2</sup>, L.F. Cótica<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

<sup>2</sup>Université Claude Bernard Lyon 1, Lyon, França.

\*Corresponding author's email: [gabriel.tolardo.colombo@hotmail.com](mailto:gabriel.tolardo.colombo@hotmail.com)

**Palavras-chave:** Magnetismo; Métodos experimentais; Nanoestruturas.

Recentemente, dados do INCA mostram aumentos significativos no número de pessoas que desenvolveram câncer no Brasil. Este resultado torna evidente a necessidade de estabelecer novas formas de lidar com este mal, isto é, expõe a falta de instrumentos mais eficientes no combate ao câncer. Nessa perspectiva, pesquisadores do mundo inteiro buscam formas eficazes de suprir essa carência, sendo o tratamento por hipertermia, muito cogitado como resposta a este problema. Tendo isto em vista, cientistas da *Université Claude Bernard Lyon 1* desenvolveram nanoestruturas com o intuito de complementar os métodos de tratamentos atuais, o que infere a necessidade de realizar medidas e análises para verificar a utilidade de tal material. Sob essa perspectiva, o presente trabalho teve como objetivo verificar como o recobrimento afeta a magnetização de saturação e quais as inferências disso no sucesso da aplicação para o tratamento por hipertermia. Por isso, realizou-se medidas de magnetização utilizando um Magnetômetro de Amostra Vibrante (VSM) em amostras sem nenhum tipo de revestimento e revestidas com quitosana, a partir das quais, verificou-se a possibilidade de usar as nanopartículas não apenas no tratamento por hipertermia, mas em outros tipos de intervenções médicas a depender do resultado de novas medidas.

### INTRODUÇÃO

Nas últimas décadas, tem-se observado um aumento significativo na taxa de mortalidade por câncer em seres humanos. O diagnóstico dessa doença tem se tornado cada vez mais comum, com mais de 700 mil novos casos registrados no Brasil, de acordo com o último censo [1].

Para enfrentar esse desafio, pesquisadores em todo o mundo estão direcionando seus esforços para a utilização de dispositivos em escala nanométrica como uma promissora ferramenta no combate a essa enfermidade. Nesse contexto, pesquisadores da *Université Claude Bernard Lyon 1*, na França, desenvolveram nanoestruturas de magnetita ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ), dotadas de diferentes tipos de revestimentos, com o objetivo de investigar as possibilidades de aplicação desse material no tratamento do câncer por hipertermia.

Naturalmente, o tamanho, a forma, a composição e o revestimento dos materiais desempenham um papel fundamental na modificação das propriedades magnéticas resultantes [2,3]. Para que o processo de hipertermia seja eficaz, é importante que os materiais exibam propriedades magnéticas significativas, permitindo-lhes reagir de forma eficiente ao campo magnético aplicado e, conseqüentemente, gerar calor suficiente para destruir as células cancerígenas.

Desta forma, a aplicação de nanopartículas no processo de hipertermia requer a realização de uma série de medidas magnéticas e análises criteriosas dos resultados obtidos. Isso é fundamental para determinar como um revestimento específico afeta as propriedades magnéticas de um material, o que, por sua vez, tem um impacto direto na viabilidade da aplicação desse material em seres vivos. Portanto, esta pesquisa representa um avanço crucial no desenvolvimento de terapias inovadoras para o tratamento do câncer.

## MATERIAIS E MÉTODOS

As amostras analisadas provenientes da *Université Claude Bernard Lyon 1* estão listadas na Tabela 1.

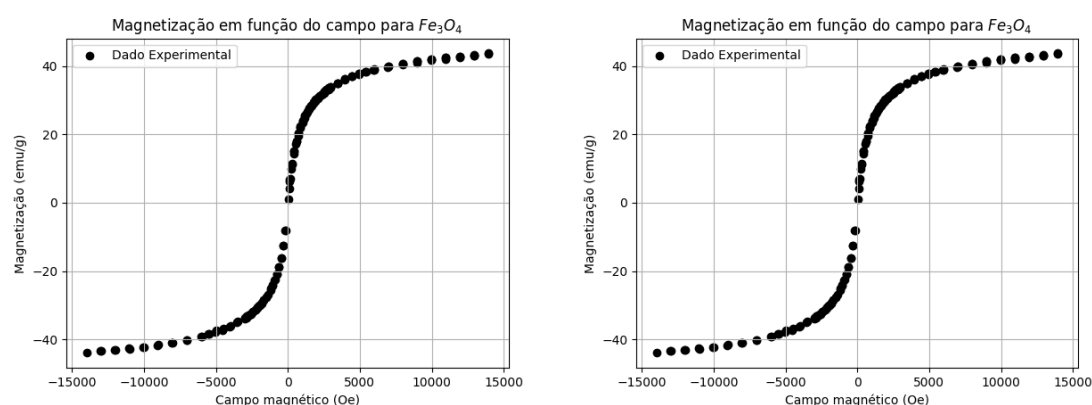
**Tabela 1** - amostras e suas respectivas características.

Número da amostra	Composição química	Revestimento
1	$Fe_3O_4$	Sem revestimento
2	$Fe_3O_4:CS_{34\%}$	Quitossana (34% grau de acetilação)

As amostras apresentadas na Tabela 1 foram submetidas a análises utilizando um Magnetômetro de Amostra Vibrante (VSM). Para realizar essas análises, uma porção das massas das amostras foram previamente medidas e, essa porção de cada amostra, aderida a extremidade de uma vareta. A ponta da vareta foi posicionada na região de maior intensidade de um campo magnético gerado por duas bobinas. Na outra extremidade da vareta, foi colocado um alto-falante que controlou as vibrações da vareta a uma frequência específica. A oscilação da amostra na região do campo magnético gerado pelas bobinas resulta na indução de uma diferença de potencial, que é captada por um conjunto de bobinas de medida. Essa diferença de potencial medida é proporcional ao valor da magnetização da amostra em análise. Esse procedimento permitiu uma análise precisa das propriedades magnéticas das amostras.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

As medidas de magnetização obtidas pelo VSM para as amostras 1 e 2 estão expostas na Figura 1.



**Figura 1** – Dados obtidos para as amostras 1 e 2 à temperatura ambiente, respectivamente.

Inicialmente, é válido ressaltar que a amostra de nanopartículas de magnetita sem revestimento apresentou uma magnetização de saturação maior do que as que estavam revestidas com quitossana, isto é, uma magnetização de cerca de 70 emu/g e 43 emu/g, respectivamente.

Além disso, é perceptível através dos gráficos da Figura 1 que as amostras apresentam uma curva de histerese que se assemelha muito a um comportamento superparamagnético e, portanto, apresentam magnetização remanescente praticamente desprezível, sendo esta, uma característica importante para a aplicação em hipertermia.

Muito embora os valores obtidos de magnetização de saturação pareçam ser motivadores, eles não são maiores do que os obtidos na literatura (para o caso da magnetita) [4], mas são extremamente promissores quando comparados com amostras de nanopartículas de maghemita. Tal situação justifica a necessidade da realização de novas análises tais como Difração de Raios X, para compreender melhor a estrutura cristalina das amostras, microscopia eletrônica para verificar a forma e tamanho e também testes de toxicidade para verificar a aplicação em seres vivos e, a depender destas novas medidas, as amostras provenientes da *Université Claude Bernard Lyon 1* podem ser usadas não apenas no tratamento por hipertermia, mas também, em processos como entrega controlada de fármacos e servindo como contraste para imagens em exames de ressonância magnética.

## CONCLUSÕES

Até o momento não foi possível realizar uma análise aprofundada em relação à aplicação das nanopartículas desenvolvidas pela *Université Claude Bernard Lyon 1* no contexto do tratamento por hipertermia. No entanto, os resultados obtidos sugerem a necessidade de conduzir uma investigação detalhada da estrutura cristalina das amostras e verificar a concordância de suas medidas de magnetização com aquelas disponíveis na literatura. A partir desse mapeamento e validação das propriedades das nanopartículas, abre-se a possibilidade de viabilizar sua aplicação não apenas em hipertermia, mas também em outras áreas promissoras, como a entrega controlada de fármacos e a melhoria de contraste em imagens de ressonância magnética. Esses achados representam um passo significativo em direção a aplicações interdisciplinares e inovadoras no campo da ciência dos materiais, com grande potencial para impactar positivamente a área médica e de diagnóstico por imagem.

## REFERÊNCIAS

- [1] Brasil. Estimativa 2023: incidência de câncer no Brasil. Instituto Nacional de Câncer José Alencar Gomes da Silva. Rio de Janeiro, 2023.
- [2] Bini, R. D. Síntese e funcionalização de nanopartículas de magnetita e hidrogéis magnéticos para aplicações no tratamento de câncer. Tese de Doutorado (Programa de Pós-Graduação em Física) – Universidade Estadual de Maringá, 2021.
- [3] Rodrigues, F. Desenvolvimento de nanoestruturas para aplicação em hipertermia magnética. Tese de Doutorado (Programa de Pós-Graduação em física) – Universidade Estadual de Maringá, 2022.
- [4] Villar, B. M. G. Estudo de vórtices magnéticos em nanoanéis de  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  recobertos por  $\text{SiO}_2$ . Tese de mestrado (Programa de Pós-Graduação em Física). Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF), 2019.

## DIKETOPYRROLOPYRROLE-BASED ORGANIC DYES AND THEIR LASER-INDUCED PHOTOACTIVE RESPONSE

J.W. Berrar<sup>\*,1</sup>, V.S. Zanuto<sup>1</sup>, N.G. Astrath<sup>1</sup>, L.C. Malacarne<sup>1</sup>, J. Calvo-Castro<sup>2</sup>, M.L. Baesso<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

<sup>2</sup>School of Life and Medical Sciences, University of Hertfordshire, Hatfield, Reino Unido.

\*Corresponding author's email: [berrar.jhonatan@gmail.com](mailto:berrar.jhonatan@gmail.com)

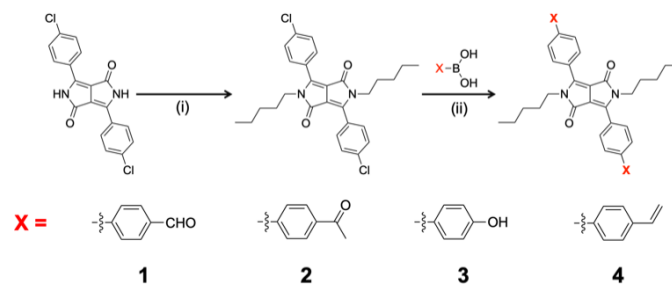
**Keywords:** photostability; DPP; thermal lens.

The photoactive properties of organic dyes are paramount when foreseeing their applications. This study investigated via thermal lens spectroscopy a series of structurally related diketopyrrolopyrrole-based. We report laser-induced transients that evidences photochemical reaction. Then, impacting the thermal and photostability of the architectures under investigation (e.g., up to 73% in some cases). The thermal conversion rate showed to be of about ca 30%. Simultaneously, their high quantum yield efficiencies of ca 70% further enhanced their technological relevance as bifunctional probes.

### INTRODUCTION

The last decades have seen an increasingly pressing need for novel materials that can exhibit superior performance over the existing ones[1,2]. Among the different chemistries exploited in the development of novel organic conjugated small molecules, diketopyrrolopyrroles (DPPs) are of particular note [3-5]. This is due to the distinct intrinsic qualities attributed to DPP, such as its relative ease in being modified, high photostability and high fluorescence quantum efficiency, added to its excellent thermal stability [4]. Syntheses that aim for its use in photodynamic and photothermal therapy (PDT/PTT) have been reported [6,7] Other compositions have also been reported as efficient fluorescent markers, used both to produce biological images (bioimaging) and to identify ionic and radical species in solution (analytes) [8-10]

As a result, in-depth understanding of the stability of the probes as well as the effects following photoexcitation is highly warranted in informing and fostering the development of novel alternatives. Motivated by these observations, herein the photophysical properties of four (1–4) diketopyrrolopyrrole-based architectures (Figure 1) are reported, including their application as well as the laser-induced photoactive response proposed as a quantitative method to study these systems.

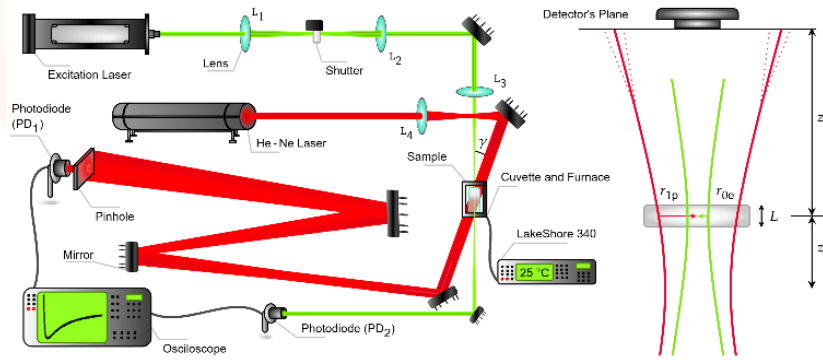


**Figure 1** – Synthetic route and chemical structures for molecules DPP(CHO)<sub>2</sub>, DPP(Ac)<sub>2</sub>, DPP(OH)<sub>2</sub> and DPP(vinyl)<sub>2</sub>, 1–4 respectively. (i) Me(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>I, K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, DMF, 120 oC, 24h; (ii) Pd<sub>2</sub>(Pdba)<sub>3</sub>, SPhos, K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>, THF, reflux.

## MATERIALS AND METHODS

### Laser induced lens technique

Figure 2 shows the experimental setup for the mode-mismatched dual-beam lens technique used to investigate the DPP samples, in which the inset shows the details in the arranged configuration. The geometric parameters  $m$  and  $V$  were 18.5 and 3.6, respectively.



**Figure 2** – Experimental setup for the laser induced lens effect measurements. The inset shows the laser beams details.

Photoactive materials frequently present photoinduced chemical reaction (PCR) and thermal lens (TL) effects [11]. The PCR introduces a time-dependent optical absorption coefficient affecting the laser propagation through the illuminated area in the sample, while the TL produces a lens-like optical element according to the local temperature rise. For the experimental mode-mismatched configuration, the probe-beam phase shift calculation requires the analytical solution of the heat diffusion equation with the inclusion of the PCR contribution. Details of this model can be found elsewhere [12,13]. By Fresnel diffraction theory and for a laser with a gaussian profile distribution (TEM00), one can obtain the probe laser intensity at the photodiode position in the far field as [14],

$$I(t) = |E_0 \int_0^\infty e^{-(1+iV)g} e^{-i\Phi(g,t)} dg|^2, \quad (1)$$

with  $E_0$  being the amplitude of the electric field of the probe beam laser and  $g$  an integration parameter. The phase shift is given by:

$$\Phi(g, t) = \frac{\theta_T}{t_c} \left[ \epsilon_r \int_{t_0}^t \frac{1 - e^{-\frac{2mg}{1+2t'/t_c}}}{1+2t'/t_c} dt' + (1 - \epsilon_r) e^{-k_r t} \int_{t_0}^t e^{k_r t'} \frac{1 - e^{-\frac{2mg}{1+2t'/t_c}}}{1+2t'/t_c} dt' \right], \quad (2)$$

with the amplitude of the lens effect denoted by

$$\theta_T = -\frac{P_{ex} \beta_0 L}{\kappa_T \lambda_p} \left( \frac{dn}{dT} \right) \phi_T, \quad (3)$$

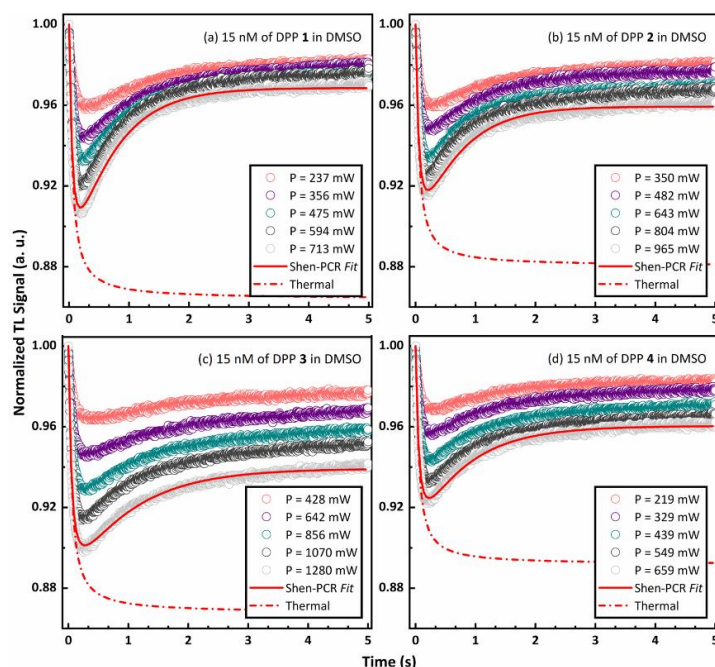
here  $P_{ex}$  stands for the power of the excitation laser,  $\beta_0$  is the optical absorption coefficient,  $L$  is the sample length,  $\kappa_T$  the thermal conductivity,  $\lambda_p$  is the probe beam laser wavelength,  $dn/dT$  is the refractive index thermo-optic coefficient,  $\epsilon_r = \epsilon_P/\epsilon_R$  the ratio between the molar absorptivity of the Products (P) and Reactants (R), and  $\phi_T$  is the heat conversion efficiency, related to the fluorescence quantum efficiency  $\eta$  by  $\phi_T = 1 - \eta$  [15]. The characteristic time formation of the TL is defined as



$t_c = r_{0e}^2/4 D_T$ , here  $r_{0e}$  is the radius of the excitation laser on the sample position and  $D_T$  the thermal diffusivity.

## RESULTS AND DISCUSSION

To evaluate the behavior of dyes 1-4 when diluted in DMSO, transients of solutions with a concentration of 15 nM were obtained for five different excitation laser powers, as shown in Figure 3. For DPP 1 and 2 (3a and 3b), the transients are more intense and with faster variation compared to those of DPPs 3 and 4, 3c and 3d, respectively. The TL curves (dotted lines) were plotted using  $\theta_T$  and  $t_c$  obtained from short time fittings done to the experimental data (until 400 ms), using the pure thermal lens model with  $\epsilon_r = 1$ . The solid curves correspond to the fitting of the experimental data using the full Shen-PCR model (Eq. (1) and Eq. (2)). Comparing both curves, it was possible to quantify the laser-induced photodegradation of the dyes.



**Figure 3** – Laser induced lensing transient obtained for compounds 1-4 diluted in DMSO as a function of the excitation beam power and for the concentration of 15 nM, graphics (a), (b), (c) and (d), respectively.

Molecule 1 presented the most significant effect of photodegradation. It was demonstrated by the relative variation of the optical absorption coefficient, reduced by more than 70% when the laser excitation was interrupted. Molecule 2 also presents an intense PCR effect, with a reduction of the order of 65% in  $\beta_0$ . On the other hand, molecules 3 and 4 are with smallest photodegradations, with relative variation of ca 48 and 55%, respectively.

The heat generation, summarized by  $\phi_T$  values, showed for DPP 1 and 4, 33% and 30% of the absorbed radiation, respectively, while for dyes 2 and 3 it was 26% and 28%. The parameter complementary to the produced thermal energy is the fluorescence quantum efficiency  $\eta$ . This quantity, unlike  $\phi_T$ , denotes the portion of the absorbed energy converted into radiation emitted by the sample. Therefore, since DPP 2 and 3 presented smaller  $\phi_T$  values, their  $\eta$  values are higher. In

general, the four studied DPP molecules presented high values of  $\eta$ . This feature is relevant for applications demanding fluorescent probes.

## CONCLUSION

This work reports the photophysical properties of DPP-based architectures in organic solvents. Through the Shen–PCR model, it was possible to determine a ca 70% reduction in their optical absorption factor for some architectures, hence consistent with significant photodegradation. Thermal conversion efficiencies of ca 30% were experimentally determined. Alongside the characteristic high fluorescent quantum efficiencies of DPPs, this observation reinforces these molecules as promising bifunctional probes. Therefore, the results of this study aid in fostering the development of superior technological applications exploiting diketopyrrolopyrrole and other chemistries.

## REFERENCES

- [1] H. Crawford, et al., *Chem. Eur. J.*, 2022, vol. 28, no. 72, p. e202202366.
- [2] O. Ostroverkhova, *Chem Rev.*, 2016, vol. 116, no. 22, pp. 13279-13412.
- [3] V. A. S. Almodôvar and A. C. Tomé, *Molecules*, 2021, vol. 26, no. 16, p. 4758.
- [4] M. Grzybowski and D. T. Gryko, *Advanced Optical Materials*, 2015, vol. 3, no. 3, p. 280–320.
- [5] H. M. Smith, *High Performance Pigments*, John Wiley & Sons, 2001, pp. 159-184.
- [6] Y. Wang, et al., *Chem. Sci.*, 2018, vol. 9, p. 8103–8109.
- [7] X. Jiang, et al., *Dyes and Pigments*, 2020, vol. 181, p. 108599.
- [8] M. Kaur and D. H. Choi, *Chemical Society Reviews*, 2015, vol. 44, p. 58–77.
- [9] Y. Cai, et al., *ACS Nano*, 2017, vol. 11, no. 1, p. 1054–1063.
- [10] W. Li, L. Wang, H. Tang and D. Cao, *Dyes and Pigments*, 2019, vol. 162, p. 934–950.
- [11] P. R. B. Pedreira, et al., *Journal of Applied Physics*, 2006, vol. 100, no. 4, p. 044906.
- [12] L. C. Malacarne, et al., *Opt. Express*, 2011, vol. 19, p. 4047–4058.
- [13] L. C. Malacarne, et al., *The Journal of Physical Chemistry A*, 2014, vol. 118, no. 31, p. 5983–5988.
- [14] J. Shen, R. D. Lowe and R. D. Snook, *Chemical Physics*, 1992, vol. 165, no. 2, p. 385–396.
- [15] K.-L. Wong, J.-C. G. Bünzli and P. A. Tanner, *Journal of Luminescence*, 2020, vol. 224, p. 117256.

## ESTUDO DA INFLUÊNCIA NA RESPOSTA BIOATIVA DE VITROCERÂMICAS PRODUZIDAS A PARTIR DO SISTEMA VÍTREO BORO-SÓDIO-CÁLCIO COM DIFERENTES TAMANHO DE PARTÍCULAS

H. Santos<sup>\*1</sup>, P.N. Portes<sup>2</sup>, M.S. Gibin<sup>1</sup>, W. R. Weinand<sup>1</sup>, F. Sato<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

<sup>2</sup>Centro de Engenharia e Ciências Exatas, Universidade Estadual do Oeste do Paraná, UNIOESTE – Cascavel-PR, Brasil.

\*Corresponding author's email: [rique.love@gmail.com](mailto:rique.love@gmail.com)

**Palavras-chave:** Biomaterial, Vitrocerâmica, Tamanho de Partícula.

O trabalho estudou a resposta bioativa de vitrocerâmicas produzidas a partir do sistema vítreo  $60\text{B}_2\text{O}_3-5\text{CaF}_2-19\text{Na}_2\text{O}-14\text{CaO}-2\text{P}_2\text{O}_5$  pulverizado em diferentes intervalos de tamanho de partículas, sendo em três intervalos: abaixo de  $103\ \mu\text{m}$ , entre  $60$  e  $201\ \mu\text{m}$  e  $118$  e  $342\ \mu\text{m}$ , denominados, respectivamente, por P1, P2 e P3. Que foram compactados e tratados termicamente, a  $715^\circ\text{C}$ , de forma que ocorresse a sinterização de partículas. Análises de DRX mostram a formação das fases cristalinas  $\text{CaNaB}_5\text{O}_9$ ,  $\text{CaNa}_3\text{B}_5\text{O}_{10}$  e Fluorapatita. Técnicas de espectroscopia Raman e FTIR-ATR detectaram a fase  $\text{CaB}_2\text{O}_4$  sendo classificada como fase secundária nas amostras. As micrografias obtidas por MEV das amostras mostrando que o tamanho de partícula influenciou na morfologia de superfície e interna. Os ensaios de bioatividade *in vitro* foram feitos utilizando o método de imersão num período de 28 dias de imersão em SBF. A micrografia das amostras, após imersão, mostrou formações de camadas de ACP nas primeiras horas de interação com o fluido, indicando boa resposta bioativa das amostras. Análises de DRX, espectroscopia Raman e FTIR-ATR, mostraram a degradação das fases de Boro que foram dissolvidas no meio. Ensaios de citotoxicidade mostraram que P1, P2 e P3 não apresentaram toxicidade celular, podendo ter aplicabilidade biológica.

### INTRODUÇÃO

O avanço tecnológico possibilitou grandes avanços no desenvolvimento de materiais voltados para aplicações biológicas como implantes, enxertos e materiais que auxiliam na recuperação tecidual ocorrida em fraturas, esfoliações e cirurgias melhoram o bem-estar de pacientes e acelerando o processo de recuperação e reabilitação [1].

Ao se tratar de fraturas e defeitos ósseos o desenvolvimento de materiais biologicamente compatíveis e com pouca taxa de rejeição tecidual é um desafio que tem sido superado com a produção de vidros e vitrocerâmicas com propriedades físicas e químicas que se comparam ao tecido ósseo. O desenvolvimento de um material que tenha baixa rejeição deve apresentar certas características intrínsecas, tais como: envolvimento direto na formação óssea, condução celular, vascularização, não toxicidade e tensão mecânica [2].

As vitrocerâmicas são compostas por estruturas moleculares organizadas, sendo obtidas por meio do tratamento térmico de vidros podendo ser formadas diferentes fases cristalinas em suas composições. Elas podem ser produzidas diretamente de uma peça de vidro ou a partir do vidro pulverizado. A

dependendo do tamanho de partícula ao qual o vidro é pulverizado pode-se manipular os formatos de acordo com a necessidade da aplicação do material, ampliando regiões e aplicações ao qual as peças produzidas podem ser utilizadas [3].

Tendo em vista que a morfologia do biomaterial pode influenciar na compatibilidade com o tecido biológico, o presente trabalho propõe o estudo do desenvolvimento de vitrocerâmicas formadas a partir de vidros boratos bioativos pulverizados e separados em diferentes intervalos de tamanhos de partícula para avaliar a influência desse na sua resposta bioativa.

## MATERIAIS E MÉTODOS

Para caracterizar a composição cristalina, estrutura molecular, características morfológicas e dinâmica de resposta biológica. Utilizando a técnica de DRX, avaliando a estrutura das amostras e composições das fases cristalinas baseando os componentes predecessores do vidro. É usado também as espectroscopias FTIR e Raman para determinar a composição molecular da amostra de acordo com a busca bibliográfica referente às análises obtidas por DRX. Para os testes de bioatividade, as amostras passaram por análises *in vitro* utilizando o método de imersão em SBF. São analisados a taxa de dissociação da amostra no meio, formação de camadas de fosfato de cálcio amorfo (ACP) nas superfícies das amostras, alteração de pH da solução e micrografias via MEV com o intuito de mostrar a mudança morfológica das amostras após interação com o fluido.

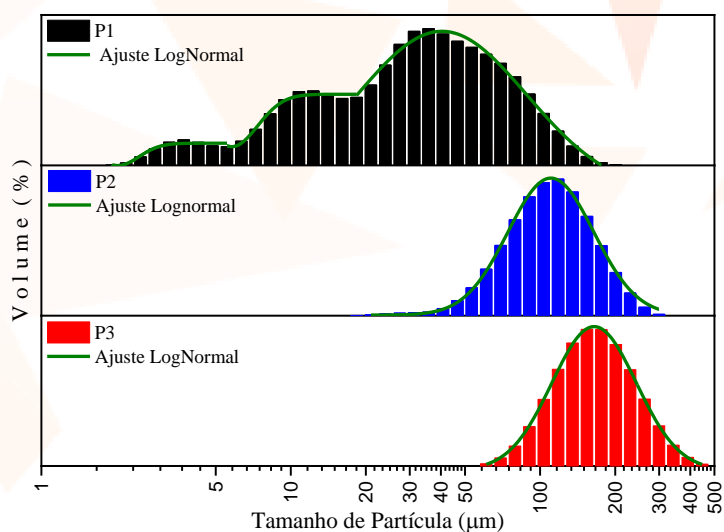
## RESULTADOS E DISCUSSÃO

A amostra com menor tamanho de partículas apresenta partículas predominantemente entre 9 e 103  $\mu\text{m}$  de tamanho, conforme mostrado na Figura 1, sendo o intervalo que compreende 90% da maior parte da distribuição de tamanho de partícula. A amostra com tamanho de partículas intermediário apresenta mais partículas de tamanhos entre 60 e 201  $\mu\text{m}$  com tamanho médio em torno de 75  $\mu\text{m}$  obtido pelo método de ajuste de LogNormal, e a amostra com maior tamanho de partícula tem predominância de tamanhos entre 118 e 342  $\mu\text{m}$  e tamanho médio de 191  $\mu\text{m}$ .

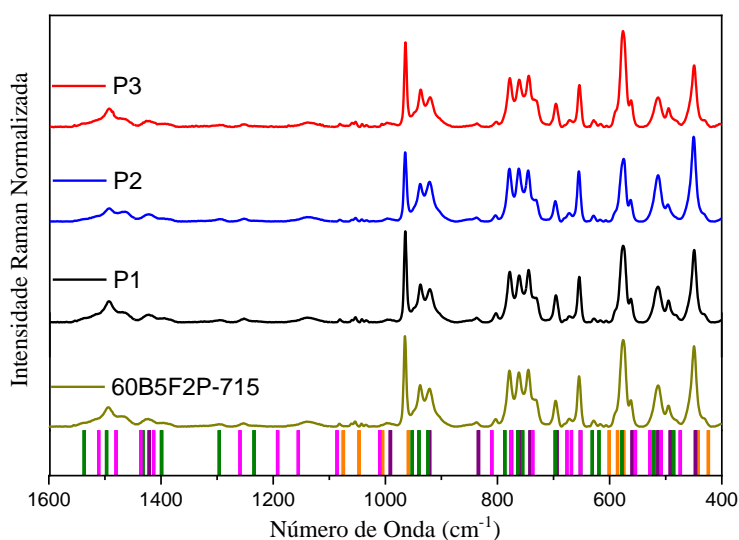
A Figura 2 apresenta os espectros do vidro após tratamento térmico a 715°C, nos quais é notado picos bem definidos, característicos de materiais cristalinos com estruturas periódicas e organizadas. É possível observar também que não há diferenças a respeito das informações vibracionais entre as amostras produzidas da vitrocerâmica 60B5F2P-715 com diferentes tamanhos de partículas.

A partir das fases cristalinas indexadas por DRX foram identificados picos característicos das fases  $\text{CaNaB}_5\text{O}_9$  [4],  $\text{CaNa}_3\text{B}_5\text{O}_{10}$  [5] e fluorapatita RRUFF #R040098-3 [6], a fase  $\text{CaB}_2\text{O}_4$  [7], não foi indexada por DRX, por ser uma fase cristalina secundária, decorrente da degradação da fase de Pentaborato de Cálcio e Sódio [8].

As análises das micrografias das amostras, mostrado na Figura 3, mostram que após a imersão em SBF as amostras apresentam boa interconexão entre poros, o que colabora para a adesão das amostras em tecidos biológicos, além de apontar a conversão da amostra em ACP, comprovando resposta bioativa positiva das amostras. A amostra P3 por apresentar maior interconexão porosa pode ser classificada, morfológicamente, como ideal para aplicações diretas devido ao processo capilar expressivamente curto quando em comparação com as outras amostras, seguida da amostra P1 e por último as amostras P2 que apresentou estrutura rígida e grande adesão entre as partículas, consequentemente, porosidade mais fechada, dificultando a permeação do fluido acarretando uma interação interna mais atrasada.

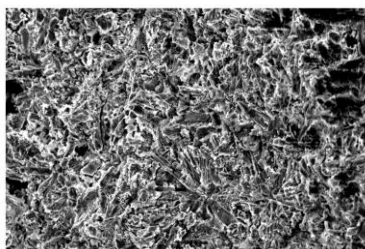


**Figura 1** – Distribuição de tamanho de partícula após peneiramento em peneiras de faixas de *mesh* conhecido, sendo: P3 entre 180 e 250 µm, P2 entre 93 e 125 µm e P1 < 62,5 µm.

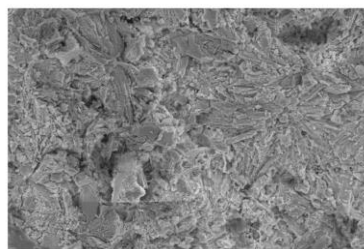


**Figura 2** – Espectros Raman após tratamento térmico em 715°C das amostras 60B5F2P, P1, P2 e P3 com a indexação das fases cristalinas: Fluorapatita - laranja (RRUFF #R40098-3),  $\text{CaNaB}_5\text{O}_9$  – roxo,  $\text{CaNa}_3\text{B}_5\text{O}_{10}$  - verde e  $\text{CaB}_2\text{O}_4$  – rosa.

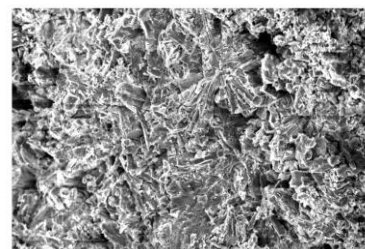
P1 - 7 Dias



P2 - 21 Dias



P3 - 4 Dias



**Figura 3** – Micrografia das fraturas das amostras P1, P2 e P3 em função do tempo de imersão em SBF mostrando o período em que as amostras apresentam contato e interação completa com o meio.

## CONCLUSÕES

Todas as amostras estudadas apresentaram respostas bioativas satisfatórias as análises realizadas destacam-se as características morfológicas, que se mostram como o principal fator na resposta bioativa. Assim, as amostras P1 e P3 apresentaram características consideradas ideais para adesão celular, vascularização e osteointegração, podendo ser empregadas diretamente como material de enxerto. Já a amostra P2 apresentou morfologia pouco porosa sugerindo estrutura rígida, podendo ser usada para a produção de scaffolds devido à sua grande agregação física entre as partículas, logo podendo se adequar aos materiais que são utilizados como sacrifício para a formação de poros e interconexões com formas e dimensões adaptadas para cada tecido que será aplicado.

## AGRADECIMENTOS

À CAPES, ao CNPq e à Finep pelo apoio financeiro. À UEM, ao Complexo de Centrais de Apoio à Pesquisa (COMCAP), ao Grupo de Estudos Multidisciplinares do Ambiente (GEMA), ao Grupo de Desenvolvimento e Inovação em Dispositivos Multifuncionais (GDDM), ao Laboratório de Inovação Tecnológica no Desenvolvimento de Fármacos e Cosméticos (LITDFC) da UEM. À Profa. Dra. Franciana da Universidade Estadual Federal do Maranhão (UFMA), Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Andressa da Universidade Estadual de Ponta Grossa (UEPG) pela infraestrutura disponibilizada

## REFERÊNCIAS

- [1] Soares, G. A. Biomateriais: Fórum de Biotecnologia de Biomateriais. Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2005.
- [2] Mahmood, J. et al. Geometric effect of matrix upon cell differentiation: BMP-induced osteogenesis using a new bioglass with a feasible structure: The Journal of Biochemistry 129.1 (2001): 163-171.
- [3] Hench, L. L. An introduction to bioceramics: Vol. 1. World scientific, 1993.
- [4] Cerruti, M. et al. Effect of pH and ionic strength on the reactivity of Bioglass® 45S5: Biomaterials 26.14 (2005): 1665-1674.
- [5] Gibin, M. S. Influência do Tratamento Térmico na Sinterização, Cristalização e na Bioatividade de Vidros de Cálcio-Sódio-Borato: Dissertação de Mestrado em Física, Universidade Estadual de Maringá 2021.
- [6] Yao, A. et al. Structure and crystallization behavior of borate-based bioactive glass: Journal of materials science 42 (2007): 9730-9735.
- [7] Almou, M. e Rulmont, A. Vibrational spectrum of trisodium calcim pentaborate  $\text{Na}_3\text{Ca}(\text{B}_5\text{O}_{10})$  and probable occurrence of the discrete pentaborate ion  $(\text{B}_5\text{O}_{10})^{-5}$  in some glassy metaborates: Journal de la Société Ouest-Africaine de Chimie, 2001.
- [8] Lafuente, B. et al. The power of databases: The RRUFF Project: De Gruyter, 2015.
- [9] Rulmont, A. e Almou, M. Vibrational spectra of metaborates with infinite chain structure:  $\text{LiBO}_2$ ,  $\text{CaB}_2\text{O}_4$ ,  $\text{SrB}_2\text{O}_4$ : Spectrochimica Acta Part A: Molecular Spectroscopy, 1989.

## AVALIAÇÃO DO EFEITO DO ÁCIDO 2- A-HIDROXIOLÉICO NA FLUIDEZ DE MEMBRANA DE LIPOSSOMAS DE POPC

S.H.A. Domingues\*<sup>1</sup>, M.W.C. Silva<sup>1</sup>, P.F.L. Alves<sup>2</sup>, F. Sato<sup>1</sup>, K. Brunaldi<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

<sup>2</sup>Departamento de Ciências Fisiológicas, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

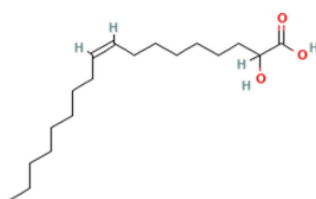
\*Corresponding author's email: [ra129842@uem.br](mailto:ra129842@uem.br)

**Palavras-chave:** Vesícula; Minerval; Glioblastoma.

O ácido 2 $\alpha$ -hidroxiloléico (2OHAO) é uma alternativa promissora no tratamento do glioblastoma multiforme humano (GBM), um câncer cerebral incurável. Ele age na membrana celular, alterando seu conteúdo lipídico e fluidez. No entanto, não está claro se isso ocorre devido à interação direta com os fosfolipídios da membrana. Este estudo buscou entender a relação entre a fluidez da membrana e a ligação do 2OHAO a lipossomas de palmitoil-oleoil-fosfatidilcolina (POPC), um modelo biomimético de membrana celular. Lipossomas do tipo LUV (*large unilamellar vesicles*) foram formadas pelo método de filme fino seguido de extrusão com um mini-extrusor. A fluidez de membrana foi avaliada por espectroscopia de fluorescência com a sonda lipofílica pireno (razão entre as intensidades de emissão dos monômeros e excímeros – E/M). Os resultados mostraram que, após 5 minutos da adição de 2OHAO às LUV, houve uma redução na intensidade de emissão dos excímeros, sem afetar os monômeros. A razão E/M reduziu de 1,9 para 1,7 após a adição de 2OHAO. A titulação das LUV com 2OHAO resultou em uma redução dose-dependente na intensidade de fluorescência do pireno e na razão E/M. Esses resultados indicam que o 2OHAO se liga rapidamente à bicamada lipídica e reduz a fluidez da membrana. Conclui-se que o 2OHAO afeta a fluidez da membrana diretamente por meio de sua interação com os fosfolipídios. Esses achados têm potenciais aplicações clínicas do 2OHAO no tratamento do GBM, explorando sua capacidade de afetar a fluidez da membrana de maneira direta e controlada.

### INTRODUÇÃO

O ácido 2 $\alpha$ -hidroxiloléico (2OHAO – nome comercial Minerval<sup>®</sup>; Figura 1) é uma alternativa promissora ao tratamento do glioblastoma multiforme humano (GBM), um tumor cerebral incurável. O 2OHAO produz um acúmulo de esfingomiélin na membrana celular das células cancerígenas, produzindo redução da fluidez de membrana com modulação da atividade de proteínas de membrana envolvidas na proliferação celular [1]. No entanto, é desconhecido o papel da interação direta do 2OHAO com os componentes lipídicos da membrana celular na fluidez de membrana.



**Figura 1** – Estrutura química do 2OHAO.

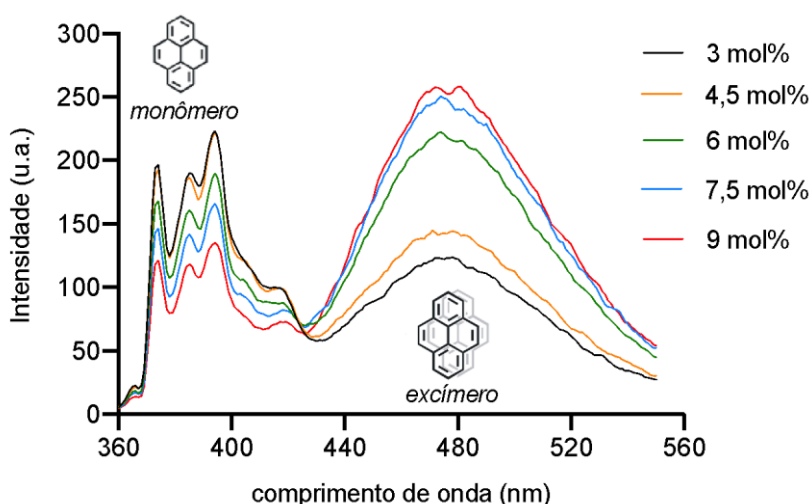
Portanto, o objetivo deste trabalho foi avaliar a relação entre a fluidez da membrana e a ligação do 2OHAO a lipossomas de palmitoil-oleoil-fosfatidilcolina (POPC), um modelo biomimético de membrana celular. Para tal, empregamos medidas de espectroscopia de fluorescência no estado estacionário com a sonda lipofílica e fluorescente pireno, a qual é sensível a microviscosidade da bicamada lipídica

## MATERIAIS E MÉTODOS

Lipossomas do tipo LUV (*large unilamellar vesicle*) de palmitoil-oleoil-fosfatidilcolina (POPC) foram preparados pelo método de filme fino, seguido de extrusão [2]. A solução tampão utilizada foi trizma base 25 mM e KCl 150 mM (pH 7,4). As LUV (300  $\mu$ M de POPC) foram incubadas com a sonda fluorescente pireno (9 mol%) por 20 minutos e à temperatura ambiente. As medidas de fluorescência no estado estacionário foram obtidas por meio de um fluorímetro Cary Eclipse Varian. O pireno foi excitado em 340 nm. A razão E/M do pireno foi calculada como a razão entre as intensidades em 373 nm (monômeros) e 473 nm (excímeros).

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

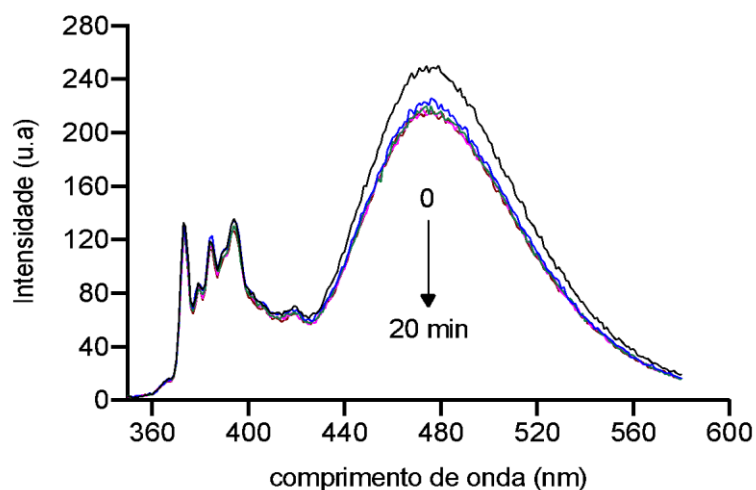
A razão E/M é sensível a microviscosidade da bicamada lipídica. Aumentos na fluidez da membrana resultam em uma razão E/M maior e vice-versa [3]. Como ilustrado na Figura 2, o espectro de emissão do pireno apresentou os picos característicos dos monômeros (375-410 nm) e excímeros (~480 nm). Com o aumento da concentração de pireno, a formação de excímeros foi favorecida devido à maior probabilidade de encontro de monômeros. No final, a razão molar de 9% em relação à POPC foi escolhida, pois demonstrou a melhor resposta à incorporação do 2OHAO nos lipossomas, como ilustrado nas Figuras 3 e 4.



**Figura 2** – Espectro de emissão do pireno em LUVs de POPC. Concentração de pireno de 4,5, 6, 7,5 e 9 mol% em relação à concentração de POPC (300  $\mu$ M). Pireno foi excitado a 337 nm. Fendas de excitação e emissão de 2,5 e 5 nm, respectivamente.

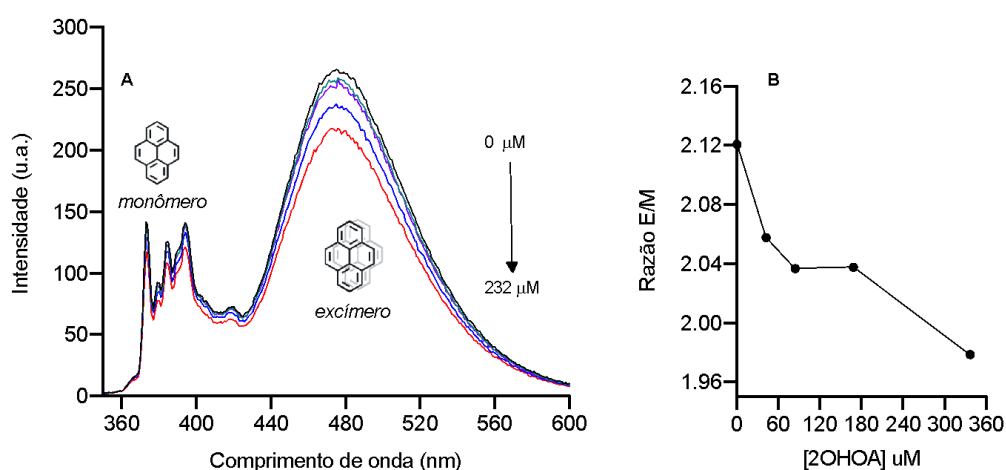


Como apresentado na Figura 3, 5 minutos após a adição de 2OHAO as LUV, observou-se em uma redução da intensidade de emissão dos excímeros, sem efeito nos monômeros. Os dados coletados durante os 20 minutos subsequentes não indicaram mudanças significativas em relação aos 5 minutos. A razão E/M antes e após a adição de 2OHAO foi de 1,9 e 1,7, respectivamente. Estes resultados reportam a ligação imediata do 2OHAO à bicamada lipídica com redução paralela da fluidez de membrana.



**Figura 3** – Espectro de emissão do pireno em LUVs de POPC. Registros realizados aos 5, 10, 15 e 20 minutos após a adição de 336  $\mu\text{M}$  de 2OHAO a LUV (300  $\mu\text{M}$  POPC e 9 mol% pireno). Pireno foi excitado a 337 nm. As fendas de excitação e emissão foram de 2,5 e 5 nm, respectivamente.

Como apresentado na Figura 4, a titulação das LUV com 2OHAO causou uma redução dose-dependente na intensidade de fluorescência do pireno e na razão E/M. Estes resultados claramente apontam para uma interação direta do 2OHAO com os fosfolipídios de membrana, resultando na redução imediata da fluidez da membrana.



**Figura 3** – A. Espectros de emissão do pireno antes e após a adição de 2OHAO nas concentrações finais 29, 58, 136 e 232  $\mu\text{M}$  (5 minutos entre as adições) a LUVs (300  $\mu\text{M}$  POPC). Os espectros correspondem a média de 3 registros. Pireno foi excitado a 337 nm. As fendas de excitação e emissão foram de 2,5 e 5 nm, respectivamente. B. Razão E/M calculados a partir dos espectros de emissão do pireno.

## CONCLUSÕES

Os nossos resultados apontam para um efeito redutor de fluidez da bicamada lipídica pelo 2OHAO dado por uma interação direta com os fosfolípidios. Esses achados têm potenciais aplicações clínicas do 2OHAO no tratamento do GBM, explorando sua capacidade de afetar a fluidez da membrana de maneira direta e controlada.

## AGRADECIMENTOS

Ao CNPq e à Fundação Araucária pelo incentivo à pesquisa e concessão da bolsa de iniciação científica.

## REFERÊNCIAS

- [1] BRUNALDI, Kellen et al. Fluorescence assays for measuring fatty acid binding and transport through membranes. *Methods in Membrane Lipids*, p. 237-255, 2007.
- [2] MACDONALD, A. G. et al. Temperature, pressure and cholesterol effects on bilayer fluidity; a comparison of pyrene excimer/monomer ratios with the steady-state fluorescence polarization of diphenylhexatriene in liposomes and microsomes. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Biomembranes*, v. 938, n. 2, p. 231-242, 1988.
- [3] MARTIN, Maria Laura et al. Sustained activation of sphingomyelin synthase by 2-hydroxyoleic acid induces sphingolipidosis in tumor cells1 [S]. *Journal of lipid research*, v. 54, n. 5, p. 1457-1465, 2013.

## UV-ÔMETRO - SENSOR DE ULTRAVIOLETA COM ARDUINO E A SAÚDE HUMANA: UMA PROPOSTA PARA O ENSINO-APRENDIZAGEM

**R.A. Leite\*<sup>1</sup>, R.C. Viscocini<sup>2</sup>, M.A.C. Melo<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

<sup>2</sup>Departamento de Ciências, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Goioerê-PR, Brasil.

\*Corresponding author's email: [raleite@uem.br](mailto:raleite@uem.br)

**Palavras-chave:** Ensino Interdisciplinar; Radiação UV; Protótipo.

O objetivo neste trabalho foi projetar, desenvolver e aplicar um Produto Educacional na disciplina de Física, tendo a interdisciplinaridade com a Biologia e Química, tangente à Saúde Humana, visando a contextualização e a utilização deste como um Aparato Experimental e uma Proposta Didática no estudo das Ondas Eletromagnéticas, em específico a Radiação Ultravioleta, conceito contemplado em Eletromagnetismo, Óptica e Física Moderna. Para a elaboração do UV-ômetro, aparato experimental de custo acessível, utilizou-se a plataforma de prototipagem Arduino e componentes eletrônicos para aferir a radiação ultravioleta utilizando o índice UV. Assim, o presente trabalho valeu-se da Teoria de Aprendizagem Significativa de Ausubel e Moreira, e dos Mapas Conceituais de Novak – fazendo uso de quadros de afirmações (pré e pós aula) e elaborando atividades utilizando o UV-ômetro. Essas tecnologias educacionais foram ajuntadas em uma Proposta Didática com o tema da Radiação Ultravioleta, que trabalha os conceitos, fenômenos relevantes, aplicações e a importância da interação com a Saúde Humana. A Proposta Didática foi aplicada em turmas de segundo e terceiro ano do Ensino Médio. Pensando nos processos de ensino–aprendizagem, os conteúdos abordados foram colocados de forma que estivessem em consonância com os documentos que norteiam o Ensino de Ciências da Natureza, em especial a Base Nacional Comum Curricular (BNCC – 2018) e o Currículo da Rede Estadual Paranaense (CREP – 2020). Procurou-se fazer com que o aluno fosse sujeito ativo e protagonista no processo de ensino-aprendizagem e, a partir dos subsunçores, desenvolvesse as habilidades de discutir, investigar, interpretar, construir e analisar como parte de sua rotina de estudo, assim, visou-se que este observasse o seu modo de aprender e, conseqüentemente, ampliase seus subsunçores. Portanto, o estudante deixou de ser um sujeito passivo, mero receptor de informações do professor e do livro didático, e passou a ser sujeito ativo no processo de ensino–aprendizagem.

### INTRODUÇÃO

Já imaginou ter o Índice Ultravioleta local a qualquer momento? Melhor ainda, antes de se expor a Radiação Solar? Isso é possível com a utilização do aparato aqui proposto. E, além disso, ele pode ser utilizado como um recurso didático para o processo de ensino-aprendizagem, onde podemos trabalhar com metodologias ativas e aprendizagem significativa, desta maneira, fazendo o aluno ser protagonista e o professor deixando de ser a figura principal, inserindo uma forma dinâmica de ensinar e aprender com recurso experimental e interdisciplinar.

No Brasil, o Ensino de Física, em nível médio, tem crescido em sentido de inovação de recursos instrucionais e projetos para trabalhar temas mais complexos e interdisciplinares, abordados antes

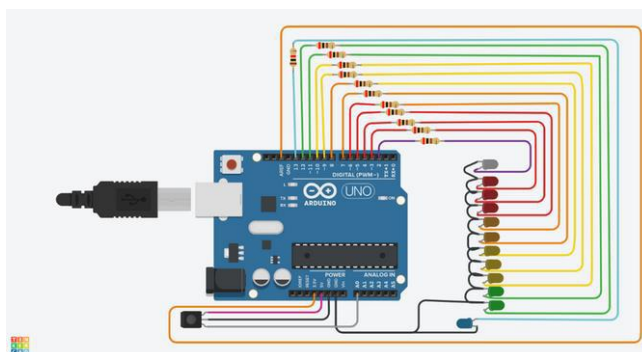
somente em aulas teóricas desvinculadas das atividades experimentais, como é o exemplo em Radiação Ultravioleta, conceito contemplado em Eletromagnetismo, Óptica e Física Moderna e que tem interação direta com áreas da Biologia e Química.

O material completo está disponível para download na página do MNPEF/DFI/UEM (<http://www.dfi.uem.br/dfimestrado/?q=node/60>) e pode ser adaptado de acordo com a realidade de cada série pelo docente interessado.

## MATERIAIS E MÉTODOS

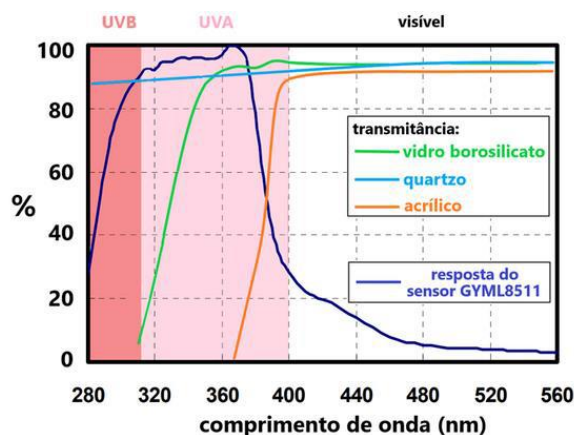
### UV-ômetro

Foi projetado e desenvolvido o UV-ômetro, utilizando a plataforma Arduino, um sensor ml8511 para radiação ultravioleta (A e B) e componentes eletrônicos, em que, por meio da programação física e com o desenvolvimento do código de programação, pode aferir a radiação ultravioleta e indicar o índice UV local na tela com LEDs coloridos.



**Figura 1** – Cópia de tela do site: <https://www.tinkercad.com/dashboard>, esquema com Arduino e outros componentes, esquema eletrônico desenvolvido pelo autor. Fonte: o autor (2021).

A calibração foi realizada com os dados oficiais do Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE) e Estação Climática Principal de Maringá (ECPM). Foi levado em consideração a instalação de revestimos, uma vez que o aparato fica exposto a intempéries



**Figura 2** – Comparação da absorção de diferentes materiais na faixa do visível acima de 400 nm), UVA (315 a 400 nm) e UVB (abaixo de 315 nm), junto com a curva de resposta do sensor utilizado neste trabalho. Fonte: adaptada de Sanatron (2016) acrílico –, Metaglas (2021) borosilicato, Tydexoptics (2021) quartzo – e Lapis (2013) – sensor –.

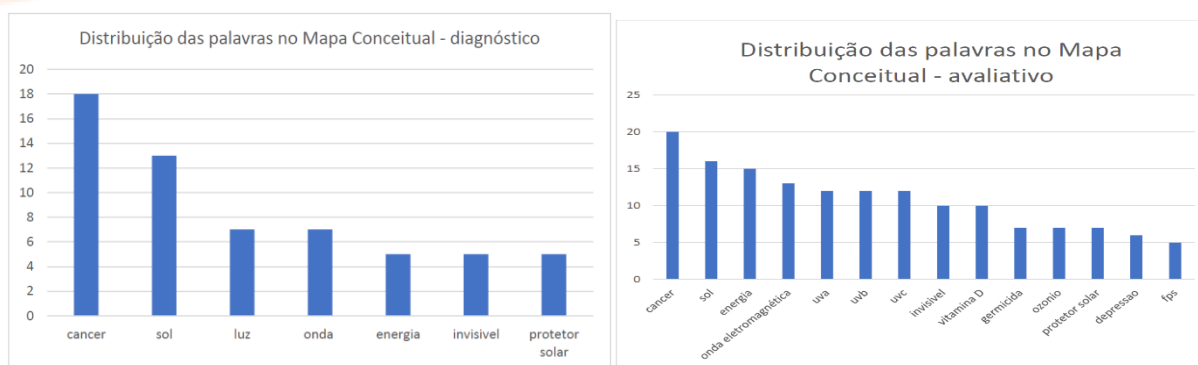
## Proposta Didática

Para a Proposta Didática (PD) sugere-se a Teoria de Aprendizagem Ausubel, Moreira e Novak e a elaboração de atividades com o UV-ômetro, os fenômenos relevantes, aplicações e a importância da interação com a Saúde Humana, podendo ser aplicada em turmas de 2º e 3º do EM.

A utilização da Proposta Didática (PD) sobre Ondas Eletromagnéticas, com ênfase em Radiação Ultravioleta, é conteúdo descrito na Base Nacional Comum Curricular (BNCC), no Currículo da Rede Estadual Paranaense (CREP) e Referencial Curricular Paranaense para o Novo Ensino Médio

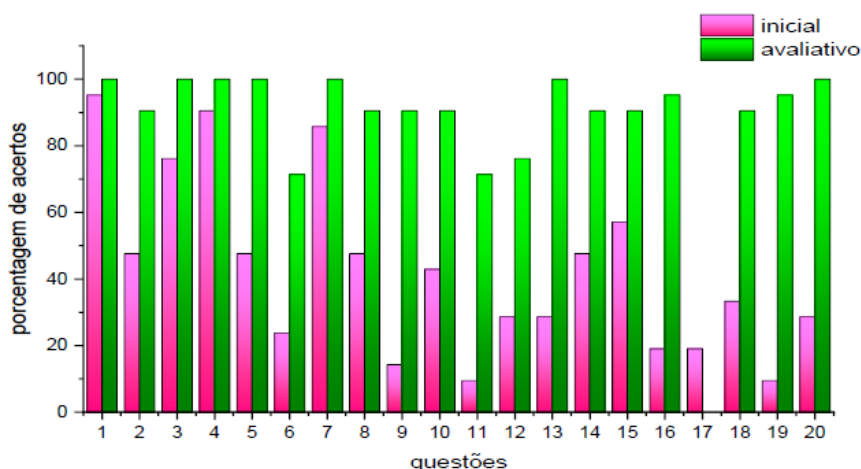
## RESULTADOS E DISCUSSÃO

A primeira atividade foi fazer um mapa conceitual, assim como o mapa conceitual foi a última atividade realizada na aplicação da PD. A figura 3 ilustra a distribuição de palavras conceituais, que foi utilizada como uma forma de avaliação.

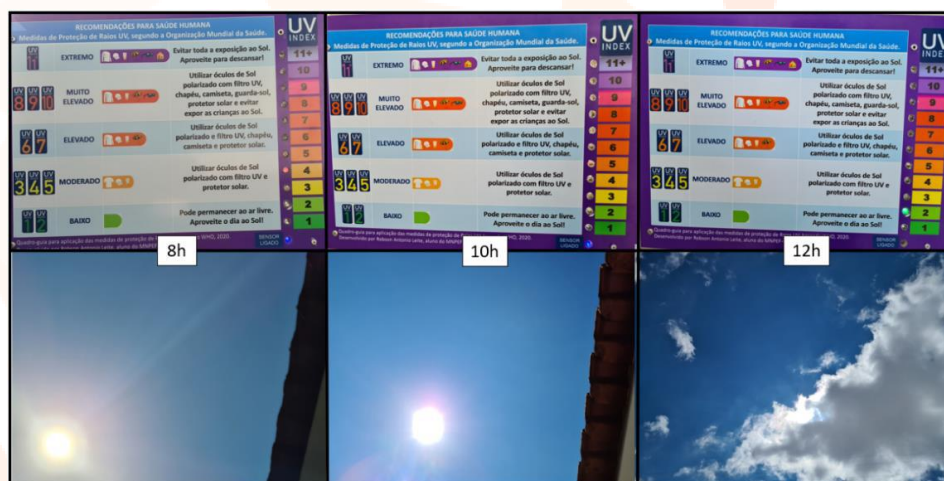


**Figura 3** – (a) Gráfico de barras de distribuição dos conceitos nos mapas conceituais diagnósticos com frequência igual ou maior a 20%. (b) Gráfico de distribuição dos conceitos apresentados nos mapas conceituais avaliativos com frequência igual ou maior a 20%. Fonte: o autor (2021).

Outra atividade proposta e realizada pelos alunos foi um questionário, elaborado pelo autor, que continham conceitos de física e interdisciplinares, este também foi realizado antes e depois da aplicação das atividades com o UV-ômetro, a figura 4 traz a comparação entre os questionários iniciais e os finais.



**Figura 4** – Comparação entre os acertos do formulário inicial e avaliativo. Fonte: o autor (2021).



**Figura 5** – Fotografia das aferições dos dados de IUV e das condições do tempo atmosférico no momento das aferições dos dados de IUV, em três horários diferentes no dia 08 mar. 2021. Fonte: o autor (2021).

Algumas das atividades que foram propostas aos alunos eram para que eles tivessem autonomia ao realizar as observações e coleta dos dados no equipamento, mas, gerando arquivos audiovisuais três vezes ao dia, às 8h, às 10h e às 12h, por sete dias e a partir desta coletânea, Figura 5, utilizaram os arquivos para transpor os dados nas tabelas, gráficos e discussões posteriores.

## CONCLUSÕES

O UV-ômetro desenvolvido é um instrumento para conferir o índice ultravioleta (IUV) que tem caráter prático e interdisciplinar ao estudo das radiações em sala de aula, pode promover aprendizagem significativas com mudanças na interpretação dos papéis desempenhados pela Radiação Ultravioleta, bem como pode levar a aquisição do hábito de consultar o IUV e de planejar o melhor horário para aproveitar os efeitos benéficos e evitar os seus efeitos maléficos. Além de ser um recurso didático, o mesmo pode ser utilizado para diversas outras atribuições no auxílio para atividades em que estejam humanos expostos a radiação solar.

## REFERÊNCIAS

[1] R.A. LEITE. A Luz Ultravioleta E A Saúde Humana: uma abordagem da física no contexto de ciências da natureza na BNCC. Maringá, PR. 218p. Orientador: Prof. Dr. Mauricio A. C. Melo. Coorientador: Prof. Dr. Ronaldo C. Viscovini. Dissertação (Mestrado Profissional) - Universidade Estadual de Maringá, Centro de Ciências Exatas, Departamento de Física, Programa em Mestrado Nacional Profissional em Ensino de Física (MNPEF), 2022.

## OTIMIZANDO O DESIGN DE MATERIAIS COM O USO DE APRENDIZADO DE MÁQUINA

H.N. Machado<sup>\*1</sup>, G.S. Dias<sup>1</sup>, I.A. Santos<sup>1</sup>, V.F. Freitas<sup>2</sup>, L.F. Cótica<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

<sup>2</sup>Departamento de Física, Universidade Estadual do Centro Oeste, UNICENTRO – Guarapuava-PR, Brasil

\*Corresponding author's email: [pg55520@uem.br](mailto:pg55520@uem.br)

**Palavras-chave:** Aprendizado de máquina; Ciência dos materiais; Perovskitas.

Novas tecnologias demandam materiais inovadores e com excepcional performance. Tendo em vista que os tradicionais métodos experimentais e computacionais voltados ao desenvolvimento de materiais normalmente demandam longos períodos de tempo e consideráveis investimentos financeiros, este trabalho procura explorar o uso do aprendizado de máquina [1] em ciência dos materiais, especificamente na previsão de propriedades estruturais baseando-se em dados cristalográficos. Demonstrou-se a efetividade do uso de algoritmos de aprendizagem de máquina na previsão de parâmetros estruturais de materiais com estruturas cúbica e tetragonal, em especial perovskitas. Outrossim, determinou-se, a partir das previsões mencionadas, a polarização elétrica de perovskitas através da técnica *Geometrical Polarization Approach* (GPA) [2]. Os resultados destacam o potencial do aprendizado de máquina em ciência dos materiais, permitindo aos usuários explorar e prever, de maneira eficiente, propriedades de novos compostos.

### INTRODUÇÃO

As ciências dos materiais, campo interdisciplinar que abrange conceitos relacionados à física e engenharias, configura-se como um dos pilares do desenvolvimento de novas tecnologias nas mais variadas indústrias. Seu principal objetivo é compreender e prever propriedades de materiais ancorando-se tradicionalmente no método empírico de tentativa e erro, guiado por princípios físicos e leis químicas e/ou em simulações computacionais baseadas em modelos teóricos [3,4]. Contudo, nos anos recentes, a ciência orientada por dados (*data driven science*), a qual incorpora o uso de bancos de dados contendo informações provenientes de experimentos e/ou simulações computacionais, na análise e solução de problemas, tem ganhado a atenção de muitos cientistas de materiais, sobretudo por sua eficiência, acurácia e redução de custos operacionais. Nesse contexto, este trabalho busca fazer uso de algoritmos de aprendizado de máquina na previsão de parâmetros estruturais e elétricos, com foco específico em materiais ferroelétricos com estrutura perovskita.

### MATERIAIS E MÉTODOS

#### Aprendizado de máquina

O aprendizado de máquina pode ser definido como um processo automatizado que objetiva a extração de padrões em um banco de dados para produzir previsões (de um *target*, isto é, de uma propriedade)

de caráter estatístico. Para tanto, as amostras de um banco de dados devem conter *features*, ou seja, características que se correlacionam com um *target* desejado [5]. Outrossim, de maneira geral, cada uma das amostras contidas em um banco de dados (pode-se considerar um banco de dados como uma matriz de  $i$  linhas e  $j$  colunas) ocupa uma linha, enquanto as colunas armazenam *features* e *target*(s).

### Fluxo de trabalho adotado

A Figura 1 ilustra o fluxo de trabalho adotado neste estudo. Os bancos de dados exclusivos das estruturas cúbicas e tetragonais possuem, respectivamente, 7288 e 11549 compostos distintos. *Random Forest Regressor*, *Gradient Boosting Regressor* e *Ridge* compõem os modelos de aprendizado de máquina utilizados neste trabalho associados às previsões de maior acurácia.

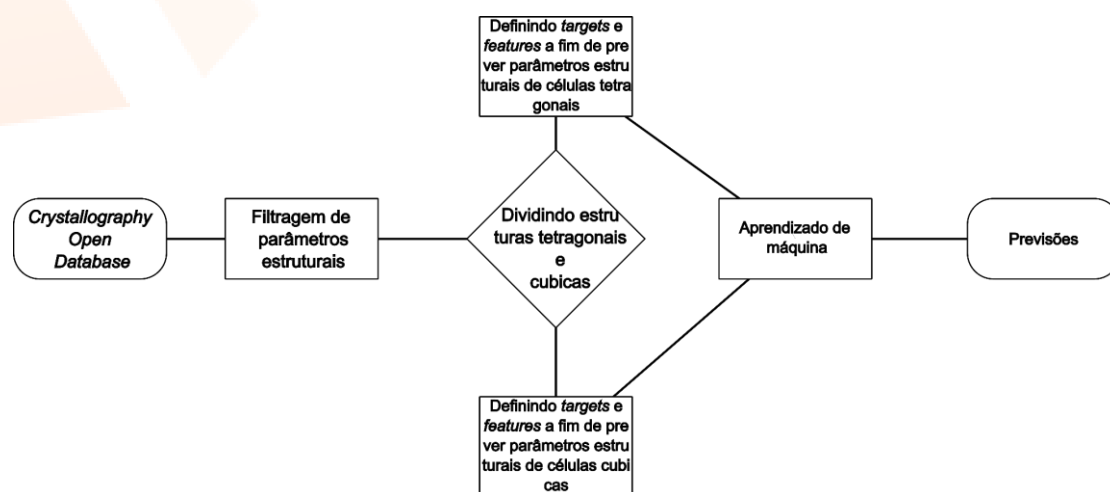
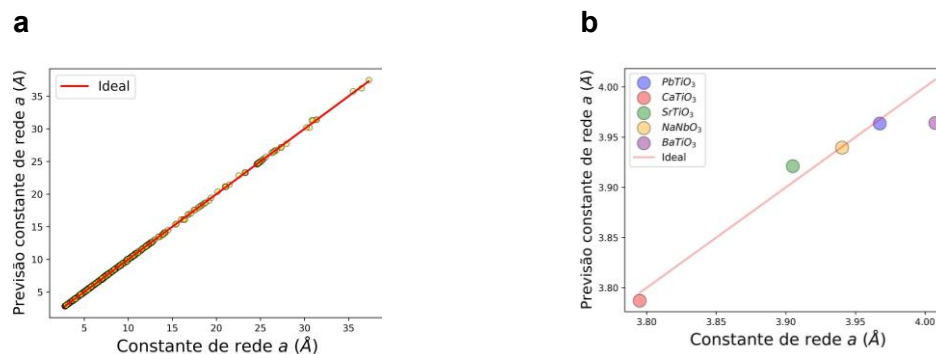


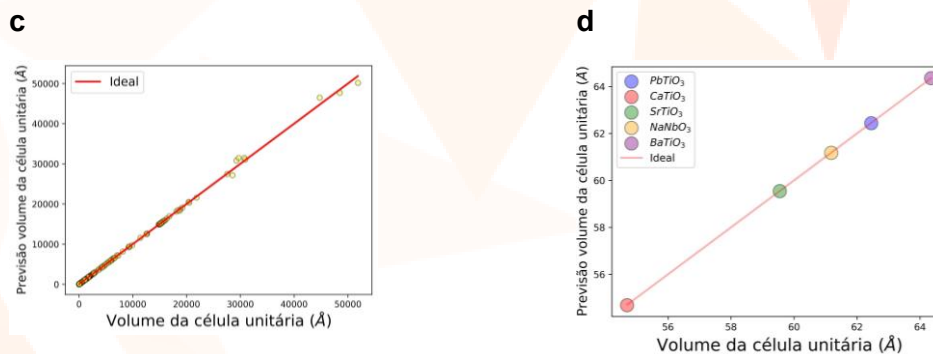
Figura 1 – Fluxograma dos procedimentos adotados.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

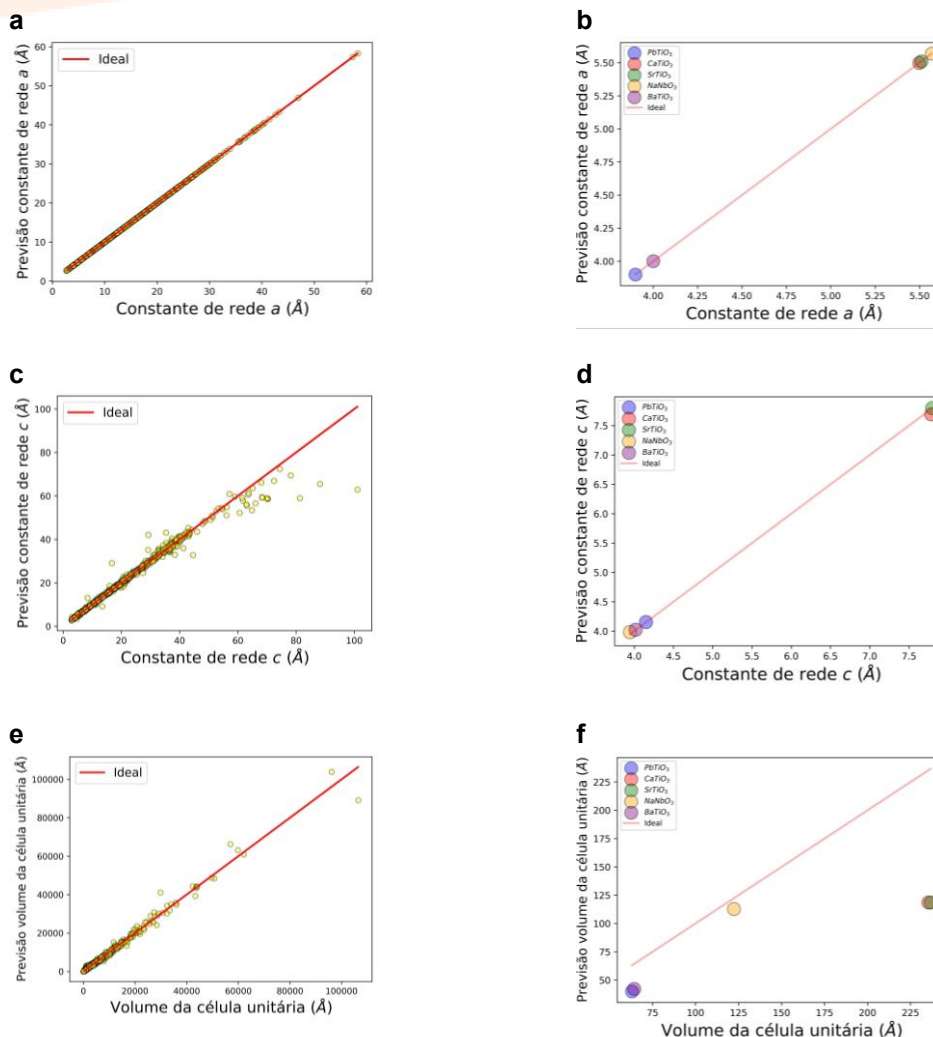
Os gráficos a-d na Fig. 2 e a-f na Fig. 3 apresentam de maneira gráfica a comparação entre os valores reais e previstos dos parâmetros de rede de materiais com simetria cúbica e tetragonal, respectivamente. Observa-se, com exceção dos resultados associados ao volume dos materiais tetragonais (Fig. 3-f), um acentuado grau de acurácia nas previsões obtidas a partir do uso de aprendizado de máquina.







**Figura 2** – Comparação entre os valores previstos e os valores reais. a e c compreendem todas as amostras destinadas ao teste. b e d, por sua vez, apenas materiais com estrutura perovskita.



**Figura 3** – Comparação entre os valores previstos e os valores reais. a, c e e compreendem todas as amostras destinadas ao teste. b, d e f, por sua vez, apenas materiais com estrutura perovskita.

Piskunov e colaboradores [6], empregando sete diferentes modelos teórico/computacionais para o cálculo de propriedades estruturais, determinaram o parâmetro de rede  $a$  de células cúbicas de perovskitas. Seus resultados apresentaram erro médio percentual de aproximadamente 3,57% em comparação aos valores reportados na literatura. Em nosso trabalho, o erro médio foi de 1,82%. Concomitantemente, os resultados obtidos aplicados à técnica GPA, forneceram as seguintes polarizações intrínsecas:  $14,617\mu\text{C}/\text{cm}^2$  e  $1,10 \cdot 10^{-7}\mu\text{C}/\text{cm}^2$  para os compostos  $\text{BaTiO}_3$  e  $\text{NaNbO}_3$ . Os valores calculados com os parâmetros “verdadeiros” são  $14,621\mu\text{C}/\text{cm}^2$  e  $0\mu\text{C}/\text{cm}^2$ , respectivamente. Esses resultados, demonstram o formidável potencial disruptivo do uso de aprendizado de máquina em ciência dos materiais.

## CONCLUSÕES

Os resultados apresentados apontam a eficácia do uso de modelos de aprendizado de máquina na previsão de propriedades estruturais de materiais com simetria cúbica e tetragonal, bem como da polarização intrínseca de perovskitas. Ademais, como referido, comparando-se conclusões provenientes da aplicação de técnicas tradicionais na determinação de propriedades estruturais de perovskitas, com resultados advindos do uso de aprendizado de máquina, conclui-se que o uso de aprendizado de máquina apresenta consideráveis vantagens em relação ao primeiro, o que revela o acentuado potencial desta técnica no campo das ciências dos materiais.

## REFERÊNCIAS

- [1] K.T. Butler, F. Oviedo, P. Canepa, Machine Learning in Materials Science, ACS, 2022.
- [2] V.F. Freitas, J.A. Eiras, L.F. Cótica, and I.A. Santos, *Ceramics International* 47, 943–952 (2021).
- [3] J. C. Hemminger, J. Sarrao, G. Crabtree, G. Flemming, and M. Ratner, “Challenges at the frontiers of matter and energy: Transformative opportunities for discovery science,” tech. rep., USDOE Office of Science (SC)(United States), 2015.
- [4] A. G. Kusne, T. Mueller, and R. Ramprasad, “Machine learning in materials science: Recent progress and emerging applications,” 2016.
- [5] J. D. Kelleher, B. Mac Namee, and A. D’arcy, *Fundamentals of machine learning for predictive data analytics: algorithms, worked examples, and case studies*. MIT press, 2020.
- [6] PISKUNOV, S. et al. Bulk properties and electronic structure of  $\text{SrTiO}_3$ ,  $\text{BaTiO}_3$ ,  $\text{PbTiO}_3$  perovskites: an ab initio HF/DFT study. *Computational Materials Science*, v. 29, n. 2, p. 165-178, 2004.

## DESENVOLVIMENTO DE NOVOS CONVERSORES ESPECTRAIS PARA CÉLULAS SOLARES HÍBRIDAS DE ALTO DESEMPENHO

M.M. Travain\*, L.C. Granatto, J.W. Berrar, B.S. Greatti, G.O. Marino, V.S. Zanuto, M.L. Baesso

Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

\*Corresponding author's email: [travainmm@gmail.com](mailto:travainmm@gmail.com)

**Palavras-chave:** Vidros aluminossilicato de cálcio; Luminescência; Titânio.

Neste trabalho foram produzidos vidros aluminossilicatos de cálcio (*Low Silica Calcium Aluminosilicate LSCAS*) dopados com  $TiO_2$  e  $Yb_2O_3$  com diferentes concentrações, pelo método de fusão e choque térmico em um forno a vácuo. Foram feitos o corte e o polimento das amostras, e as propriedades das amostras foram avaliadas por meio das técnicas de espectrofotometria e luminescência. O estudo busca o desenvolvimento de conversores espectrais para o infravermelho médio, visando aplicação em células solares de alto desempenho.

### INTRODUÇÃO

Vidros compostos do sistema ( $Al_2O_3$ -CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO), o qual é estudado no trabalho, foi estudado por Oprea e foi observado que o índice de refração aumenta conforme a concentração de CaO aumenta [1]. Dessa forma, essa composição vítrea também é denominada como Aluminossilicato de Cálcio com baixa concentração de Sílica (do inglês *Low Silica Calcium Aluminosilicate*), também conhecido como LSCAS.

O sistema aluminossilicato de cálcio possui excelentes propriedades físicas, o que resulta em uma alta eficiência quântica de emissão quando esses vidros são dopados com elementos terras-raras ou metais de transição [2]. Esses vidros podem ser utilizados em diversas aplicações tecnológicas como a fabricação de lasers e o desenvolvimento de conversores espectrais para placas solares de silício.

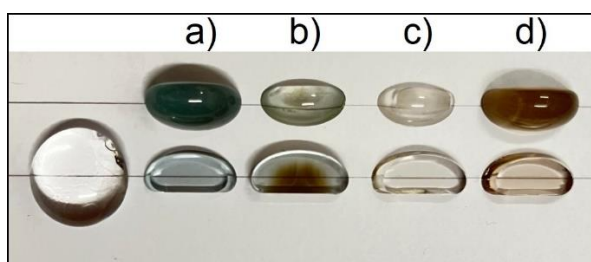
A espectrofotometria é uma técnica utilizada para a obtenção da transmitância de materiais (a porcentagem de luz que passa pelo material e não é refletida e/ou absorvida), e por meio dela pode-se obter a absorção da mesma. É fundamental para a caracterização das bandas de absorção do material, possibilitando a escolha do comprimento de onda que será utilizado para a excitação do material.

A espectroscopia de luminescência se trata da medição da intensidade de luz emitida pelo material quando é excitado por um estímulo luminoso, e serve para determinarmos qual material tem a emissão mais apropriada para ser utilizado como conversor espectral para uma célula de silício.

## MATERIAIS E MÉTODOS

O vidro LSCAS foi preparado com reagentes com alto grau de pureza (maior que 99,99%), e todos os reagentes foram devidamente pesados em uma balança analítica para serem preparadas amostras com cerca de seis gramas.

A composição nominal em peso percentual dos reagentes das amostras de titânio é regida pela relação:  $(47,4-x/2)\text{CaO}+(41,5-x/2)\text{Al}_2\text{O}_3+7\text{SiO}_2+4,1\text{MgO}+x\text{TiO}_2$ , em que  $x$  é a concentração de titânio sendo 0,2 ou 1,0. Já a composição das amostras com titânio e itérbio são regidas pela relação:  $(47,4-(1+y)/2)\text{CaO}+(41,5-(1+y)/2)\text{Al}_2\text{O}_3+7\text{SiO}_2+4,1\text{MgO}+1,0\text{TiO}_2+y\text{Yb}_2\text{O}_3$  em que  $y$  é a concentração de itérbio que varia entre 0,5 e 4,0 [3]. As amostras foram devidamente cortadas e polidas, parte delas sendo apresentadas na Figura 1.

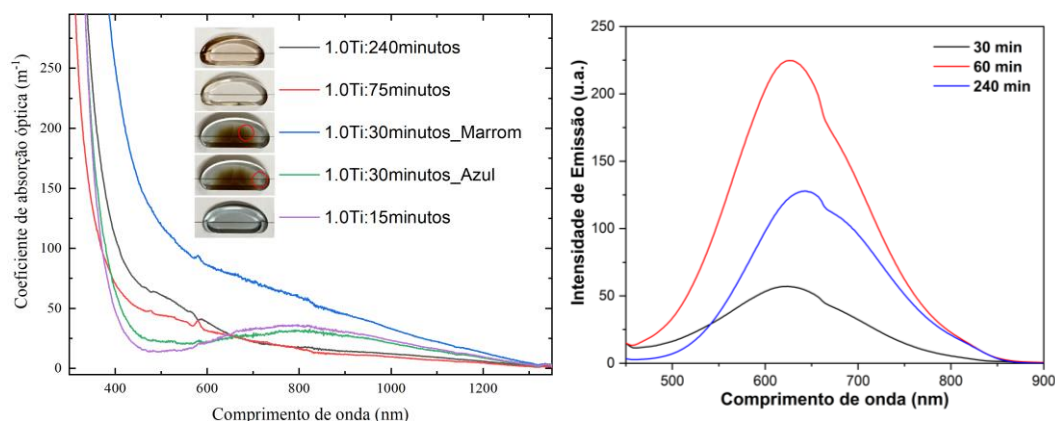


**Figura 1** – Foto das amostras ao lado de uma base de matriz LSCAS. a) 1,0% de  $\text{TiO}_2$  com 15 minutos de fusão, b) 1,0% de  $\text{TiO}_2$  com 30 minutos de fusão, c) 1,0% de  $\text{TiO}_2$  com 75 minutos de fusão e d) 1,0% de  $\text{TiO}_2$  com 240 minutos de fusão. Fonte: Autor (2023).

Após o polimento, os vidros foram analisados por espectrofotometria (Shimadzu, modelo UV-3600i Plus no modo transmitância, utilizando um passo de 1 nm para obtenção do espectro) e por espectroscopia de luminescência (excitação em 385nm e 915nm). Ambas as técnicas fizeram a varredura do espectro entre 200nm e 1600nm.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

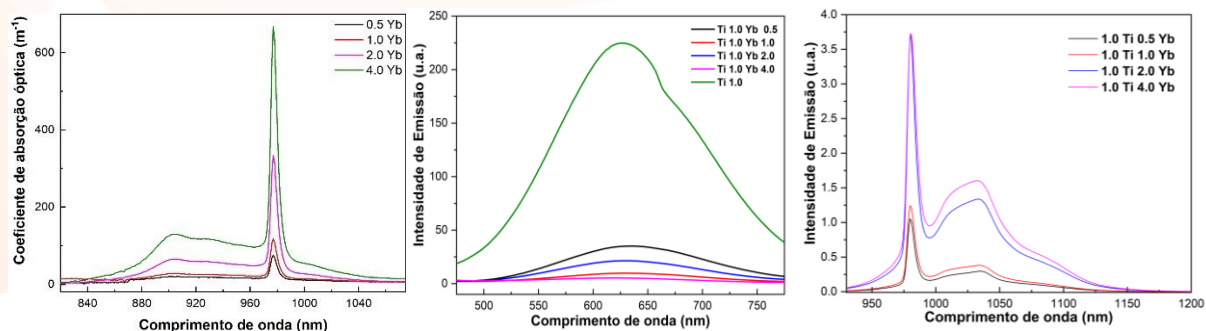
A Figura 2 apresenta as curvas do coeficiente de absorção óptica e intensidade de emissão das amostras dopadas com  $\text{TiO}_2$  produzidas sob diferentes intervalos de tempo de fusão.



**Figura 2** – a) Coeficientes de absorção óptica das amostras dopadas com  $\text{TiO}_2$  com diferentes intervalos de tempo de fusão. b) Intensidade de emissão das amostras dopadas com  $\text{TiO}_2$  excitadas em 385nm.

Na Figura 2.a vemos uma banda larga de absorção entre 600 e 1200 nm. Na Figura 2.b podemos ver uma banda de emissão característica do titânio entre 500 e 800 nm. Nota-se que o aumento do tempo de fusão faz crescer a emissão dos íons  $Ti^{3+}$  no vidro.

A Figura 3 apresenta as curvas do coeficiente de absorção óptica e intensidade de emissão das amostras codopadas com  $TiO_2$  e  $Yb_2O_3$



**Figura 3** – a) Coeficientes de absorção óptica das amostras codopadas com  $TiO_2$  e  $Yb_2O_3$ . b) Intensidade de emissão no visível das amostras codopadas com  $TiO_2$  e  $Yb_2O_3$ . c) Intensidade de emissão no infravermelho das amostras codopadas com  $TiO_2$  e  $Yb_2O_3$ .

Na Figura 3.a, vemos um pico de absorção próximo de 1000 nm e um ombro em 900 nm. Na Figura 3.b, observamos a banda larga de emissão característica do titânio. Como podemos constatar, a intensidade de emissão da amostra dopada com apenas titânio é mais elevada que as amostras codopadas com titânio e itérbio, e ainda, a intensidade de emissão das amostras decaem conforme aumenta-se a concentração de itérbio. Na Figura 3.c podemos ver o pico característico de emissão do itérbio próximo a 975 nm e um ombro em torno de 1025 nm. A intensidade de emissão nesse caso aumenta conforme a concentração é elevada. Isto demonstra que houve transferência de energia dos íons de  $Ti^{3+}$  para os de  $Yb^{3+}$ , o que é relevante para aplicação como fotoconversor espectral para células de silício, haja vista que a melhor resposta para conversão fotovoltaica do silício ocorre na região de 1030 nm.

## CONCLUSÕES

Por meio das medidas realizadas das amostras dopadas com titânio comparadas com as medidas das amostras codopadas com titânio e itérbio, podemos ver que a banda de emissão das amostras codopadas no visível (referente ao titânio) teve uma redução em relação as amostras dopadas puramente com titânio. Isso pode indicar uma transferência de energia por parte do titânio para o itérbio, intensificando a emissão das amostras codopadas na região do infravermelho.

## REFERÊNCIAS

- [1] FLIZIKOWSKI, G.A.S.; ZANUTO, V.S.; NOVATSKI, A.; NUNES, L.A.O.; MALACARNE, L.C.; BAESSO, M.L.; ASTRATH, N.G.C., Upconversion luminescence and hypersensitive transitions of  $Pr^{3+}$ -doped calcium aluminosilicate glasses, *Journal of Luminescence*, Volume 202, 2018, Pages 27-31,

[2] OPREA, C.; TOGAN, D.; POPESCU, C. Structure and properties of glasses with a low amount of  $\text{SiO}_2$  in a quaternary system of  $\text{Al}_2\text{O}_3$ - $\text{SiO}_2$ - $\text{CaO}$ - $\text{MgO}$ , *Thermochimica acta*, vol. 194, pp. 165–173, 1992.

[3] UHLMAN, E. V.; WEINBERG, M. C.; KREIDL, N. J.; BURGNER, L. L.; ZANONI, R.; CHURCH, K. H. Spectroscopic properties of rare-earth-doped calcium-aluminate-based glasses, *Journal of non-crystalline solids*, vol. 178, pp. 15–22, 1994.

## TERMOMETRIA ÓPTICA: UMA AVALIAÇÃO DO VIDRO ALUMINOSILICATO DE CÁLCIO DOPADO COM METAIS TERRAS RARAS

**J.G.B. Vedovelli\*, M.S. Gibin, M.L.Baesso, V.S. Zanuto**

Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

\*Corresponding author's email: [guilhermevedovelli@hotmail.com](mailto:guilhermevedovelli@hotmail.com)

**Palavras-chave:** Espectroscopia; dependência térmica; trivalente.

Temperatura é uma das mais importantes quantidades físicas, uma das variáveis de estado necessárias para se definir um sistema termodinâmico, sendo a temperatura a medida da energia térmica de um determinado corpo. A flutuação da temperatura possui uma função de grande importância para inumeráveis processos, tanto naturais quanto desenvolvidos pela ciência. Sendo assim, a determinação da temperatura e sua flutuação com precisão é uma demanda contínua em diversas áreas de pesquisa e tecnologia. Com a evolução do desenvolvimento de sistemas microscópicos, também se faz necessário desenvolver sensores de temperatura na escala microscópica. Os candidatos com maiores chances de ser utilizados como sensores de temperatura microscópicos são os termômetros ópticos. Este trabalho apresenta um estudo da possível utilização do vidro aluminossilicato de cálcio dopado com diferentes metais terras-raras como um potencial candidato a termômetro óptico de alta precisão. Como uma análise inicial, apenas para saber sobre a resposta termométrica, foram escolhidos os metais: Praseodímio, Neodímio e Érbio. Para cada dopante foram analisados qualitativamente os espectros de fotoluminescência em função da temperatura.

### INTRODUÇÃO

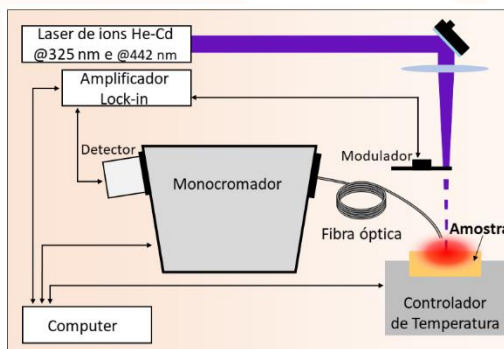
Materiais que possuem a vantagem de serem remotos, de rápida resposta e passivos eletromagneticamente vêm sendo muito estudados, denominados por termômetros ópticos. Estes ainda possuem alta sensibilidade tanto com relação à temperatura, quanto à definição espacial [1-3]. Nas últimas décadas, foram reportados diferentes materiais luminescentes que possuem emissões dependentes da temperatura. Essa dependência pode ser observada como um deslocamento espectral de algum pico/banda de emissão característica, ou variação no tempo de vida de emissão, ou ainda, a variação na razão da intensidade de dois picos/bandas de emissões características. Esta última dependência, denominada de *Fluorescence Intensity Ratio* (FIR), tem demonstrado melhores resultados quanto a repetibilidade, e sensibilidade. Além de ser a dependência mais favorável de eliminar possíveis necessidades de calibração prévia à utilização.

### MATERIAIS E MÉTODOS

Espectroscopia de emissão

Para este trabalho, as amostras utilizadas neste trabalho foram cedidas pelo prof. Dr. Mauro Luciano Baesso. A configuração foi composta por um laser de excitação de Hélio - Cádmi (He-Cd) com

comprimento de onda selecionável de 325nm e 442nm. O comprimento de onda de excitação para cada amostra foi selecionado de acordo com sua melhor absorção. Na Figura 1, podemos ver a montagem experimental usada para aferir a intensidade de emissão e da temperatura por meio de um termômetro termopar tipo K. As amostras foram submetidas a variação de temperatura de 10 °C até 60 °C, com um passo de 10°C a cada medida.

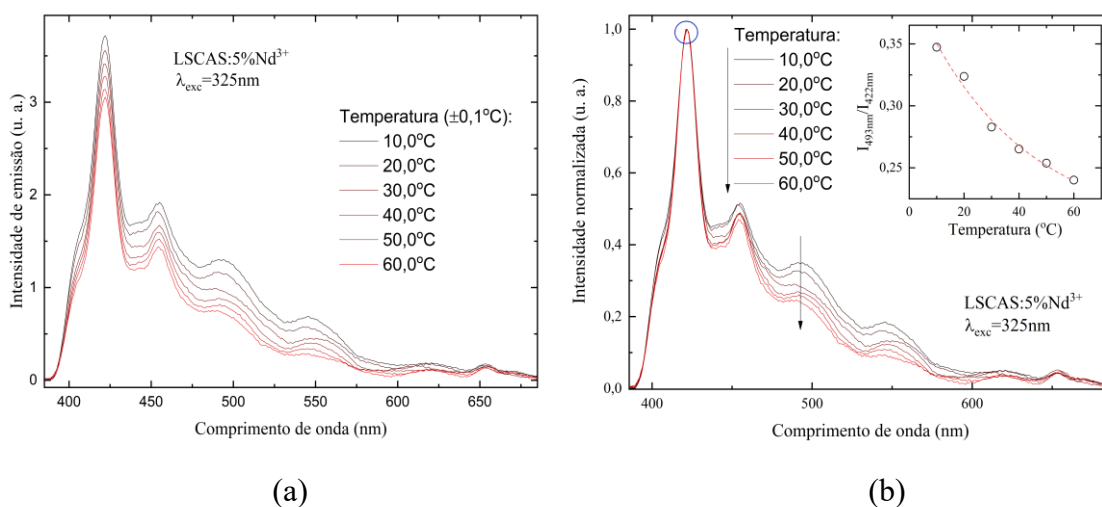


**Figura 1** – Montagem experimental de fotoluminescência com temperatura controlável.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

### Neodímio ( $\text{Nd}^{3+}$ )

O primeiro terra rara que será avaliado é o Neodímio, este que há extensa literatura sobre sua utilidade e que já é utilizado como cavidade laser. O íon apresenta emissões em energias do visível e ultravioleta, podendo absorver em todos esses comprimentos de onda. No entanto, pelo fato de possuir tantos níveis, eles acabam ficando muito próximos uns dos outros, assim, favorecendo o decaimento pro transições não radiativas, ou seja, por relaxação multi-fônon (Multi-phonon relaxation), acarretando perdas térmicas para o sistema que está inserido. Porém, ainda sim, há emissão radiativas no visível consideráveis, logo o uso para emissão laser.



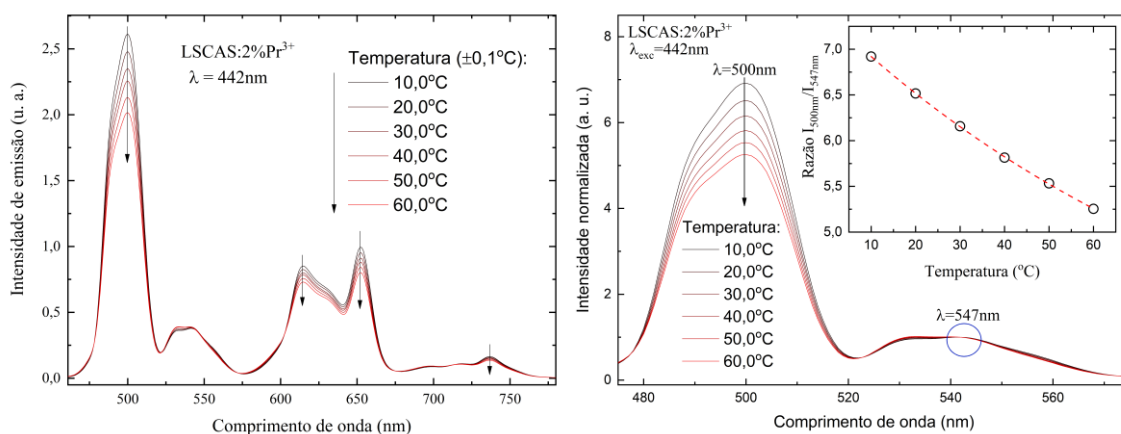
**Figura 2** – Emissão do  $\text{Nd}^{3+}$  variando a temperatura da amostra: (a) curva sem normalização e (b) normalizada pela emissão em 422nm.



Podemos ver na Figura 2(a) que, o espectro inteiro tem sua intensidade menor conforme se aumenta a temperatura, isso de certa forma é esperado, já que ocorre o efeito de *temperature quenching*, o que não é desejável para ser usado como efeito termométrico, já que impede a possibilidade de calibração, ou a torna difícil, e pode introduzir erros em aferições. Porém como pode ser visto na Figura 2(b), ao normalizar em 422 nm, podemos ver uma diminuição do pico em 493 nm, o que assim, pode ser usado como método termométrico.

### Praseodímio ( $\text{Pr}^{3+}$ )

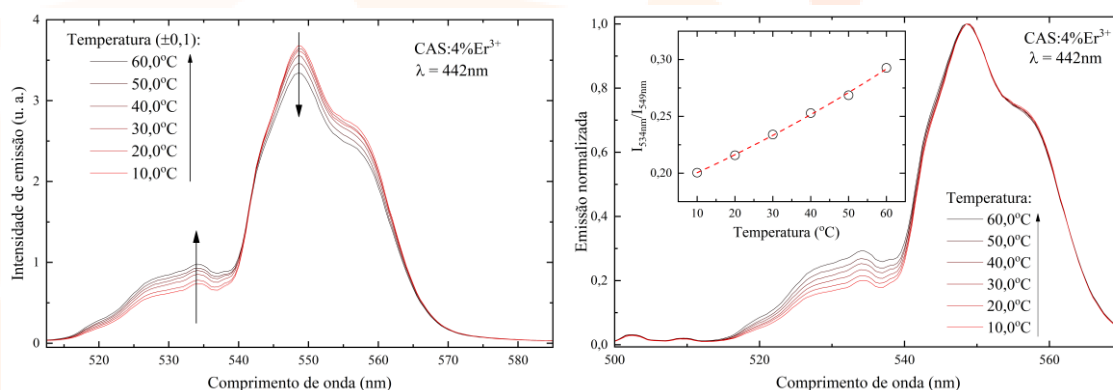
Outro íon que também é utilizado em cavidades laser, é o  $\text{Pr}^{3+}$ , principalmente no infravermelho em 1500 nm, comprimento de onda utilizado por telecomunicações. Porém ele também apresenta intensa emissão entre o verde e azul (487 a 550 nm), e outras mais fracas no vermelho (600 a 650 nm). Portanto, como pode ser visto que, os níveis ficam mais separados que o Neodímio, tendo uma emissão mais ampla, tem outra importante característica, não sofre de *temperature quenching*, logo, pode ser facilmente calibrado como um termômetro. Na Figura 3(a) e 3(b), podemos ver seu espectro variando na temperatura, onde nem todos os picos variam, tornando os picos constante, excelentes pontos de calibração.



**Figura 3** – Emissão do  $\text{Pr}^{3+}$  variando a temperatura da amostra: (a) curva sem normalização e (b) normalizada pela emissão em 547nm.

### Érbio ( $\text{Er}^{3+}$ )

Como o Praseodímio, o íon  $\text{Er}^{3+}$ , também tem sua pesquisa mais focada na sua banda em 1550 nm, só que também tem uma banda bem forte na região do verde. Assim, como pode ser visto nas Figuras 4(a) e 4(b), há um padrão diferente dos outros metais, onde a banda de maior energia é favorecida enquanto a de menor energia é desfavorecida no decaimento radiativo, com o aumento da temperatura, tornando mais clara ainda a dependência com a temperatura e assim um excelente potencial termométrico.



**Figura 4** – Emissão do Er<sup>3+</sup> variando a temperatura da amostra: (a) curva sem normalização e (b) normalizada pela emissão em 547nm.

## CONCLUSÕES

Utilizando o fenômeno de fotoluminescência, neste trabalho foi possível medir a resposta termométrica dos íons de Neodímio, Praseodímio e Érbio, onde todos tiveram resultados promissores, no entanto, com a análise de variação de emissão e possibilidade de calibração mais fácil, Érbio ficou como a melhor resposta termométrica desses íons, tendo uma emissão consideravelmente melhor.

## REFERÊNCIAS

- [1] V. S. Zanuto, L. S. Herculano, M. L. Baesso, G. V. B. Lukasiewicz, C. Jacinto, L. C. Malacarne and N. G. C. Astrath, Thermal mirror spectroscopy: an experimental investigation of optical glasses, *Optical Materials* 35, 1129 – 1133 (2013).
- [2] D. F. de Sousa, L. A. O. Nunes, J. H. Rohling, M. L. Baesso, Laser emission at 1077nm in Nd<sup>3+</sup>-doped calcium aluminosilicate glass, *Applied Physics. B, Lasers and Optics* 77, 59-63 (2003).
- [3] G. A. S. Flizikowski, V. S. Zanuto, L. A. O. Nunes, M. L. Baesso, L. C. Malacarne, N. G. C. Astrath, Standard and modified Judd-Ofelt theories in Pr<sup>3+</sup>-doped calcium aluminosilicate glasses: A comparative analysis, *Journal of Alloys and Compounds* 780, 705-710 (2019)..

## EFEITOS DE ALTAS PRESSÕES NAS PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E LUMINESCENTES DE VIDROS SILICATOS DE CÁLCIO E SÓDIO DOPADOS E CO-DOPADOS COM $\text{Eu}^{3+}$ , $\text{Nd}^{3+}$ E $\text{Yb}^{3+}$

P.L. Santos<sup>\*,1</sup>, A.N. Medina<sup>1</sup>, R.F. Muniz<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

<sup>2</sup>Departamento de Ciências, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Goioerê-PR, Brasil.

\*Corresponding author's email: [patricialimasantos35@gmail.com](mailto:patricialimasantos35@gmail.com)

**Palavras-chave:** Vidros. Células Bigorna de Diamante. Propriedades Estruturais e Luminescentes.

Este estudo abordou o impacto da compressão hidrostática nas propriedades estruturais e luminescentes de vidros, buscando compreender os efeitos da densificação em escala atômica. Utilizando espectroscopia Raman e luminescência, foram investigadas as propriedades estruturais e eletrônicas, incluindo os processos de transferência de energia entre os íons dopantes. Duas amostras de vidro foram analisadas: uma dopada com  $\text{Eu}^{3+}$  e a outra co-dopada com íons  $\text{Nd}^{3+}$  e  $\text{Yb}^{3+}$ , submetidas a altas pressões utilizando células de bigorna de diamante do tipo DAC. Para a primeira amostra, a pressão máxima foi 30,28 GPa, revelando incompressibilidade até certo ponto, resultando em transições amorfas e o surgimento de uma nova fase amorfa estável, com densificação permanente alcançada após o ciclo de compressão. Na segunda amostra, foram investigadas as propriedades luminescentes sob compressão de até 18,40 GPa.

### INTRODUÇÃO

O uso difundido de vidros em aplicações cotidianas, remonta a tempos antigos onde eram considerados tesouros pelos egípcios e desempenharam um papel crucial na evolução da sociedade. Na era da tecnologia, os vidros desempenham funções fundamentais, especialmente em eletrônicos e telecomunicações [1]. Compreender o comportamento desses materiais sob altas pressões é fundamental para entender como estes materiais funcionam sob tais condições [2].

Este estudo busca compreender a resposta de matrizes vítreas de Silicato de Cálcio e Sódio a solicitações mecânicas de altas pressões (dezenas de GPa), investigando como a compressão influencia sua estrutura e propriedades luminescentes através das técnicas de caracterização de espectroscopia Raman e de luminescência. É importante compreender as transições estruturais e os mecanismos de densificação gradual ou abrupta dos vidros. No entanto, a desordem atômica nos vidros e as restrições experimentais tornam a análise detalhada sob altas pressões uma tarefa complexa [3].

A transferência de energia entre íons de terras raras em matrizes vítreas co-dopadas pode melhorar a eficiência de placas de energia solar ao reduzir as perdas de energia por termalização de células fotovoltaicas ao melhorar a eficiência de conversão do espectro de energia solar [4,5]. Diante disto, este estudo buscou compreender como a aplicação de pressão afeta os processos de transferência de energia na matriz de vidro SCS co-dopada com o par  $\text{Nd}^{3+}/\text{Yb}^{3+}$ .

## MATERIAIS E MÉTODOS

A síntese dos vidros foi realizada por meio da técnica de melting-quenching, utilizando reagentes químicos de alto grau de pureza (4 e 5N), composição conforme Tabela 1.

**Tabela 1:** Composição das amostras sinterizadas em % de mol.

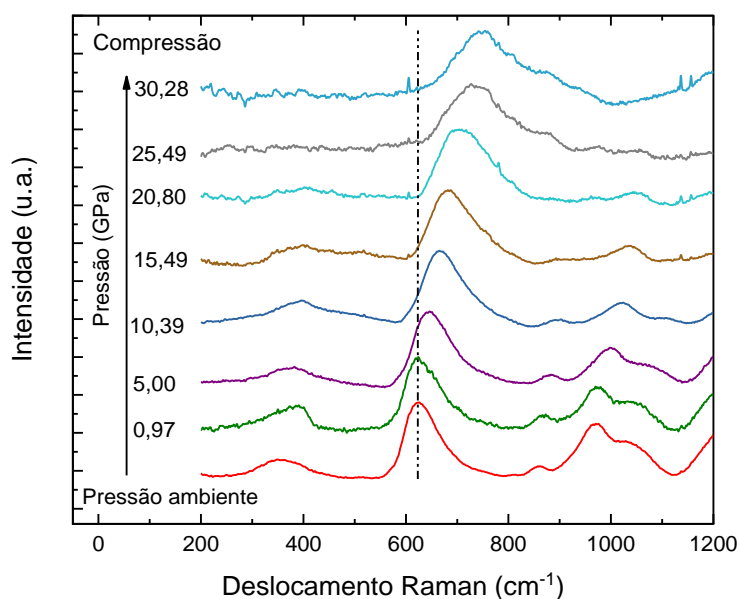
Amostra	SiO <sub>2</sub>	CaO	Na <sub>2</sub> O	CaF <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Eu <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Nd <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Yb <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
SCS-Eu	50,00	12,45	28,95	7,50	1,00	0,10	0,00	0,00
SCS-Nd/Yb	50,00	14,40	25,90	7,50	1,00	0,00	0,20	1,00

A célula de pressão foi montada de modo convencional e carregada com as amostras. A pressão a que a amostra estava submetida foi estimada através dos deslocamentos dos espectros do rubi.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

### Análise Estrutural Via Espectroscopia Raman

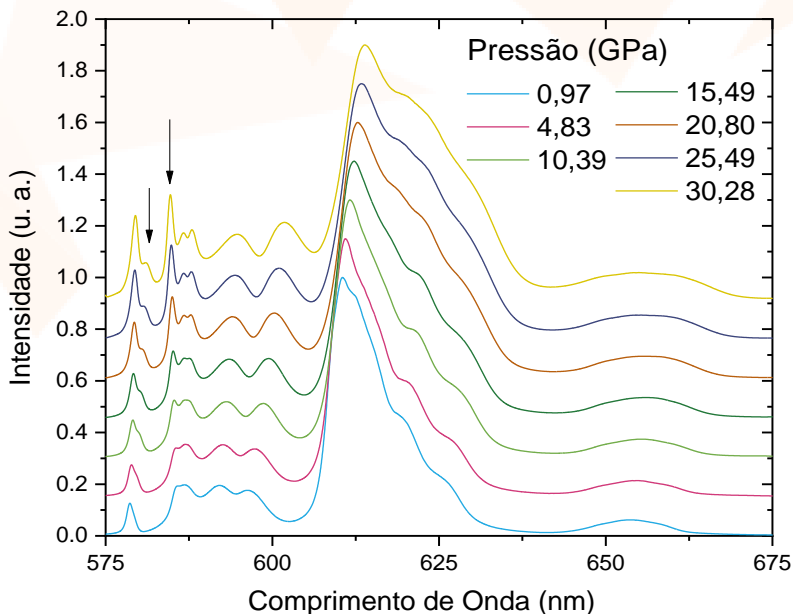
A Figura 1 apresenta a evolução dos espectros Raman in situ da amostra SCS:Eu com o aumento de pressão, à temperatura ambiente.



**Figura 1** – Evolução dos espectros Raman da amostra SCS:Eu sob compressão em incrementos aproximados de 5 GPa. A linha de excitação utilizada foi 785 nm.

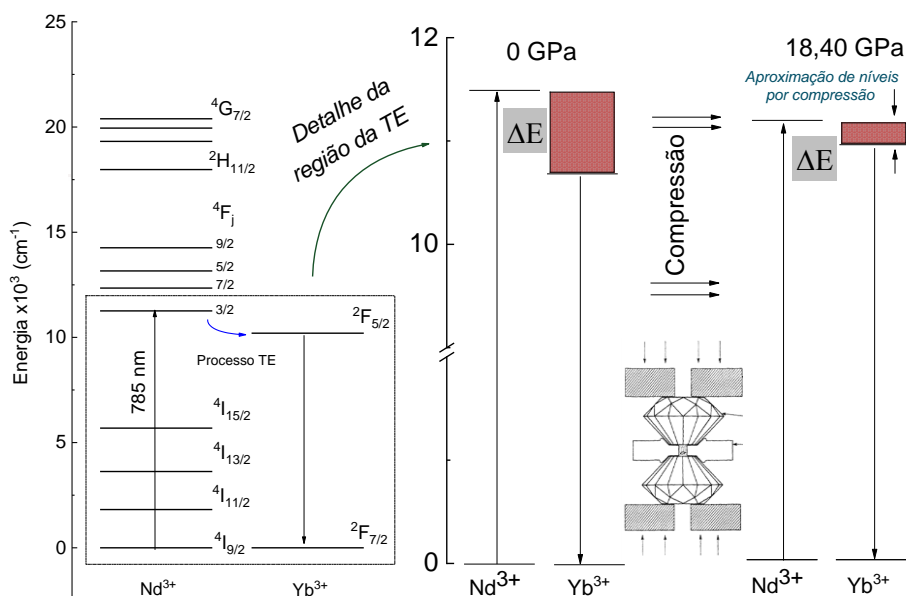
Pode-se observar alterações na forma do espectro Raman com a compressão. A evolução dos espectros com a pressão mostrou redução e alteração na forma dessas bandas a partir de pressões específicas mostrando transições de fase amorfa-amorfa que acontecem através da percolação de tetraedros de baixa conectividade para poliedros altamente coordenados com maior número de conexões como confirmado por Hasmy e colaboradores [6].

A Figura 2 mostra a evolução dos espectros de emissão da amostra SCS:Eu com a compressão. Essas medidas mostraram mudanças significativas na forma dos espectros sendo a principal o deslocamento para regiões de menor energia.



**Figura 2** - Evolução dos espectros de emissão da amostra SCS:NdYb sob compressão em incrementos aproximados de 5 GPa.

A Figura 3 mostra como a compressão afetou a diferença de energia entre os níveis excitados do  $Nd^{3+}$  e  $Yb^{3+}$ .



**Figura 3** - Redução entre os níveis de estados excitados dos íons.

À medida que a pressão aumenta, a diferença de energia entre os níveis do  $Nd^{3+}$  diminui de 11260 para 11240  $cm^{-1}$ , enquanto a diferença de energia entre os níveis do  $Yb^{3+}$  aumenta de 10200 para

10220  $\text{cm}^{-1}$ . Esse fenômeno resulta na aproximação dos estados excitados do  $\text{Nd}^{3+}$  e do  $\text{Yb}^{3+}$ , favorecendo a transferência de energia entre eles.

## CONCLUSÕES

Este estudo destacou a importância de compreender as mudanças estruturais dos vidros sob pressão extrema, evidenciando transformações amorfas, em intervalos de pressão específicos como confirmado através dos resultados obtidos a partir da amostra SCS:Eu. Foi possível verificar a partir do espectro de emissão da amostra SCS:NdYb que a compressão facilita o processo de transferência de energia, a partir destes resultados, este estudo também ressaltou o potencial para otimizar vidros dopados com íons de terras raras, como  $\text{Nd}^{3+}/\text{Yb}^{3+}$ , para melhorar a eficiência de fontes de energia limpa, como painéis solares, por meio do aprimoramento dos mecanismos de transferência de energia.

## REFERÊNCIAS

- [1] J. E. SHELBY, “Introduction to Glass Science and Technology”, 2. ed. Cambridge: The royal Society of Chemistry, 2005.”
- [2] R. F. Muniz, M. L. Baesso, F. Sato, A. C. Bento, J. H. Rohling, and A. N. Medina, “High pressure effect on the short- and intermediate-range structure of depolymerized soda lime silicate glass: Insights from micro-Raman spectroscopy,” *Vibrational Spectroscopy*, vol. 110, Sep. 2020, doi: 10.1016/j.vibspec.2020.103113.
- [3] R. F. Muniz V. S. Zanuto, M. S. Gibin, J. V. Gunha, A. Novatski, J. H. Rohling, A. N. Medina, M. L. Baesso, “Down- and up-conversion processes in  $\text{Nd}^{3+}/\text{Yb}^{3+}$  co-doped sodium calcium silicate glasses with concomitant  $\text{Yb}^{2+}$  assessment,” *Journal of Rare Earths*, Mar. 2022, doi: 10.1016/j.jre.2022.01.020.
- [5] Y. Tai, X. Li, and B. Pan, “Efficient near-infrared down conversion in  $\text{Nd}^{3+}/\text{Yb}^{3+}$  co-doped transparent nanostructured glass ceramics for photovoltaic application,” *Journal of Luminescence*, vol. 195, pp. 102–108, Mar. 2018, doi: 10.1016/j.jlumin.2017.10.051.
- [6] A. Hasmy, S. Ispas, and B. Hehlen, “Percolation transitions in compressed  $\text{SiO}_2$  glasses,” *Nature*, vol. 599, no. 7883, pp. 62–66, Nov. 2021, doi: 10.1038/s41586-021-03918-0.

# POTENCIALIZAÇÃO DA BLINDAGEM CONTRA RADIAÇÃO IONIZANTE EM VIDROS SILICATOS POR MEIO DA INCORPORAÇÃO DE ÓXIDOS MODIFICADORES

M.A. Silva<sup>\*1</sup>, V.S. Zanuto<sup>2</sup>, R.F. Muniz<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Ciências, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Goioerê-PR, Brasil.

<sup>2</sup>Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

\*Corresponding author's email: [muriloas.work@gmail.com](mailto:muriloas.work@gmail.com)

**Palavras-chave:** Vidros; Radiação ionizante; Blindagem contra radiação.

Este trabalho aborda um estudo que teve como objetivo investigar a capacidade de blindagem contra radiação de sistemas vítreos de silicato de baixo custo, reforçados com diferentes óxidos modificadores de rede. Para tal foi preparada uma série de amostras e empregadas simulações por meio do *software Phy-X/PSD* e realização de medidas experimentais utilizando isótopos de <sup>241</sup>Am e <sup>57</sup>Co. Foram determinados os parâmetros de blindagem e valores pontuais de energia. Foi constatado que da série de seis amostras preparadas, as amostras contendo bismuto, bário e telúrio foram as que apresentaram capacidades de blindagem superiores, comparáveis a dos vidros comerciais plumbíferos.

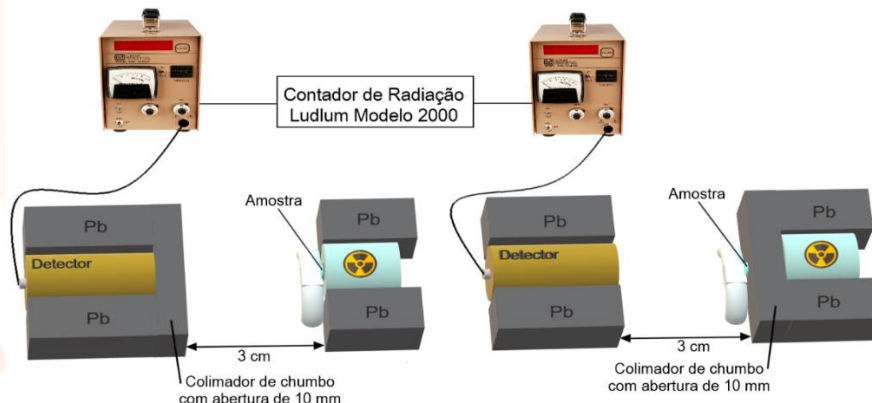
## INTRODUÇÃO

A radiação ionizante desempenha um papel benéfico em várias aplicações, no entanto, sem o devido controle, representa um risco para a saúde. Para mitigar os efeitos nocivos da radiação, é essencial o uso de blindagem, que atua como uma barreira física eficaz. Os cientistas enfrentam desafios para desenvolver materiais ecológicos e econômicos para essa blindagem. Embora o concreto seja comum, ele não é transparente, limitando seu uso [1]. Devido à sua transparência e à facilidade de produção, os vidros representam uma alternativa atrativa [2]. Este trabalho explora como diferentes óxidos modificadores podem influenciar as capacidades de blindagem de vidros silicatos de cálcio e sódio. Os parâmetros de blindagem investigados incluíram o coeficiente de atenuação linear (LAC), o coeficiente de atenuação de massa (MAC) e a camada semi-redutora (HVL). Esses parâmetros foram determinados tanto teoricamente, utilizando o *software Phy-X/PSD* [3], quanto experimentalmente, por meio de medidas de radiação com isótopos <sup>241</sup>Am (59,3 keV) e <sup>57</sup>Co (122 keV) em suas energias específicas.

## MATERIAIS E MÉTODOS

A preparação dos materiais para este trabalho envolveu uma série de seis amostras vítreas, conforme a relação  $50\text{SiO}_2-(10-x/3)\text{CaO}-(19-x/3)\text{Na}_2\text{O}_3-(20-x/3)\text{CaF}_2-1\text{Al}_2\text{O}_3-x$  (em que  $x = \text{BaO}, \text{ZnO}, \text{CoO}, \text{TeO}_2$  e  $\text{Bi}_2\text{O}_3$ ), em mol%. A substituição dos óxidos foi realizada em concentrações de 10% em mol. Essas amostras foram sintetizadas utilizando a técnica de *melting quenching*, resultando em amostras com alta resistência e qualidade óptica. As medidas experimentais utilizando radiação

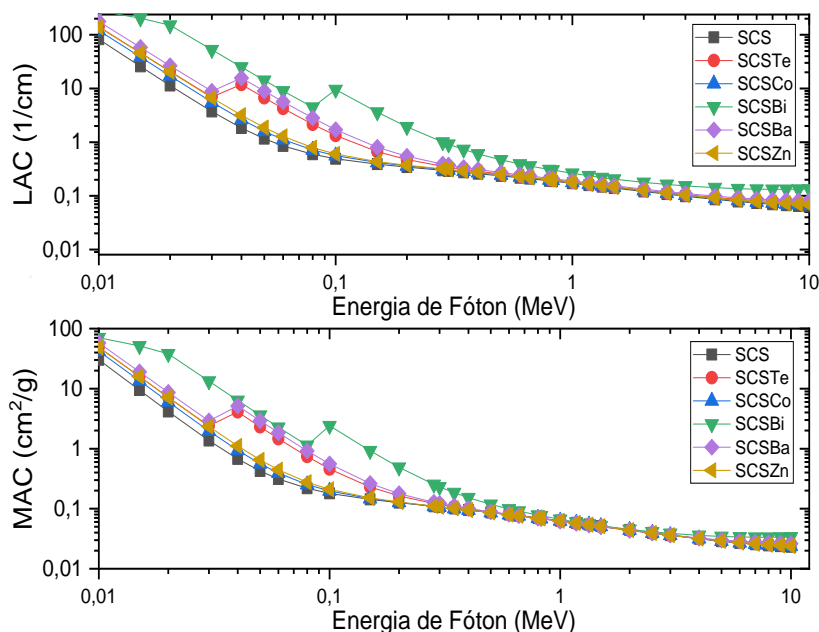
ionizante foram efetuados com fontes dos isótopos  $^{241}\text{Am}$  e  $^{57}\text{Co}$ . O detector utilizado foi o cintilador de iodeto de sódio (NaI(Tl)) modelo 1.125W1.75 fabricado pela Bicorn Corp, conectado ao contador de fótons Ludlum modelo 2000. A Figura 1 apresenta o esquema da montagem experimental utilizada.



**Figura 1** – Diagrama esquemático da montagem experimental utilizada para determinar os parâmetros de blindagem. A esquerda, com o  $^{241}\text{Am}$ , e a direita com o  $^{57}\text{Co}$ .

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

A Figura 2 exibe os valores de atenuação linear e de massa das amostras, abrangendo a faixa de energia de 100 keV a 10 MeV.



**Figura 1** – Coeficiente de Atenuação Linear (LAC) e Coeficiente de Atenuação de Massa (MAC) obtido via *Phy-X/PSD*.

Observa-se que a amostra SCSBi, apresentou os maiores valores de LAC e MAC, seguido pelas amostras SCSBa e SCSTe, apresentando assim melhores propriedades de blindagem em relação as demais. Nota-se uma mudança abrupta entre 30 e 40 keV para as amostras SCSBa e SCSTe, e entre



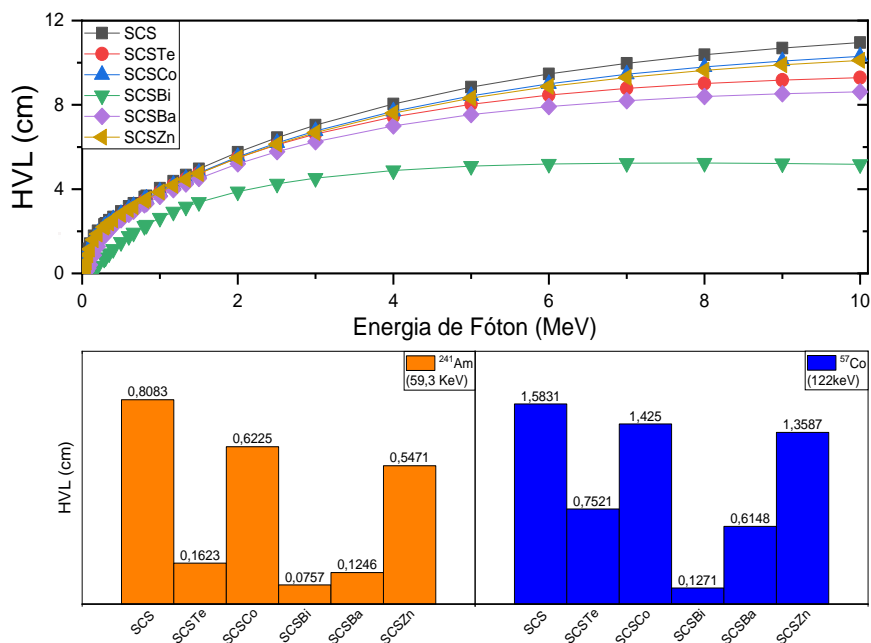
90 e 100 keV para amostra SCSBi. Essas mudanças devem-se a banda de adsorção K das amostras situadas em 37,414; 31,817 e 90,54 keV.

Os valores obtidos experimentalmente estão apresentados na Tabela 1, evidenciando a característica semelhante à amostra com bismuto. Esta demonstrou uma atenuação 10 vezes maior para 60 keV e 14 vezes maior para 120 keV, em comparação com a amostra sem modificador.

**Tabela 1:** Valores de LAC e MAC obtidos teoricamente para os isótopos  $^{241}\text{Am}$  e  $^{57}\text{Co}$ .

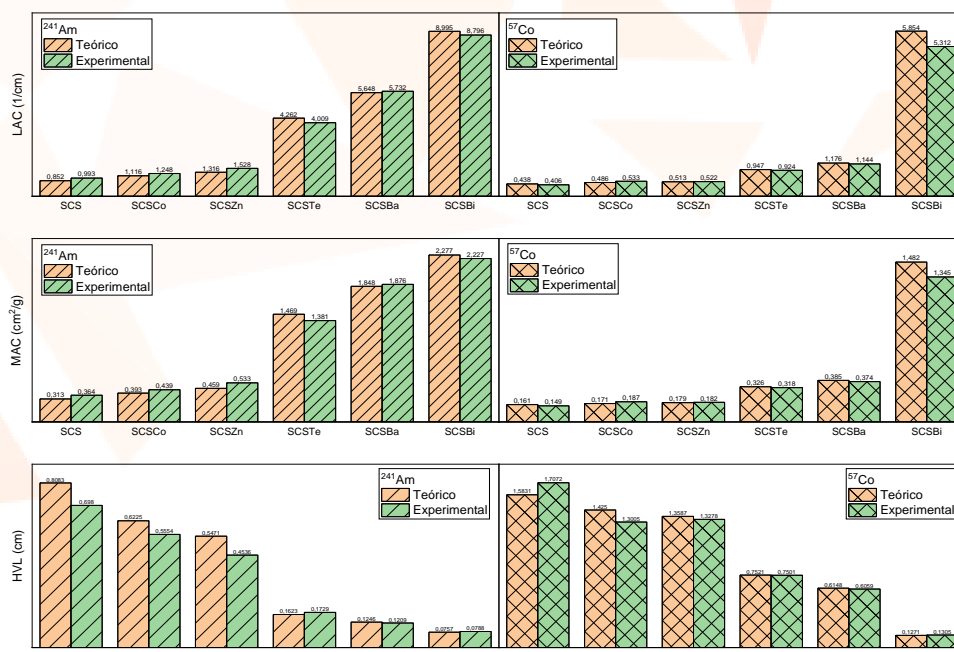
Amostra	$^{241}\text{Am}$		$^{57}\text{Co}$	
	LAC	MAC	LAC	MAC
SCS	0,852	0,313	0,438	0,161
SCSCo	1,116	0,393	0,486	0,171
SCSZn	1,316	0,459	0,513	0,179
SCSTe	4,262	1,469	0,947	0,326
SCSBa	5,648	1,848	1,176	0,385
SCSBi	8,995	2,277	5,854	1,482

Ao analisar os dados de HVL e MFP conforme a Figura 3, observa-se que as amostras SCSBi, SCSBa e SCSTe exibem os menores valores. Valores inferiores desses parâmetros indicam uma maior capacidade de blindagem. Por exemplo, enquanto para uma amostra sem bismuto seriam necessários 8,0 mm de material para bloquear metade da radiação emitida pelo  $^{241}\text{Am}$ , para a amostra com esse modificador, apenas 0,7 mm seriam suficientes. No caso do  $^{57}\text{Co}$ , a redução seria de 15,8 mm para 1,2 mm



**Figura 3 – Half-Value Layer** das amostras estudadas.

Por fim, a Figura 3 apresenta uma comparação entre os valores simulados e os valores obtidos experimentalmente, com o intuito de avaliar a precisão da montagem utilizada para as medidas de atenuação.



**Figura 4** – Comparativos dos valores teóricos e experimentais de LAC, MAC e HVL, para a energia dos isótopos <sup>241</sup>Am e <sup>57</sup>Co.

## CONCLUSÕES

Este estudo enfatizou a importância fundamental de compreender como diferentes óxidos modificadores na estrutura do vidro silicato podem influenciar suas capacidades de blindagem contra radiação. Foi observado que as amostras SCSBi, SCSBa e SCSTe demonstraram capacidades superiores de blindagem em comparação com as demais. Essa superioridade está principalmente relacionada às densidades mais elevadas dessas amostras e ao arranjo atômico, que afeta a interação dos fótons com o material. Os resultados obtidos revelaram que os vidros livres de chumbo desenvolvidos possuem uma eficácia notável na redução da radiação ionizante de baixa energia, na faixa de centenas de keV. Essa eficácia é tão boa ou até melhor do que a dos materiais plumbíferos comerciais disponíveis..

## REFERÊNCIAS

- [1] AKTAS, Bulent et al. The role of TeO2 insertion on the radiation shielding, structural and physical properties of borosilicate glasses. *Journal of Nuclear Materials*, [s. l.], v. 563, ed. 153619, 2022.
- [2] SAYYED, M. I. et al. Impact of Modifier Oxides on Mechanical and Radiation Shielding Properties of B2O3-SrO-TeO2-RO Glasses (Where RO = TiO2, ZnO, BaO, and PbO). *Applied Sciences*, [s. l.], v. 11, ed. 10904, 2021.
- [3] ŞAKAR, E. et al. Phy-X / PSD: Development of a user-friendly online software for calculation of parameters relevant to radiation shielding and dosimetry. *Radiation Physics and Chemistry*, v. 166, p. 108496, jan. 2020.

## EFEITOS DO TAMANHO DE CRISTALITO E DA DENSIDADE DE DISCORDÂNCIAS NO COMPORTAMENTO DE NANOPARTÍCULAS DE BIFE<sub>3</sub>O<sub>9</sub> OBTIDAS POR CRIOMOAGEM

E.A. Volnistem, G.S. Dias, L.F. Cótica, I.A. Santos

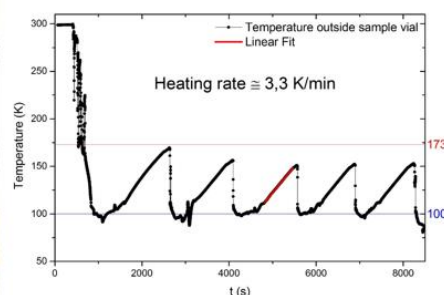
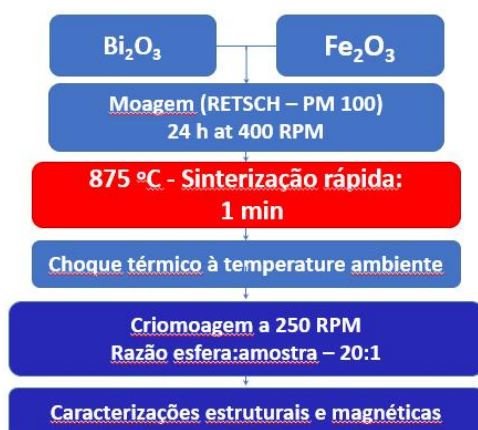
Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

\*Corresponding author's email: [e.volnistem@gmail.com](mailto:e.volnistem@gmail.com)

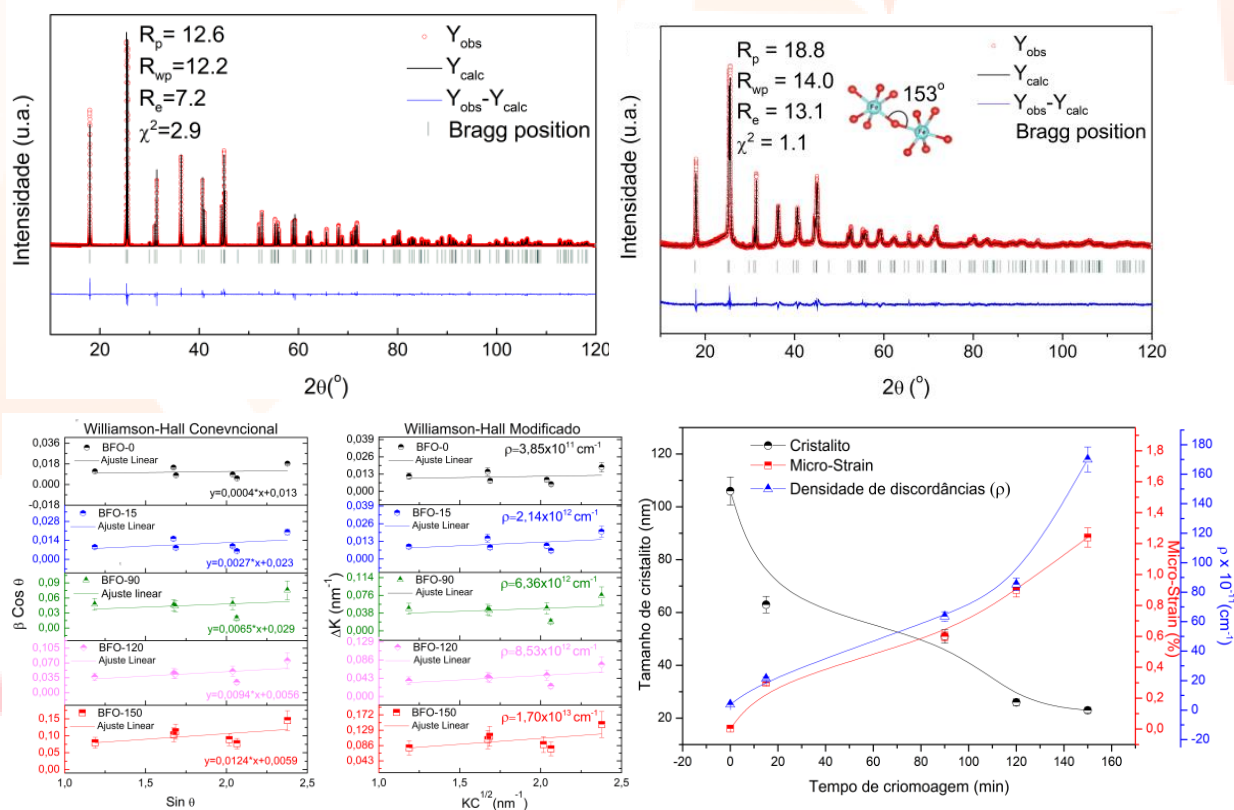
### INTRODUÇÃO

O ferrita de bismuto (BiFeO<sub>3</sub> - BFO) é um material magnetoelétrico multiferroico com estrutura perovskita (ABO<sub>3</sub>) que, devido à sua ordenação ferroelétrica e antiferromagnética simultânea à temperatura ambiente, é um dos candidatos mais promissores para aplicações em eletrônicos. No entanto, a presença de um cicloide de spin magnético com um período de 62 nm suprime seu magnetismo de longo alcance. A criomoagem foi recentemente aplicada para sintetizar pós de BFO com tamanhos de cristalito e tensão interna controlados, resultando em uma resposta magnética não linear que difere daquela amplamente relatada para amostras tipo “Bulk”. Neste estudo, nanopartículas de BFO criomoidas, com diferentes níveis de densidades de discordâncias (de  $3,85 \times 10^{11}$  a  $1,7 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ ) e tamanhos de cristalito (de 144 nm a ~30nm) foram investigadas por medidas magnéticas (VSM e microscopia de força magnética (MFM)). As nanopartículas com tamanhos de cristalito (~30 nm), abaixo do período do cicloide de spin e com alta densidade de discordância apresentaram uma transição de uma resposta antiferromagnética para uma resposta magnética com um comportamento histerético característico de um ferromagnético-fraco. Além disso, os domínios magnéticos das nanopartículas de BFO foram diretamente imagens e domínios únicos fracso-ferromagnéticos típicos foram identificados de forma inequívoca. As correlações gerais entre as propriedades magnéticas, tamanho de cristalito, microdeformação e deslocamentos são discutidas em detalhes.

### METODOLOGIA



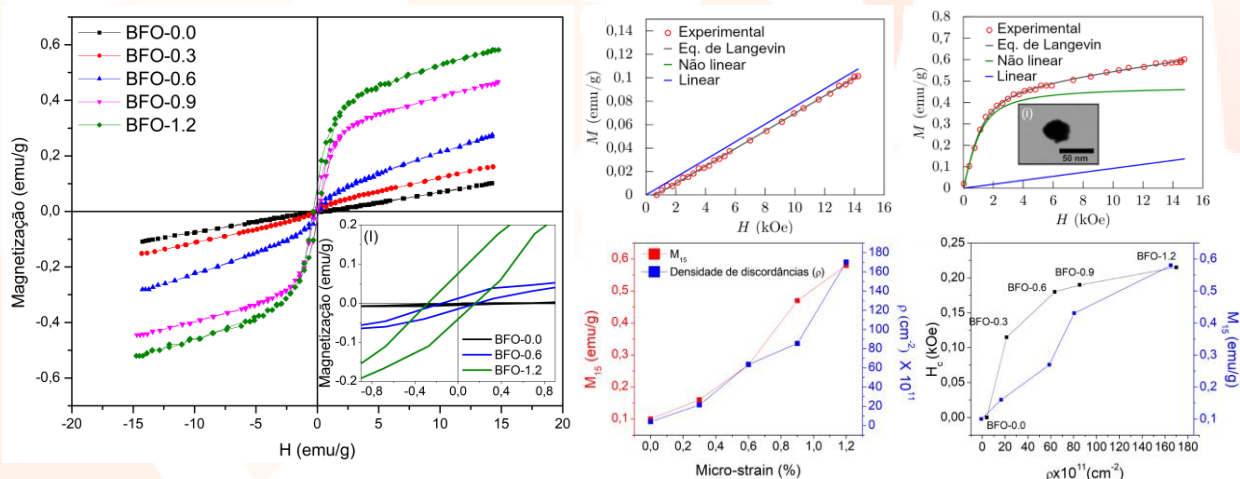
## RESULTADOS E DISCUSSÃO



**Figura 1** – Difratomogramas de raios X e refinamento Rietveld para a amostra (a) BFO-0.0 e (b) BFO-1.2. Os parâmetros de confiabilidade ( $R_p$ ,  $R_{wp}$ ,  $R_e$  e  $\chi^2$ ) do refinamento se encontram inseridos em cada difratograma. Análises pelo método de (c) Williamson-Hall convencional e (d) Williamson-Hall modificado para as amostras BFO-0.0, BFO-0.3, BFO-0.6, BFO-0.9 e BFO-1.2. (e) Tamanho de cristalito, *micro-strain* e densidade de discordâncias em função do tempo de criomoagem.

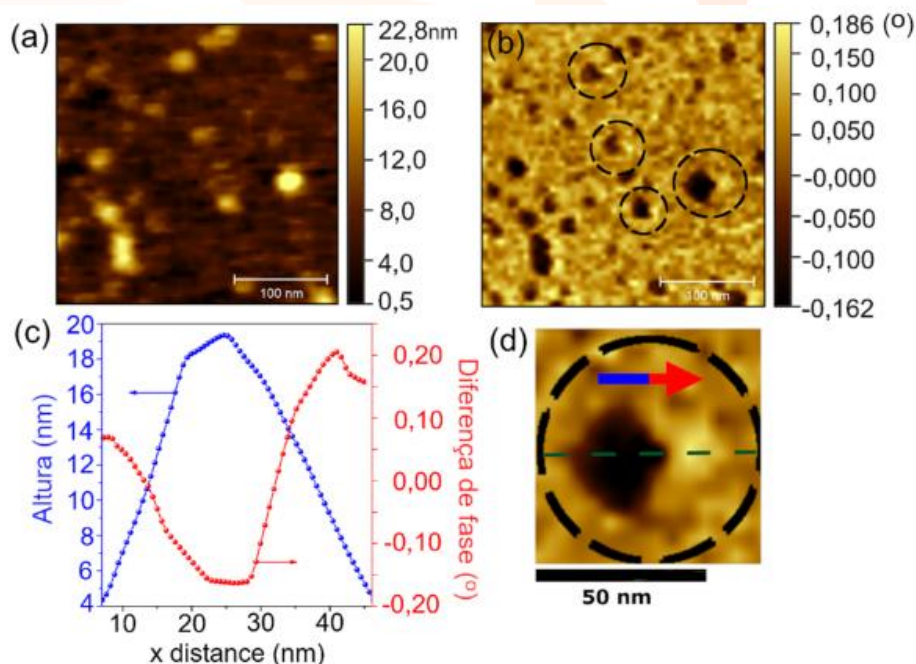
As Figuras 1 (a) e 1 (b) apresentam os padrões de difração de raios X e os resultados de refinamento Rietveld para amostras de  $\text{BiFeO}_3$  com 0 min e 150 min de criomoagem, respectivamente. Os padrões de difração foram indexados como uma estrutura perovskita com simetria romboedral ( $R3c$ ), de acordo com a ficha No. 86-1518 do banco de dados ICDD. É notável o alargamento dos picos em função do aumento do tempo de criomoagem devido a nanoestruturação, redução do tamanho de cristalito e aumento do *micro-strain*.

Os ajustes de Williamson-Hall e Williamson-Hall modificados são apresentados nas Figuras 1(c) e 1(d). Observa-se uma redução do tamanho de cristalito e aumento no nível de *micro-strain* e da densidade de discordâncias com o aumento do tempo de criomoagem. A Figura 1(e) apresenta o comportamento do tamanho de cristalito, aumento da densidade de discordâncias o aumento da magnetização à 15 kOe ( $M_{15}$ ).



**Figura 2** – (a) Magnetização em função do campo magnético aplicado ( $H$ ) para as amostras BFO-0.0, BFO-0.3, BFO-0.6, BFO-0.9, BFO-1.2. A inserção (I) apresenta detalhes da região central das curvas  $M \times H$  para as amostras BFO-0.0, BFO-0.6 e BFO-1.2. Ajustes usando o modelo fenomenológico de Langevin para as amostras (b) BFO-0.0 e (b) BFO-1.2. A inserção (I) revela a imagem obtida por microscopia eletrônica de transmissão de uma partícula individual da amostra BFO-1.2. (c) Magnetização máxima ( $M_{15}$ ) e densidade de discordância ( $\rho$ ) em função do micro-strain e (e) campo coercitivo ( $H_C$ ) em função da densidade de discordância ( $\rho$ ).

A Figura 2(a) ilustra as histereses magnéticas para todo o conjunto de amostras analisadas, enquanto a inserção (I) revela detalhes do campo coercitivo ( $E_C$ ) e magnetização remanente ( $M_R$ ) para as amostras BFO-0.0, BFO-0.6 e BFO-1.2, respectivamente. Observa-se um aumento da máxima magnetização a um campo magnético aplicado de 15 kOe ( $M_{15}$ ) em função do micro-strain. As Figuras 2(a) e 2(b) apresentam os ajustes usando a equação de Langevin para as amostras BFO-0.0 e BFO-1.2. Para a amostra BFO-0.0, observa-se claramente a existência de uma componente puramente linear para a magnetização em função de  $H$ , sugerindo um comportamento puramente antiferromagnético. Já para a amostra BFO-1.2, observa-se uma significativa contribuição não linear para a magnetização, típica de materiais ferromagnéticos (ou superparamagnéticos) até um campo aplicado de 6 kOe. As Figuras 2(c) e 2(d), apresentam os valores de  $M_{15}$  e da densidade de discordâncias ( $\rho$ ) em função dos valores de *micro-strain* e o comportamento de  $H_C$  em função da densidade de discordâncias. Na Figura 2 (c) é notável uma correlação entre os comportamentos de  $M_{15}$  e  $\rho$  em função do *micro-strain* sugerindo que a densidade de discordâncias tem um papel relevante na resposta magnética em nanopartículas de  $\text{BiFeO}_3$ .



**Figura 3** – (a) Topografia e (b) microscopia de força magnética em nanopartículas individuais para as amostras BFO-1.2. (c) Perfil de linha da topografia e fase magnética extraída de uma partícula destacada apresentada em (d) a partir da linha tracejada em verde.

A Figura 3(a) ilustra a topografia de diversas nanopartículas individuais pertencentes a amostra BFO-1.2, na qual observam-se várias nanopartículas com tamanho lateral entre 20 e 45 nm e altura máxima de 23 nm, aproximadamente. O resultado da MFM, realizado na mesma região, é apresentado na Figura 3(b), na qual observa-se a diferença de fase magnética em diversas nanopartículas, apresentando características de monodomínios magnéticos como o contraste claro-escuro (destacadas pelos círculos pretos). Esse tipo de resposta é muito similar àquelas reportadas por diversos autores para nanopartículas com resposta ferromagnética e/ou superparamagnética. Os perfis de linha extraídos das imagens de topografia e da fase magnética (partícula destacada em 3(d)) são apresentados na figura 3(c). O perfil da diferença de fase magnética apresenta uma inversão de fase que varia de  $-0,17$  ( $^{\circ}$ ) a  $0,20$  ( $^{\circ}$ ). Essa inversão de fase é característica de monodomínios em nanopartículas ferromagnéticas ou superparamagnéticas, na qual apresentam dipolos magnéticos (seta azul e vermelha na Figura 3.23 (d)) induzidos pela aplicação de um campo magnético vertical.

## CONCLUSÕES

A análise estrutural revelou que a introdução de discordâncias de borda afeta significativamente a estrutura do  $\text{BiFeO}_3$ , levando à redução do ângulo de supertroca, redução do volume da cela unitária e distorções do octaedro  $\text{FeO}_6$ . Análises magnéticas demonstraram que a redução do tamanho de cristalito combinada com o aumento da densidade de discordâncias resultou no aumento da magnetização, com claro viés de correlação. Mudanças nas curvas de  $M \times H$  foram observadas, mudanças essas atribuídas ao surgimento de comportamento ferromagnético fraco e superparamagnético.

## DESENVOLVIMENTO DE BIOMATERIAIS DE QUARTA GERAÇÃO À BASE DE PVDF E FOSFATOS DE CÁLCIO NATURAIS

A.N. Volnistem<sup>1</sup>, E.A. Volnistem<sup>\*1</sup>, A.C. Ferreira<sup>1</sup>, W.R. Weinand<sup>1</sup>, E. Radovanovic<sup>2</sup>, T.G.M.

Bonadio<sup>3</sup>, V.F. Freitas<sup>3</sup>, I.A. Santos<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Programa de Pós-Graduação em Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

<sup>2</sup>Programa de Pós-Graduação em Química, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

<sup>3</sup>Programa de Pós-Graduação em Nanociências e Biociências, Universidade Estadual do Centro Oeste, UNICENTRO – Guarapuava-PR, Brasil.

\*Corresponding author's email: [e.volnistem@gmail.com](mailto:e.volnistem@gmail.com)

### INTRODUÇÃO

Compósitos de fibras poliméricas, destacando-se o poli(fluoreto de vinilideno) (PVDF), tem se mostrado promissores para aplicações biomédicas devido às propriedades únicas do PVDF, incluindo resistência química e propriedades piezoelétricas da fase- $\beta$ . Neste sentido, a eletrofiação é uma técnica eficaz para produzir fibras com controle preciso de tamanho e morfologia. A incorporação de compósitos de fosfato de cálcio bifásico (BCP) em fibras de PVDF é uma estratégia promissora para melhorar as propriedades biomédicas, como osteocondutividade e regeneração óssea. Neste estudo, investigamos a incorporação de BCP em fibras de PVDF por eletrofiação, avaliando diferentes concentrações de BCP e seu impacto nas propriedades físico-químicas e mecânicas, bem como na bioatividade das fibras resultantes. Os resultados indicam que essa combinação resulta em fibras compósitas aprimoradas, adequadas para aplicações biomédicas, com ênfase na engenharia de tecido ósseo.

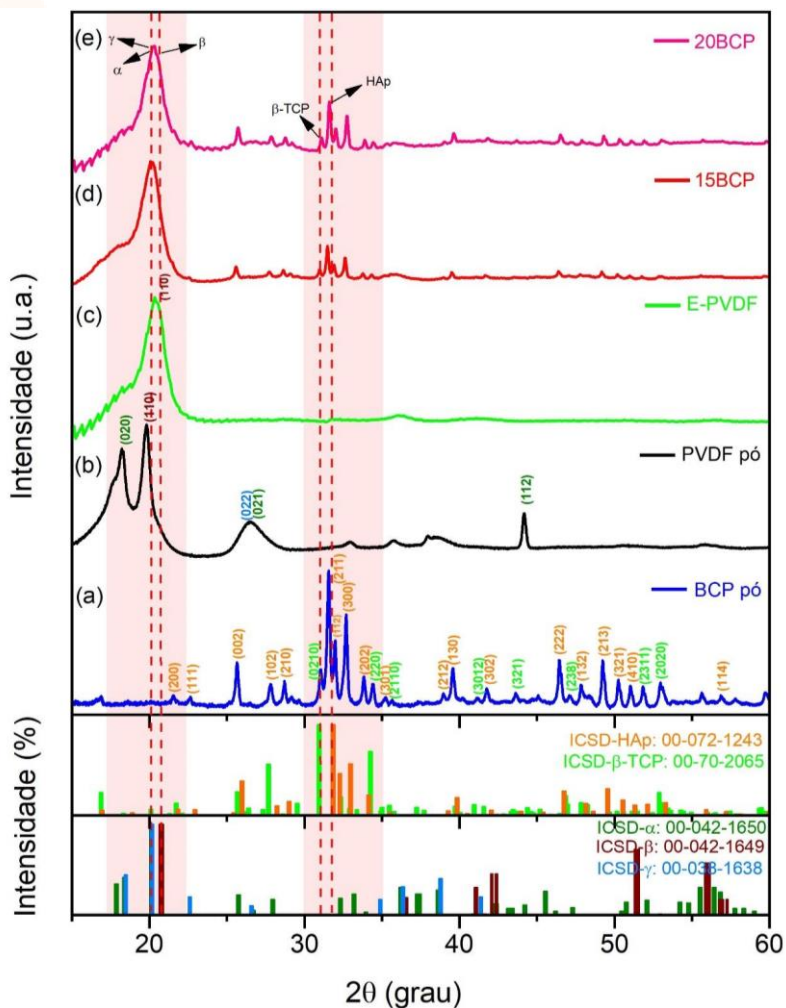
### MATERIAIS E MÉTODOS

O presente estudo descreve a síntese de compósitos de PVDF-BCP para a produção de fibras eletrofiadas. O PVDF foi dissolvido em DMF e acetona, com concentração de 14% p/v e proporções de solventes 60/40 v/v. Diferentes concentrações de BCP (15% e 20% p/p) foram incorporadas. A eletrofiação foi realizada com voltagem de 25 kV, distância da seringa ao coletor de 15 cm e taxa de fluxo de 0,40 mL/h. A caracterização incluiu difração de raios-X para identificar fases, microscopia eletrônica de varredura para análise morfológica e composição, bem como testes mecânicos para avaliação das propriedades mecânicas das fibras. Além disso, foi realizado o teste de bioatividade in vitro em fluido corporal simulado (SBF) para verificar a formação de uma camada de apatita na superfície das fibras após imersão, simulando condições dentro do corpo humano.

### RESULTADOS E DISCUSSÃO

A Figura 1 apresenta os difratogramas do PVDF e BCP (pós), E-PVDF, 15BCP e 20BCP (fibras compósitas eletrofiadas). O difratograma do pó de BCP (Fig. 1a) exibiu um padrão bem definido e sobreposto, com a presença das fases cristalinas HAp e  $\beta$ -TCP confirmadas pelos picos característicos nos valores de  $2\theta$  de 25.6°, 31.5°, 31.7°, 32.6°, e 31°, correspondentes aos planos (002), (211), (112), (300), e (0210), respectivamente. No difratograma do pó de PVDF (Fig. 1b) apresenta um padrão amorfo típico com três padrões cristalinos associados as fases polimórficas: apolar ( $\alpha$ ), polar ( $\beta$ ) e

polar ( $\gamma$ ). Os picos intensos em  $2\theta = 18.5^\circ$  e  $26.5^\circ$  corresponde ao plano (110) e apresenta o pico característico da fase  $\beta$ . No entanto,  $2\theta = 26.5^\circ$  exibiu fases sobrepostas correspondentes aos planos (021) e (022), indicativas das fases  $\alpha$  e  $\gamma$ . No caso das amostras E-PVDF (Fig 1c), 15BCP (Fig 1d) e 20BCP (Fig 1e), foram observados picos relacionados ao BCP e PVDF, confirmando a presença de BCP nas fibras compósitas e a presença da fase  $\beta$  no PVDF. Os picos intensos em  $2\theta = 25.6^\circ$ ,  $31.5^\circ$ ,  $31.7^\circ$ ,  $32.6^\circ$ , e  $31^\circ$  correspondentes aos planos (002), (211), (112), (300), e (210), respectivamente, são atribuídos à presença de BCP nas fibras compósitas. Além disso, a intensidade desses picos aumenta com o aumento da concentração de BCP nas composições.

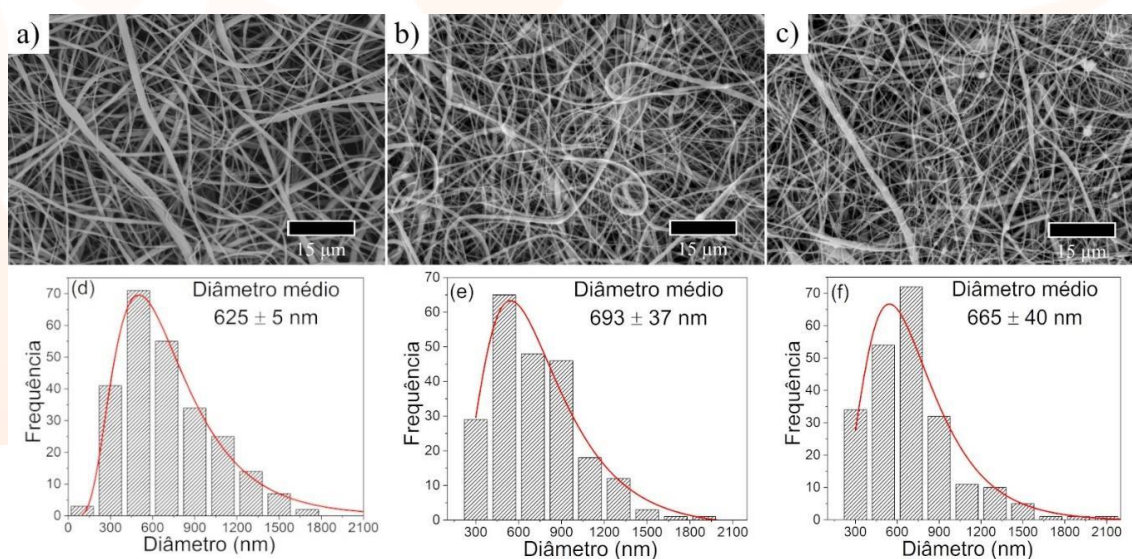


**Figura 1** – Padrões de difração de Raios-X (XRD) para BCP (a) e PVDF (b) (pó), PVDF (c), 15BCP (d), e 20 BCP (e) (fibras eletrofiadas). Apresentados juntamente com os padrões de difração de referência ICSD 00-072-1243 e ICSD 00-070-2065 das fases HAp e  $\beta$ -TCP, e os padrões de difração de referência ICSD 00-042-1650, ICSD 00-042-1649, e ICSD 00-038-1638 das fases  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  presentes no PVDF, respectivamente

A Fig. 2 apresenta as microscopias das amostras de E-PVDF, 15BCP e 20BCP obtidas por eletrofiação. Os resultados revelaram que a amostra de E-PVDF apresentou fibras contínuas sem a formação de “beads”, com um diâmetro médio de  $625 \pm 5$  nm. Já as amostras 15BCP e 20BCP mostraram a incorporação bem-sucedida de BCP nas fibras, resultando em um aumento no diâmetro médio das fibras em comparação com as fibras puras de PVDF, variando de  $693 \pm 37$  nm a  $665 \pm 37$  nm, respectivamente. Esses resultados corroboram com estudos anteriores e são atribuídos a mudanças na



viscosidade da solução devido ao carregamento de partículas e alteração na taxa de evaporação do solvente.



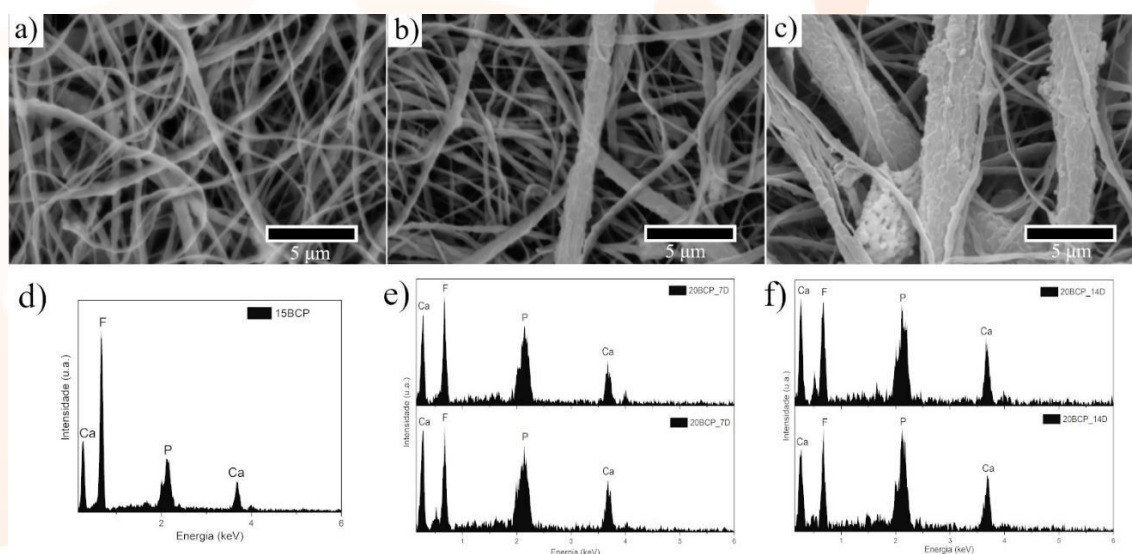
**Figura 2** – Imagens de MEV das fibras eletrofiadas: (a) E-PVDF, (b) 15BCP e (c) 20BCP. Juntamente, o diâmetro médio para cada amostra (a) E-PVDF, (b) 15BCP e (c) 20BCP.

As propriedades mecânicas das fibras eletrofiadas foram avaliadas e estão apresentadas na Tabela 1. Os resultados indicam que a amostra 15BCP se destaca com a maior tensão máxima de tração (3,26 Mpa) e maior deformação (169%), evidenciando sua capacidade de resistir à deformação. Embora a 20BCP tenha um módulo de Young ligeiramente mais alto, a 15BCP exibe um equilíbrio superior entre tensão máxima e flexibilidade, tornando-a promissora para implantes e scaffolds na regeneração de tecidos. A incorporação de BCP melhorou significativamente as propriedades mecânicas das fibras em comparação com a E-PVDF, destacando o potencial da 15BCP nesse contexto.

**Tabela 1** – Valores das propriedades mecânicas para as fibras eletrofiadas E-PVDF, 15BCP e 20BCP.

Propriedades Mecânicas	PVDF	15BCP	20BCP
Tensão máxima (MPa)	2.18	3.26	2.73
Deformação (%)	67	169	133
Módulo de Young (MPa)	6.6 ± 0.1	6.5 ± 0.1	7.0 ± 0.1

Testes de bioatividade foram conduzidos para avaliar a formação de apatita em fibras eletrofiadas. Os resultados revelaram que as fibras de E-PVDF apresentaram nucleação de apatita após imersão, devido à falta de propriedades bioativas inerentes desse material. Por outro lado, as fibras contendo 15% de BCP demonstraram nucleação de apatita após 7 dias de imersão, com uma relação Ca/P compatível com a apatita. Para as fibras com 20% de BCP, observou-se um padrão semelhante de nucleação de apatita após 7 dias de imersão. Esses resultados indicam o potencial das fibras eletrofiadas com BCP para aplicações biomédicas, devido à sua capacidade de promover a formação de apatita *in vitro*. A Fig. 3 apresenta as micrografias e espectros de EDS da amostra 20BCP.



**Figura 2** – Micrografias e espectros de EDS para a amostra 20BCP (a) e (d), antes de imersão em meio SBF, 20BCP\_7D (b) e (e) após 7 dias e 20BCP\_14D (c) e (f) após 14 dias em imersão em meio SBF, respectivamente. Os espectros mostram os elementos flúor (F), cálcio (Ca) e fósforo (P).

## CONCLUSÕES

Neste estudo, foram desenvolvidos compósitos de fibras de PVDF e BCP por eletrofiação, destinados a aplicações biomédicas, especificamente na engenharia de tecidos ósseos. A análise de difração de raios-X confirmou a incorporação bem sucedida do BCP nas fibras de PVDF, resultando em uma transformação da fase  $\alpha$  para fase  $\beta$ . As análises de MEV e EDS demonstraram a dispersão homogênea de partículas de BCP nas amostras. A amostra 15BCP exibiu propriedades mecânicas aprimoradas. Testes de bioatividade evidenciaram a capacidade das fibras 15BCP e 20BCP de promover a formação de apatita, alinhando-se com a composição natural do osso. Em resumo, as fibras compósitas de PVDF-BCP demonstraram um potencial promissor para aplicações na engenharia de tecidos ósseos, devido às suas propriedades mecânicas melhoradas e características bioativas.

## ASSOCIATION BETWEEN PRODUCTIVITY AND IMPACT ACROSS DISCIPLINES AND CAREER AGE

**A.S. Sunahara<sup>1</sup>, M. Perc<sup>2,3,4,5,6</sup>, H.V. Ribeiro<sup>\*,1</sup>**

<sup>1</sup>Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

<sup>2</sup>Faculty of Natural Sciences and Mathematics, University of Maribor, Maribor, Eslovênia.

<sup>3</sup>Department of Medical Research, China Medical University Hospital, Taichung, Taiwan.

<sup>4</sup>Alma Mater Europaea, Slovenska, Maribor, Eslovênia.

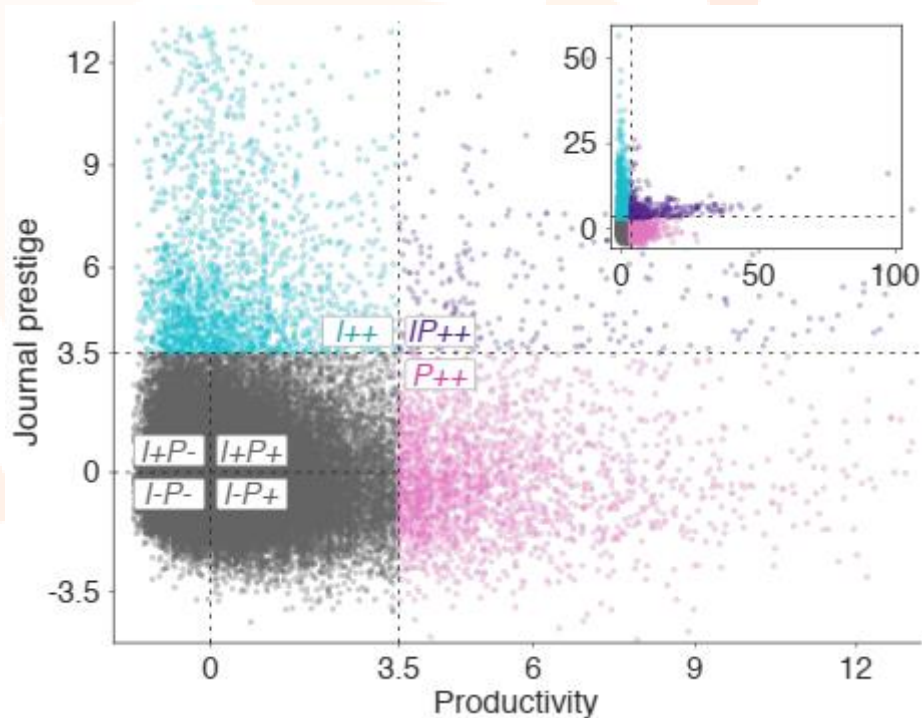
<sup>5</sup>Department of Physics, Kyung Hee University, Seoul, República da Coreia.

<sup>6</sup>Complexity Science Hub Vienna, Vienna, Austria.

\*Corresponding author's email: [haroldov@gmail.com](mailto:haroldov@gmail.com)

We investigate various aspects of the association between productivity and journal prestige by analyzing the careers of 6,028 scientists from the Brazilian scientific community's elite from 14 different academic disciplines [1]. We calculate the yearly productivity and the respective average value of the journal-impact metrics – Journal Impact Factor (JIF) and Scimago Journal Rank (SJR) – for these academics. Even though the use of journal-level metrics for assessing scholarly performance of researchers is questionable [2], this practice remains widely used in the academic context [3]. In particular, journal prestige metrics (and derivative indicators) are largely employed in Brazil during assessment tasks such as grading resumes of graduate students, selecting tenure-track faculty positions, and applying for grants. Recent works found that journal-level metrics are correlated with citations and that these metrics carry information about academic performance [4], such that up to a certain degree, journal impact metrics and citations can be considered as partly substitutes. Apart from the debate regarding the fitness of journal-level metrics (or even citations) in research evaluation tasks, these metrics remain important for the scientific community and deserve further investigation.

Our research investigates patterns of the association between productivity and journal-impact metrics considering researchers' careers across different disciplines. In contrast with prior studies, our approach employs standard-score measures to address the impact of discipline and inflationlike effects and correct size-dependent biases on the average journal prestige (Figure 1). We identify outlier individuals in productivity and journal impact, which either outperform in productivity or journal prestige over their careers, but seldom in both categories. We also find that scholars are not inclined to simultaneously change their productivity and journal prestige levels, and mostly sustain these levels in consecutive years of their academic careers. Considering only non-outlier individuals, our study reveals a mainly negative correlation between productivity and journal prestige among researchers across various disciplines. For aggregated data, we observe that career patterns of productivity and journal impact are discipline-specific, but show a similar increasing trend of productivity over time for all disciplines. By elucidating the career-age and discipline-specific aspects of productivity and journal prestige, our research aims to contribute to a more comprehensive and fair research evaluation process.



**Figure 1** – Relation between average journal impact factor (JIF) and productivity in standard score units (the inset shows the full range of the plane). Data points represent career years of researchers from the 14 disciplines in our study. This plane is divided into seven sectors. Three sectors represent career years with overly high performance in journal impact (I++), productivity (P++), or both quantities (IP++). Four non-outlier sectors represent career years with productivity and journal impact above (I+P+) or below (I–P–) the average, journal impact below and productivity above the average (I–P+), and journal impact above and productivity below the average (I+P–).

## REFERENCES

- [1] A. S. Sunahara, M. Perc, H. V. Ribeiro, Association between productivity and journal impact across disciplines and career age, *Physical Review Research* 3, 033158 (2021).
- [2] V. Lariviere and C. R. Sugimoto, 'The journal impact factor: A brief history, critique, and discussion of adverse effects, (Springer, 2019) pp. 3–24.
- [3] E. C. McKiernan, L. A. Schimanski, C. M. Nieves, L. Matthias, M. T. Niles, and J. P. Alperin, Meta-research: Use of the journal impact factor in academic review, promotion, and tenure evaluations, *eLife* 8, e47338 (2019).
- [4] V. A. Traag, Inferring the causal effect of journals on citations, *Quant. Sci. Studies* 2, 496 (2021).

## TRAPPINGS VERSUS HETEROGENEITY: ANOMALOUS DIFFUSION IN A HYBRID COMB MODEL

H.V. Ribeiro<sup>\*1</sup>, A.A. Tateishi<sup>2</sup>, E.K. Lenzi<sup>3</sup>, R.L. Magin<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

<sup>2</sup>Departamento de Física, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, UTFPR – Pato Branco-PR, Brasil.

<sup>3</sup>Departamento de Física, Universidade Estadual de Ponta Grossa, UEPG – Ponta Grossa-PR, Brasil.

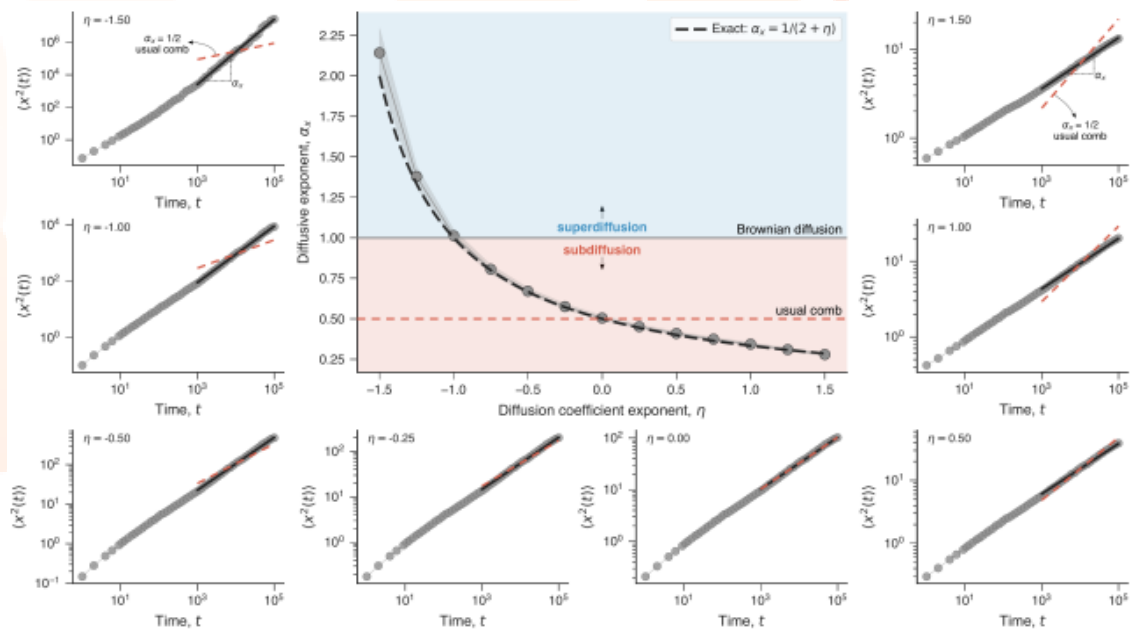
<sup>4</sup>ADepartment of Biomedical Engineering, University of Illinois at Chicago, Chicago – IL, EUA.

\*Corresponding author's email: [haroldov@gmail.com](mailto:haroldov@gmail.com)

Nearly a century after Richardson's seminal paper on atmospheric diffusion in 1926, the concept of a state-dependent diffusion coefficient continues to be one of the key paradigms for understanding anomalous diffusion in heterogeneous media. In its turn, the more recently introduced comb model offers a simplified representation of diffusion on fractals and is widely recognized as a paradigmatic model for subdiffusion resulting from the state-independent (quenched) trapping mechanism. Here we present a hybrid model that combines Richardson's position-dependent diffusion coefficient with branch structures emerging from the comb model that effectively trap particles along the backbone of the comb [1]. We consider a power-law relationship between the diffusion coefficient and the position along the backbone, expressed as  $D_x(x) = \mathcal{D}|x|^{-\eta}$ , and obtain exact solutions for the joint and marginal position distributions, as well as for the mean squared displacement over the branches and along the backbone. Additionally, we explore the connection between the diffusion equation of our model and Langevin equations within the isothermal interpretation, which in turn allows us to simulate the hybrid comb model and validate our exact findings.

Our hybrid comb model thus simultaneously incorporates the influence of the medium's heterogeneity and trapping mechanisms on diffusion along the backbone, allowing for the distinction between these two mechanisms and the study of their interplay on the diffusive process. Despite its simplicity, our model displays various diffusive regimes (Figure 1), and precisely because of its simplicity, these patterns can all be comprehended in terms of the combined effects of trapping and heterogeneity mechanisms. We observe that trappings along the backbone attenuate the impact of the position-dependent diffusion coefficient. As a result, superdiffusion can only occur when the diffusion coefficient increases superlinearly with the  $x$ -position, whereas in the absence of trappings, this diffusive regime emerges whenever the diffusion coefficient increases with the  $x$ -position. Our model exhibits anomalous yet Brownian diffusion when the diffusion coefficient is proportional to the position along the backbone. This special case, where the mean squared displacement increases linearly with time but the position distribution is not Gaussian, is often modeled by introducing temporal dynamics to the diffusion coefficient, an approach known as diffusing diffusivity. Additionally, our hybrid comb model presents non-Brownian yet Gaussian diffusion, characterized by a sublinear behavior of the mean squared displacement with time accompanied by a Gaussian position distribution. This type of diffusive behavior is often associated with memory or other temporal processes, but in our case, it represents another consequence of the medium's heterogeneity and trapping mechanisms.

These findings emphasize the need for cautious interpretation of experimental measurements and highlight the limitations of relying solely on mean squared displacements or position distributions to characterize the diffusive regime of a system.



**Figure 1** – Diffusive regimes in the hybrid comb model. The central panel depicts the relationship between the diffusive exponent  $\alpha_x$  and the diffusion coefficient exponent  $\eta$ . The black dashed curve represents the exact result [ $\langle x^2(t) \rangle \propto t^{\alpha_x}$ , with  $\alpha_x = \frac{1}{2+\eta}$ ]. The circles represent simulated results, with the gray shaded band indicating the standard error of the estimate for  $\alpha_x$ . The horizontal solid line marks the boundary between superdiffusion (blue background) and subdiffusion (red background), while the dashed line indicates the subdiffusive regime of the usual comb model. The insets surrounding the central panel exhibit the time evolution mean squared displacement obtained from the simulations for five distinct values of  $\eta \in (-3/2, -1, -1/2, -1/4, 0, 1/2, 1, 3/2)$ . In these loglog plots, circles represent results obtained from our *in silico* experiments, solid lines display the adjusted power-law relationships, and dashed lines indicate the behavior of the usual comb model.

## REFERENCE

- [1] H. V. Ribeiro, A. A. Tateishi, E. K. Lenzi, R. L. Magin, M. Perc, Trappings versus heterogeneity: Anomalous diffusion in a hybrid comb model, Submitted for publication in 2023.

## UNIVERSALITY OF POLITICAL CORRUPTION NETWORKS

**A.F. Martins<sup>1</sup>, B.R. da Cunha<sup>2,3</sup>, Q.S. Hanley<sup>4</sup>, S. Gonçalves<sup>5</sup>, M. Perc<sup>6,7,8,9,10</sup>, H. V. Ribeiro<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

<sup>2</sup>Global Investigations, TRM Labs – San Francisco – EUA.

<sup>3</sup>Academia Nacional de Polícia, Polícia Federal Brasileira, Brasília – DF, Brasil.

<sup>4</sup>GH and Q Services Ltd, West Studios, Chesterfield, Reino Unido.

<sup>5</sup>Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre-RS, Brasil.

<sup>6</sup>Faculty of Natural Sciences and Mathematics, University of Maribor, Maribor, Eslovênia.

<sup>7</sup>Department of Medical Research, China Medical University Hospital, Taichung, Taiwan.

<sup>8</sup>Alma Mater Europaea, Slovenska, Maribor, Eslovênia.

<sup>9</sup>Department of Physics, Kyung Hee University, Seoul, República da Coreia.

<sup>10</sup>Complexity Science Hub Vienna, Vienna, Austria.

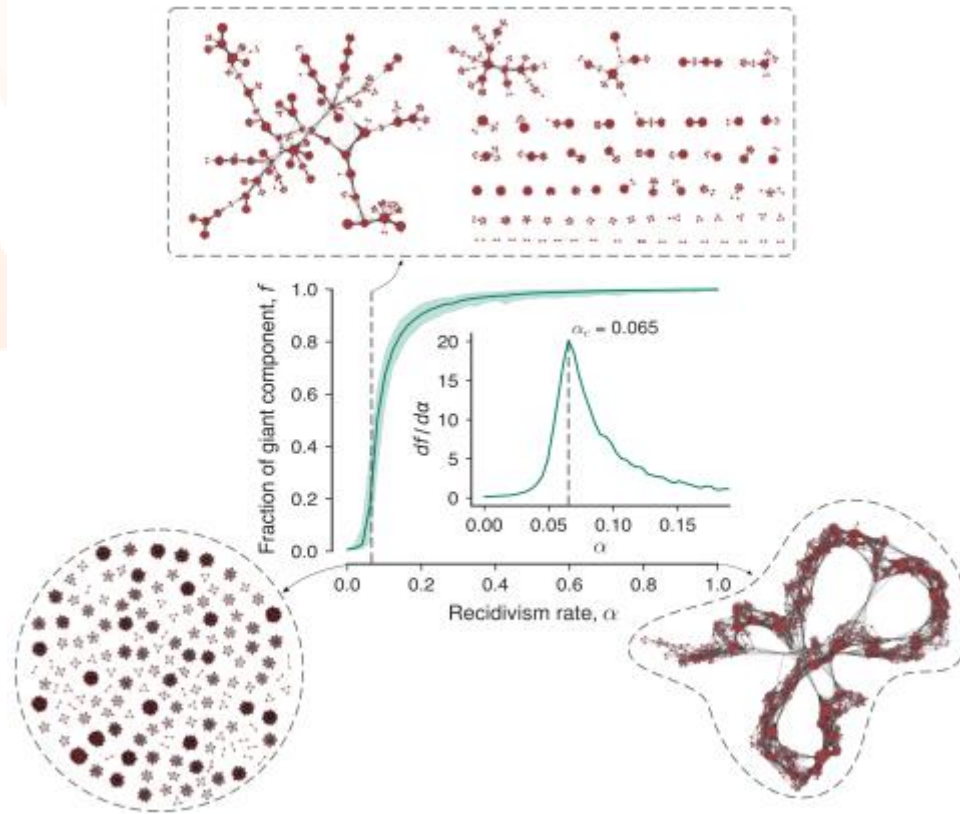
\*Corresponding author's email: [haroldov@gmail.com](mailto:haroldov@gmail.com)

In line with the mantra of complex systems, which emphasizes that “the whole is more than the sum of its parts,” one can also argue that the success of criminal organizations relies not only on the individual skills of criminals but rather more significantly on their capacity to collaborate and establish resilient organizational structures that effectively safeguard and conceal their illicit activities. These features demand much more than simple statistics to understand organized crime activities and make complexity science, particularly complex networks, an ideal framework for investigating economic, organized, and corruption crimes. Networks are indeed a suitable paradigm to describe criminal interactions through a wide array of tools and methods developed over the past decades. However, empirical investigations of criminal networks face limitations due to the unavailability of reliable data, especially time-resolved data, which is often classified and restricted to law enforcement agencies. Consequently, there is a need to identify universal properties and dynamic aspects of criminal networks, as well as develop simple models capable of describing these features and providing insights into the functioning of organized crime.

This work aims to bridge this gap through a comprehensive investigation of the static and dynamic aspects of corruption networks associated with corruption scandals in Brazil and Spain [1]. Our hand-curated datasets offer unprecedented information about corruption activities spanning decades of history in each country. Our findings indicate that corruption scandals typically involve no more than ten individuals, and that corruption networks exhibit universal properties, including exponential degree distributions, high clustering coefficients, small-worldness, homophily, modular structures, and a consistent association between the number of network modules and the total number of political scandals. We further address the temporal dimension of these networks by constructing evolving network representations, which in turn reveal remarkable similarities in the dynamics of political corruption networks of both countries. These networks evolve through a series of abrupt changes in the giant component caused by the coalescence network components, the number of network modules increases linearly with the number of scandals, and the number of recidivist agents is also linearly associated with the number of people in the network.

The identification of these universal characteristics allows us to propose a simple model (Figure 1) with the recidivism rate as the main parameter. Our model not only simulates corruption networks with features closely resembling those observed in empirical data but also indicates that corruption

networks operate near a critical recidivism rate. Below this threshold, the network fragments entirely, while above it, the network becomes excessively interconnected.



**Figure 1** – Our model starts with an empty network that grows by including complete graphs representing political scandals at each iteration. A fraction  $\alpha$  of agents added to the network at each iteration is considered recidivist criminals. The curve in the main panel shows the average fraction of the giant component of simulated networks ( $f$ ) as a function of the recidivism rate ( $\alpha$ ), while the inset depicts the derivative of  $f$  concerning  $\alpha$ . Vertical dashed lines indicate the model's critical recidivism rate  $\alpha_c = 0.065$ . This value is reasonably close to the recidivism rates observed in the Spanish ( $\alpha = 0.09$ ) and Brazilian ( $\alpha = 0.14$ ) networks. The three network visualizations represent typical model outcomes  $\alpha = 0$ ,  $\alpha = \alpha_c$ , and  $\alpha = 1$ .

## REFERENCES

- [1] A. F. Martins, B. R. da Cunha, Q. S. Hanley, S. Gonçalves, M. Perc, and H. V. Ribeiro, Universality of political corruption networks, *Scientific Reports* 12, 6858 (2022).



## MACHINE LEARNING PARTNERS IN CRIMINAL NETWORKS

**D.D. Lopes<sup>1</sup>, B.R. da Cunha<sup>2,3</sup>, A.F. Martins<sup>1</sup>, S. Gonçalves<sup>4</sup>, E.K. Lenzi<sup>5</sup>, Q.S. Hanley<sup>6</sup>, M. Perc<sup>7,8,9,10</sup>, H. V. Ribeiro<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

<sup>2</sup>Superintendência do Rio Grande do Sul, Polícia Federal Brasileira, Porto Alegre-RS, Brasil.

<sup>3</sup>Academia Nacional de Polícia, Polícia Federal Brasileira, Brasília – DF, Brasil.

<sup>4</sup>Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre-RS, Brasil.

<sup>5</sup>Departamento de Física, Universidade Estadual de Ponta Grossa – Ponta Grossa-PR, Brasil.

<sup>6</sup>School of Science and Technology, Nottingham Trent university, Nottingham, Reino Unido.

<sup>7</sup>Faculty of Natural Sciences and Mathematics, University of Maribor, Maribor, Eslovênia.

<sup>8</sup>Department of Medical Research, China Medical University Hospital, Taichung, Taiwan.

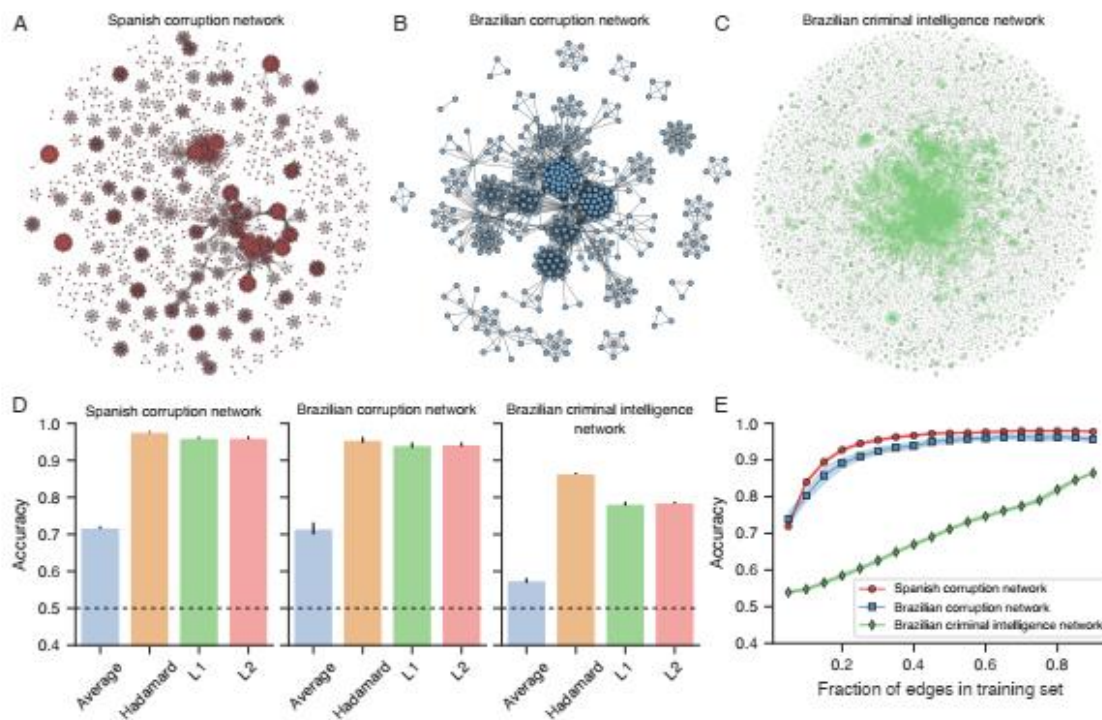
<sup>9</sup>Alma Mater Europaea, Slovenska, Maribor, Eslovênia.

<sup>10</sup>Complexity Science Hub Vienna, Vienna, Austria.

\*Corresponding author's email: [haroldov@gmail.com](mailto:haroldov@gmail.com)

Recent research has shown that criminal networks have complex organizational structures, but whether this can be used to predict static and dynamic properties of criminal networks remains little explored. Here, by combining graph representation learning and machine learning methods, we show that structural properties of political corruption, police intelligence, and money laundering networks can be used to recover missing criminal partnerships, distinguish among different types of criminal and legal associations, as well as predict the total amount of money exchanged among criminal agents, all with outstanding accuracy. We also show that our approach can anticipate future criminal associations during the dynamic growth of corruption networks with significant accuracy.

Our research [1] has been carried out using criminal networks associated with political corruption [2, 3], police intelligence, and financial transactions and machine learning techniques. Machine learning methods can take vector representations of suspected agents and estimate probabilities for the existence of connections among them and whether they are likely to be criminal or not. It is also worth remarking that we are witnessing a recent surge in research on graph representation learning which in turn yields a large number of techniques for generating effective vector representations for nodes, edges, and entire graphs. These methods can be roughly classified into two categories: traditional graph embedding methods and graph neural networks. The methods we have used are included in the first category, where the vector representations are obtained by optimizing some notion of proximity among nodes of the graph. In particular, we have shown that simple logistic classifiers trained with embedded representations obtained from *node2vec* are capable of predicting criminal partnerships with excellent precision in static scenarios where a fraction of network edges is removed and then recovered. Beyond predicting whether a link exists or not, we have also shown that k-nearest neighbor classifiers trained with vector representations obtained from *node2vec* correctly distinguish between criminal, mixed, and non-criminal relationships in approximately three out of four connections in a police intelligence network. Furthermore, the same embedding approach combined with k-nearest neighbor regressors predicts the total amount of money exchanged among agents of a criminal financial network with very good accuracy. Finally, we have shown that structural properties encoded by *node2vec* and learned by simple logistic models can predict future criminal partnerships during the growth process of corruption networks.



**Figure 1** – Predicting partnerships in criminal networks. Visualizations of the criminal networks related to (A) Spanish corruption cases, (B) Brazilian corruption cases, and (C) Brazilian criminal intelligence network. In corruption networks, nodes represent people involved in corruption scandals, and connections indicate co-participation in corruption cases. Nodes in the criminal intelligence network represent people investigated by the Brazilian Federal Police, and an edge indicates some co-participation uncovered by police investigations. (D) Accuracy of logistic classifiers trained for predicting missing links with *node2vec* representations of nodes and different binary operators. The bars stand for the average accuracy estimated from test sets over ten realizations of the embedding and training processes (error bars represent one standard deviation). The test sets are generated by randomly removing 10% of network edges and sampling the same number of false connections. The horizontal dashed lines represent the baseline accuracy (0.5). (E) Accuracy of logistic classifiers as a function of the fraction of nodes in the training set for each criminal network. The markers represent the average accuracy estimated from test sets over ten realizations of the embedding and training processes with the Hadamard operator.

## REFERENCES

- [1] Lopes, D. D., Cunha, B. R., Martins, A. F., Gonçalves, S., Lenzi, E. K., Hanley, Q. S., Perc, M., and Ribeiro, H. V. Machine learning partners in criminal networks, *Scientific Reports* 12, 15746 (2022).
- [2] Ribeiro, H. V., Alves, L. G. A., Martins, A. F., Lenzi, E. K., and Perc, M. The dynamical structure of political corruption networks, *Journal of Complex Networks* 6, 989–1003 (2018).
- [3] Martins, A. F., Cunha, B. R., Lenzi, Hanley, Q. S., Gonçalves, S., Perc, M., and Ribeiro, H. V. The dynamical structure of political corruption networks, *Journal of Complex Networks* 12, 6858 (2022).

# ESPELHO TÉRMICO APLICADO AO VIDRO ALUMINOSSILICATOS DE CÁLCIO DOPADO COM $\text{Eu}^{3+}$ VARIANDO A CONCENTRAÇÃO DE SILICA

G.M. Dias<sup>\*1</sup>, B.S. Greatti<sup>1</sup>, J.W. Berrar<sup>1</sup>, P.H.B. Librelato<sup>1</sup>, M. Sandrini<sup>2</sup>, A.N. Medina<sup>1</sup>,  
N.G.C. Astrath<sup>1</sup>, V.S. Zanuto<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

<sup>2</sup>Departamento Acadêmico de Física, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, UTFPR – Pato Branco-PR, Brasil

\*Corresponding author's email: [grazid966@gmail.com](mailto:grazid966@gmail.com)

**Palavras-chave:** Eficiência quântica; propriedades ópticas; propriedades térmicas.

O principal objetivo deste trabalho é utilizar a técnica fototérmica de Espelho Térmico para investigar propriedades termo-ópticas de vidros especiais. Os vidros são formados pela matriz aluminossilicato de cálcio com diferentes concentrações de Sílica, dopados com 2.5% de Európio trivalente ( $\text{Eu}^{3+}$ ), produzidos por meio de fusão em um forno à vácuo. Os resultados obtidos utilizando as técnicas fototérmicas são analisados teoricamente e usados para obter valores para a difusividade térmica das amostras.

## INTRODUÇÃO

Os Fenômenos Fototérmicos são a base fundamental para um conjunto de técnicas de elevadas sensibilidades, ampla aplicabilidade e, ainda algumas, de caráter remoto. Essas técnicas são capazes de determinar características ópticas, térmicas, e mecânicas de materiais distintos [1], sendo duas delas, as técnicas de Lente Térmica (LT) e Espelho Térmico (ET). Estas técnicas são conhecidas como *pump-probe*, baseadas no conceito de excitar um material com um feixe de luz, e detectar alguma possível resposta do material com um segundo feixe de luz. No caso de tais técnicas, a resposta do material é a variação do caminho óptico percorrido pelo feixe de prova devido ao aquecimento causado pelo feixe de excitação, sendo esta variação do caminho óptico correspondente a uma deformação ou a uma variação do índice de refração do material. O intuito deste trabalho foi estudar e investigar propriedades termo-ópticas de materiais vítreos especiais, dopados com o elemento Európio, utilizando a técnica de ET. Para tanto, foi fundamental a síntese de tais vidros em um processo à vácuo, seguido da realização dos experimentos nas amostras para obter o valor de difusividade térmica e propriedades termo-ópticas à medida que alteramos a concentração de  $\text{SiO}_2$ .

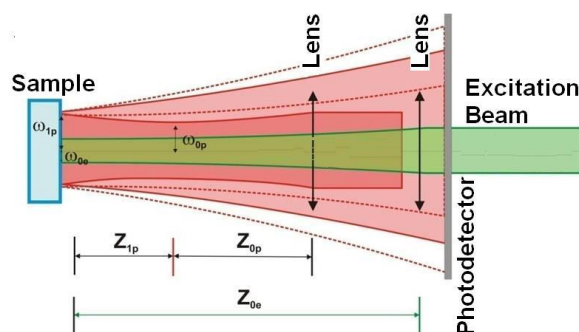
## MATERIAIS E MÉTODOS

As amostras foram preparadas em um forno à vácuo automatizado, cuja resistência e sistema de isolamento térmico são de grafite, para maior eficácia no processo de fusão dos vidros. Em sua estrutura, o forno possui um compartimento no qual os reagentes das amostras são colocados. Nele é conectado uma bomba de vácuo, um medidor de pressão, e outro de temperatura, para observar a

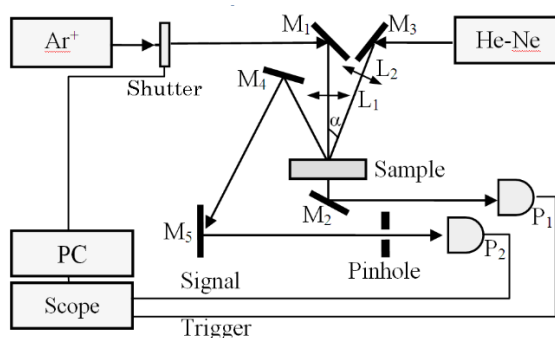
variação dessas duas grandezas na medida em que chegamos às condições ideais para a fusão. O método utilizado possibilitou a produção de um material resistente, o qual pôde ser cortado e polido para a realização das análises.

O efeito de ET surge quando um feixe laser incide sobre um material, sendo totalmente ou parcialmente absorvido e essa energia provoca um aquecimento local. Este aquecimento pode induzir um perfil de variação no índice de refração do material, ou um perfil de deformação superficial, ou induzir *stresses* ópticos nessa região aquecida. Essas variações agem como se fossem um elemento óptico inserido no caminho de um segundo feixe (feixe de prova), ou seja, uma lente côncava ou convexa, no caso em que o feixe de prova passa pelo material, ou um espelho côncavo ou convexo, no caso em que o feixe seja refletivo pela superfície do material.

O experimento de ET consiste em um laser de excitação de alta potência (Coherent, INNOVA 90) no comprimento de onda 514nm, que é direcionado por espelhos até passar por uma lente, a qual focaliza o feixe sobre a amostra. O efeito de ET é detectado por um feixe de prova de baixa potência (Melles Griot, 25-LHR-151-249) no comprimento de onda de 632,8nm, que também é direcionado por espelhos até passar por uma lente, a qual focaliza o feixe em uma posição a uma distância  $z_1$  da amostra, mostrado na Figura 1 assim como outros parâmetros geométricos do arranjo. O feixe de prova refletido pela amostra é direcionado para um sensor posicionado há uma grande distância da amostra. Por fim, os sensores são conectados a um osciloscópio, que faz a leitura de sinal observado pelo sensor, e o tempo de incidência do feixe excitação sobre a amostra é controlado por um obturador mecânico, mostrado na Figura 2



**Figura 1** – Arranjo geométrico dos feixes utilizados no Espelho Térmico. Feixe verde representa o feixe de excitação e o vermelho o feixe de prova.



**Figura 2** – Arranjo experimental do método de Espelho Térmico. Onde  $M_i$ ,  $L_i$ , e  $P_i$ , representam espelhos, lentes e fotodetectores, respectivamente.

## SINAL DE ESPELHO TÉRMICO

A variação de sinal de ET observado experimentalmente é dada por,

$$I(t) = I_0 \left| \int_0^\infty \exp[-(1 + iV)g - i\Phi_{TM}(g, t)] dg \right|^2, \quad (1)$$

em que  $I_0$  é a intensidade monitorada do feixe de prova,  $V$  é um parâmetro geométrico da montagem, e  $\Phi_{TM}(g, t)$  é a variação de fase induzida no feixe de prova, sendo,

$$\Phi_{TM}(r, t) = \frac{2\pi}{\lambda_p} 2[u_z(r, 0, t) - u_z(0, 0, t)], \quad (2)$$

em que  $\lambda_p$  é o comprimento de onda do feixe de prova, e  $u_z$  é a deformação superficial, fornecida pela solução da equação termoelástica, dada por

$$u_z(r, 0, t) = \int_0^\infty \frac{2\alpha_T(1+\nu)\alpha^2\vartheta(\alpha, t)J_0(\alpha r)}{1+2l^2\alpha^2 - \text{Cosh}(2l\alpha)} d\alpha, \quad (3)$$

com

$$\vartheta(\alpha, t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty \frac{T(\alpha, \lambda, t)}{(\alpha^2 + \lambda^2)} \{ [2l\alpha + \text{Sinh}(2l\alpha)] - [2l \text{Sinh}(l\alpha)] \lambda \text{Sin}(l\lambda) - 2[l\alpha \text{Cosh}(l\alpha) + \text{Sinh}(l\alpha)] \text{Cos}(l\lambda) \} d\lambda.$$

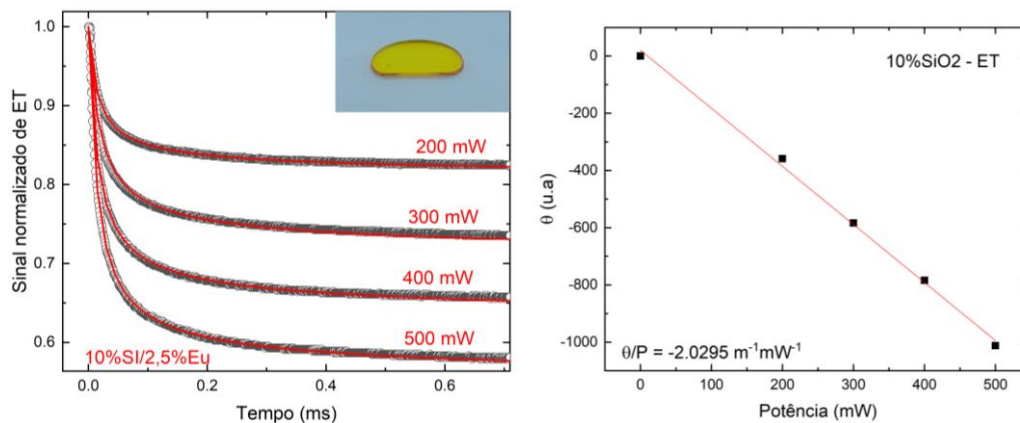
Aqui consideramos amostras pouco absorvedoras, obtendo a variação de temperatura da amostra,

$$T(\alpha, \lambda, t) = \sqrt{2\pi} \frac{Q_0}{c\rho} \delta(\lambda) \frac{\omega^2}{4} e^{-\frac{\omega^2\alpha^2}{8}} \int_0^t e^{-D\alpha^2\tau} d\tau, \quad (4)$$

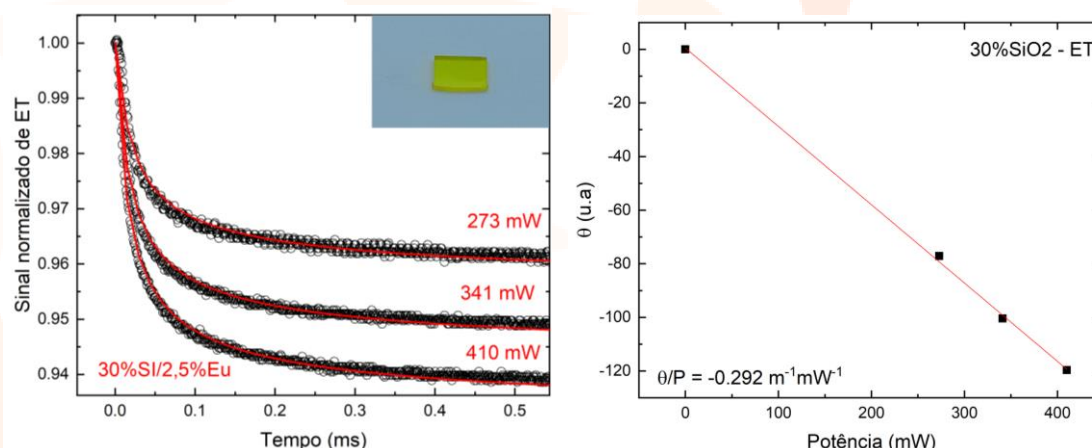
em que  $c$ ,  $\rho$ ,  $D$  são o calor específico, densidade e difusividade térmica do material, respectivamente, e  $\omega$  é o raio do feixe de excitação.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

As Figuras 3 e 4 mostram os transientes ajustados e fotos das amostras CAS dopadas com 2,5% de Európio com 10 e 30% de Silica, respectivamente.



**Figura 3** – Sinal de ET da amostra CAS com 10% de sílica dopada com 2,5% de Európio, sob diferentes potências de excitação. Valor obtido para  $\theta$  pelo ajuste para diferentes potencias de excitação.



**Figura 4** – Sinal de ET da amostra CAS com 30% de sílica dopada com 2,5% de Európio, sob diferentes potências de excitação. Valor obtido para  $\theta$  pelo ajuste para diferentes potências de excitação.

O ajuste nos forneceu uma difusividade térmica de  $(4,1 \pm 0,2) \times 10^{-7} \text{ m}^2 / \text{s}$ , estando condizente com valores encontrados na literatura. Além disso os ajustes fornecem os parâmetros  $\theta_{TM}/P$  (apresentados nas Figuras 3 e 4), que nos fornece as propriedades termo-ópticas do material. Com tais parâmetros em mãos, é possível calcular a eficiência quântica de emissão do  $\text{Eu}^{3+}$  nos vidros com diferentes concentrações de sílica (que será apenas apresentado no artigo) utilizando a relação

$$\phi = 1 - \eta \frac{\lambda_e}{\langle \lambda_{em} \rangle} . \quad (5)$$

## CONCLUSÕES

Apresentamos o modelo de amostra finita para a técnica de Espelho Térmico resolvido no tempo. A equação termoelástica para a deformação superficial e a variação da intensidade do feixe de prova foram derivadas. Experimentos de Espelho Térmico foram realizados nas amostras de aluminossilicato de cálcio dopados com európio com diferentes concentrações de sílica. Com tais resultados poderemos obter a dependência da eficiência quântica de emissão das amostras com a concentração de sílica.

## REFERÊNCIAS

- [1] N. G. C. Astrath, et al, JOSA B, “Finite-size effect on the surface deformation Thermal Mirror method”, In Press (2011).
- [2] N. G. C. Astrath, et al, Applied Physics Letters, 91,191908 (2007).
- [3] L. C. Malacarne, et al, Applied Physics Letters, 92,131903 (2008).

## DETECÇÃO OPTOACÚSTICA DE EFEITOS DE LENTE FOTOINDUZIDOS EM ESCALA DE TEMPO DE NANOSSEGUNDOS EM LÍQUIDOS

**E.V. Bergmann<sup>1</sup>, G.V.B. Lukasiewicz<sup>2,3</sup>, B. Lendl<sup>3</sup>, A.R. Sampaio<sup>1</sup>, V.S. Zanuto<sup>1</sup>, M.L. Baesso<sup>1</sup>,  
L.C. Malacarne<sup>1</sup>, N.G.C. Astrath<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

<sup>2</sup>Departamento de Física, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, UTFPR – Medianeira-PR, Brasil.

<sup>3</sup>Institute of Chemical Technologies and Analytics, Technische Universität Wien, Vienna, Austria.

\*Corresponding author's email: [eduardobergmann1@hotmail.com](mailto:eduardobergmann1@hotmail.com)

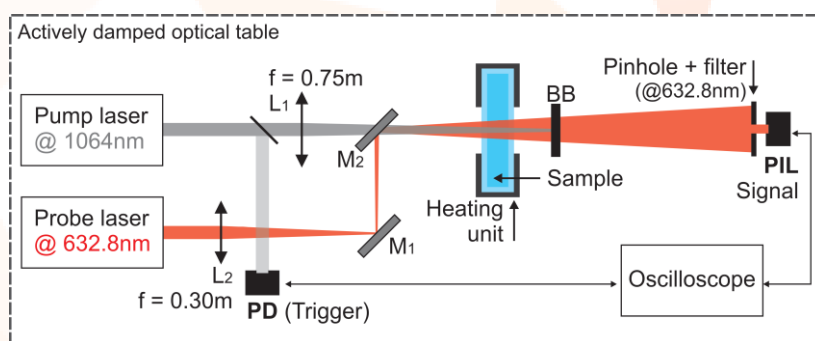
### INTRODUÇÃO

As propriedades acústico-ópticas dos líquidos são de fundamental importância para diversas aplicações, como no projeto e implementação de diversos dispositivos ópticos e fotônicos, oferecendo controle preciso e modulação da luz em resposta a estímulos mecânicos externos. Particularmente interessantes, os coeficientes piezo-ópticos e elasto-ópticos desempenham um papel crítico no projeto e otimização de muitos dispositivos ópticos e são fundamentais para a compreensão das ondas acústicas geradas pela interação entre luz e matéria. Esses coeficientes descrevem a mudança no índice de refração de um material em resposta ao estresse ou deformação mecânica.

Métodos ópticos são promissores para geração e detecção de ondas acústicas em sistemas optoacústicos. Por exemplo, métodos pulsados de laser de curta duração podem gerar uma série de efeitos físicos em líquidos quando sondados em diferentes escalas de tempo.

### MATERIAIS E MÉTODOS

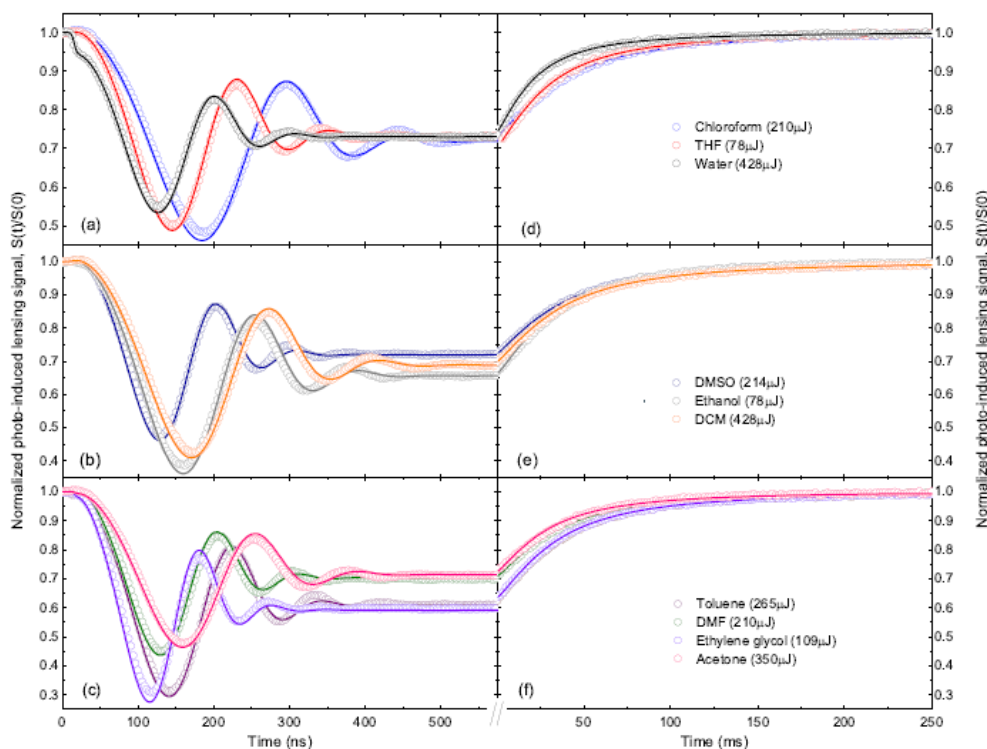
O método consiste em dois lasers usados para bombear e provar os efeitos. O laser de luz pulsado (TEM<sub>00</sub> Gaussiana em  $\lambda = 1064$  nm) incide na amostra e gera os efeitos. Seu raio é constante ao longo da espessura da amostra. Depois de passar pela amostra, o feixe de prova (laser HeNe Gaussiano TEM<sub>00</sub> de onda contínua em  $\lambda = 632,8$  nm) é monitorado por um detector óptico no campo distante. Um conjunto de filtro pinhole é posicionado na frente do sensor de modo que apenas a parte central do feixe da sonda seja registrada por um osciloscópio digital (largura de banda de 1 GHz). Os parâmetros experimentais estão descritos na legenda da Figura 1. A amostra foi colocada em uma cubeta de quartzo de espessura  $L = 5$  mm, mantendo a temperatura em 25°C por meio de uma unidade de aquecimento acoplada a um controlador de temperatura.



**Figura 1** – Esquema da configuração do PIL dependente do tempo. PD: fotodetector, M: espelhos, L: lentes, BB: filtro de feixe de excitação. Os parâmetros geométricos de configuração medidos são  $\omega_{0e} = 98\mu\text{m}$ ,  $\omega_p = 317\mu\text{m}$ ,  $V = 6,82$ .

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

A Figura 2 mostra os sinais transitórios do PIL para regimes de tempo curtos, (a) – (c) e longos, (d) – (e). Os sinais experimentais obtidos têm uma média de mais de 500 transientes. A variação do índice de refração devido à mudança de temperatura e pressão é observada simultaneamente no início do transiente. As oscilações em curto espaço de tempo são devidas às ondas acústicas lançadas pelo pulso. Essas oscilações desaparecem em torno de 500 ns, correspondendo ao tempo necessário para as ondas acústicas viajarem para fora da área sondada pelo feixe laser contínuo. Após o desaparecimento das oscilações, o efeito térmico domina os transientes e o relaxamento térmico é observado. Isto é visto em transientes de longo tempo, à medida que a difusão de calor assume os efeitos de pressão, atingindo um sinal de estado estacionário após 200 ms.

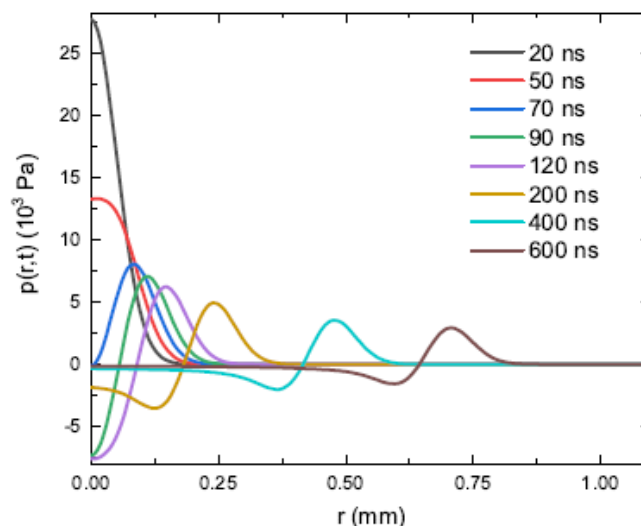


**Figura 2** – Sinal PIL em diferentes escalas de tempo sob excitação pulsada a 1064 nm. Os cálculos numéricos (linhas contínuas) são realizados utilizando  $S(t)/S(0)$ , com nível de confiança de 95%. Os dados experimentais (símbolos abertos) apresentam incerteza menor que 1%.



Uma vez que a onda acústica tenha se dissipado completamente, o relaxamento do sinal da lente fotoinduzida é governado principalmente por efeitos térmicos.

A Figura 3 apresenta a distribuição da pressão radial da acetona em diferentes momentos após o pulso. A pressão pode atingir até 10 kPa em muito pouco tempo, diminuindo com o tempo. A distribuição de pressão negativa é observada à medida que a pressão positiva se espalha radialmente pela amostra. A principal região de pressão que contribui para o sinal PIL é aquela com raio menor que 0,5 mm, que é aproximadamente o tamanho do diâmetro do feixe da sonda.



**Figura 3** – Distribuição de pressão na acetona calculada para diferentes tempos após a excitação com energia  $E_0 = 450\mu\text{J}$ . Os parâmetros experimentais são apresentados na legenda da Figura.

Os parâmetros medidos e ajustados listados nas Tabelas 1 e 2.

TABLE I. Thermo-optical properties of the liquids measured at 25°C.

Liquid	$\rho$ $\text{kg/m}^3$	$c_p^{27}$ $\text{J/kgK}$	$\theta_{th}$	$D$ $10^{-7}\text{m}^2/\text{s}$	$k_{th}$ $\text{W/mK}$	$n$	$-\partial n/\partial T$ $10^{-4}/\text{K}$	$A_e$ (1/m) at 1064 nm
Water	996.9	4180	0.537	1.435	0.598	1.33267	1.10	14.43
Ethanol	793.2	2570	0.673	0.828	0.169	1.35962	4.41	12.00
Acetone	785.9	2140	0.596	1.072	0.180	1.35552	5.88	1.47
Toluene	862.5	1700	0.788	0.914	0.134	1.49331	6.30	2.10
Chloroform	1478.0	1050	0.555	0.838	0.130	1.44222	6.70	1.84
Ethylene Glycol	1109.4	2360	0.815	0.996	0.261	1.42782	3.06	19.23
Dimethylformamide (DMF)	946.4	1998	0.579	0.926	0.175	1.42782	4.93	3.20
Dichloromethane (DCM)	1299.8	1188	0.660	0.883	0.136	1.42024	6.92	1.06
Tetrahydrofuran (THF)	882.9	1718	0.532	0.992	0.150	1.40414	5.73	5.50
Dimethyl sulfoxide (DMSO)	1092.7	1878	0.546	0.899	0.184	1.47900	4.98	3.21

TABLE II. Acousto-optic properties of the liquids at 25°C.

Liquid	$c_s$	$\beta$	$\partial n/\partial p$	$\partial n/\partial p$	$\rho \partial n/\partial \rho$	$\rho \partial n/\partial \rho$
	m/s	$10^{-4}/K$	$10^{-10}/Pa$	$10^{-10}/Pa$	Measured	Eq. 11
Water	1482	2.53	1.40	1.67	0.306	0.366
Ethanol	1144	10.89	3.95	3.86	0.406	0.400
Acetone	1170	14.11	3.78	3.67	0.407	0.395
Toluene	1306	10.82	3.83	3.95	0.563	0.581
Chloroform	984	12.65	3.71	3.56	0.526	0.509
Ethylene Glycol	1660	5.08	1.79	1.60	0.541	0.490
Dimethylformamide (DMF)	1457	9.48	2.61	2.44	0.525	0.490
Dichloromethane (DCM)	1071	14.79	3.12	3.22	0.475	0.479
Tetrahydrofuran (THF)	1284	12.54	3.16	3.15	0.460	0.458
Dimethyl sulfoxide (DMSO)	1485	8.78	2.41	2.33	0.585	0.560

## CONCLUSÕES

Para resumir, parâmetros importantes, como os coeficientes térmico, piezo e elasto-óptico, foram derivados quantitativamente para dez líquidos diferentes. Por exemplo, os coeficientes piezoópticos e termoópticos são de suma importância no campo da óptica e fotônica devido ao seu impacto significativo no comportamento de materiais e dispositivos ópticos, influenciando diretamente a propagação da luz através de componentes ópticos, tais como lentes, guias de onda, moduladores e interruptores.

## REFERÊNCIAS

- [1] G. A. S. Flizikowski, E. V. Bergmann, A. Bazachi, R. S. Mendes, A. Novatski, C. Jacinto, M. L. Baesso, L. C. Malacarne, and N. G. C. Astrath, “Optical detection of the ultrasound-induced pulsed thermal lens close to the ice-water phase transition,” *Appl. Opt.* 62, 5094-5098 (2023). doi.org/10.1364/AO.496255

## LENTE TÉRMICA: UMA COMPARAÇÃO ENTRE OS MODELOS TEÓRICOS QUE DESCREVEM O EFEITO E SEUS RESULTADOS EXPERIMENTAIS

V P.H. Librelato\*, J.W. Berrar, B.S. Greatti, G.D. Mendonça, N.G.C. Astrath

Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

\*Corresponding author's email: [ra125225@uem.br](mailto:ra125225@uem.br)

**Palavras-chave:** Espectroscopia de Lente Térmica, Fenômenos Fototérmicos, Materiais Vítreos.

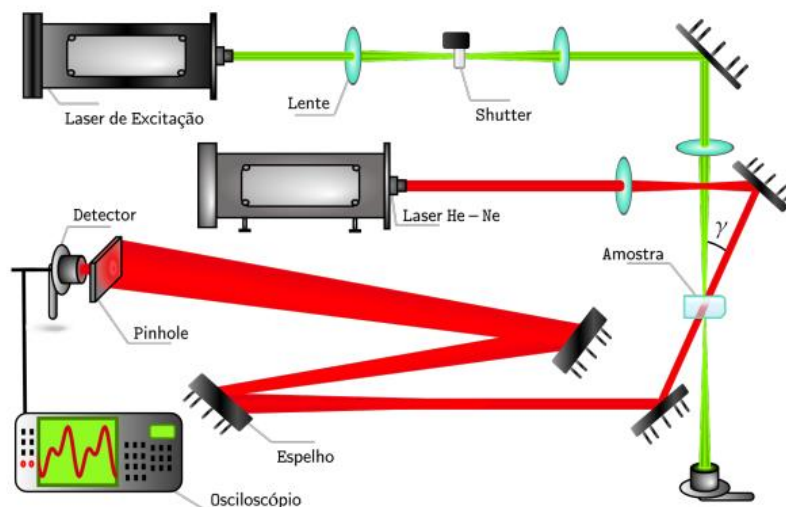
O presente trabalho foi aplicado com o objetivo de estudar e comparar os diferentes modelos existentes da Espectroscopia de Lente Térmica, bem como realizar simulações numéricas para abordar aspectos desses modelos. Além da revisão da literatura pertinente ao assunto, para as simulações, foi empregado o programa "*Wolfram Mathematica*", muito usado em estudos de modelos teóricos no geral. Como resultado, foram obtidas simulações que satisfatoriamente casam com as condições descritas pelas equações diferenciais do modelo de Shen, apontando a precisão deste em descrever o efeito térmico quando comparado aos demais.

### INTRODUÇÃO

Proposto inicialmente por Gordon [1] e colaboradores, em 1965, a ELT busca explicar a mudança no índice de refração de um material ( $dn/dT$ ), quando este é submetido a um feixe de laser de alta intensidade. Devido a sua absorção óptica finita, o material absorve a energia luminosa do feixe, que gera uma difusão de calor pela sua extensão. O gradiente de temperatura da amostra causa uma dilatação irregular na mesma, que passa a ter uma variação no seu índice de refração, alterando o caminho óptico do feixe, similar a uma lente convencional.

Com o decorrer do tempo, vários pesquisadores vieram a aperfeiçoar o modelo proposto por Gordon et al., Hu e Whinnery [1] aprimoraram a montagem do experimento, promovendo um ganho na sensibilidade. M. E. Long e colaboradores [1], pouco tempo depois, propuseram um modelo da ELT com feixe duplo. A utilização de um feixe de excitação e outro de prova permitiu uma sensibilidade ainda maior nas medidas, visto que os detectores podiam ser ajustados exclusivamente para o comprimento de onda do segundo. Já Sheldon et al [2] abordaram o efeito pela teoria da difração de Fresnel, levando em conta sua natureza aberrante, considerando a absorção de energia por toda a amostra, e alterando a descrição do efeito, que até então era abordado sob uma descrição parabólica. No entanto, o modelo proposto só abarcava uma montagem de feixe único, ou com feixe duplo casado. Esta última viria a ser alvo do modelo de Fang e Swofford [2].

Mais adiante, em 1992, J. Shen e colaboradores [3] apresentaram o modelo aberrante de duplo-feixe descasado para a LT. Nessa montagem, como se pode ver pela Figura 1, os feixes se dispõem sobre a amostra com raios diferentes, com um feixe usado para excitação da amostra, e outro para comprovar o efeito térmico. Isso possibilita o processamento dos sinais de LT com uma sensibilidade demasiadamente maior quando comparado aos modelos anteriores.



**Figura 1** – Montagem da ELT no modelo de Shen. O ângulo  $\gamma$  corresponde a uma pequena inclinação entre os feixes. Note que esta montagem faz uso de dois feixes laser.

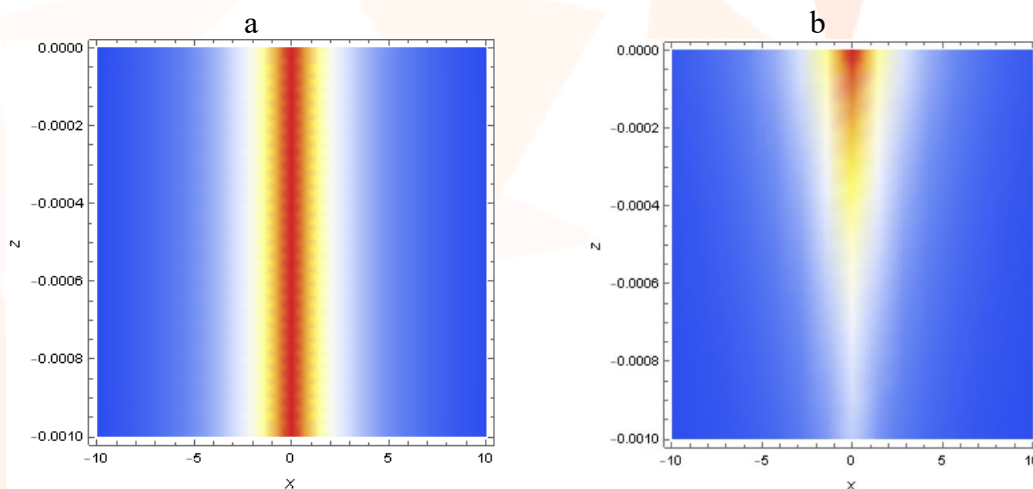
Para o estudo desse modelo, se faz necessário a resolução da equação da difusão de calor para o perfil de temperatura do laser de excitação ( $T(r,z,t)$ ). A solução, na forma estacionária e em coordenadas cilíndricas, provoca a variação da fase do feixe de prova, que tem o seu campo elétrico afetado. A variação do campo elétrico do feixe de prova causa um transiente de intensidade, que configura o sinal da LT medido no osciloscópio.

Esse modelo se apresenta, quando comparado aos demais, como o caso geral e mais preciso da ELT. O modelo aberrante de Sheldon, apesar de quantitativamente correto, abrange somente um caso particular, e os modelos anteriores, de perfil parabólico, não geram o transiente de intensidade essencial para o sinal do efeito

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

### Simulação - Perfil de Temperatura do Laser de Excitação

Para o perfil de temperatura do laser de excitação, que interage termicamente com a amostra, foram realizadas simulações com os seguintes parâmetros  $\beta = 504\text{m}^{-1}$ ;  $\Phi = 1.85$ ;  $P = 0.02\text{mW}$ ;  $k = 1.7\text{Js}^{-1}\text{cm}^{-1}\text{K}^{-1}$ ;  $\omega = 7,6 \times 10^{-6}\text{cm}$ ;  $D = 6 \times 10^{-7}\text{cm}^2\text{s}^{-1}$ . A Figura 2.a mostra como temperatura se concentra na porção central por onde o feixe passa, e se dissipa conforme a distância aumenta. A natureza desse comportamento se dá devido à distribuição gaussiana do laser. Esse perfil de temperatura se mantém constante até depois da amostra ( $Z > 0$  e  $X = 0$ ).

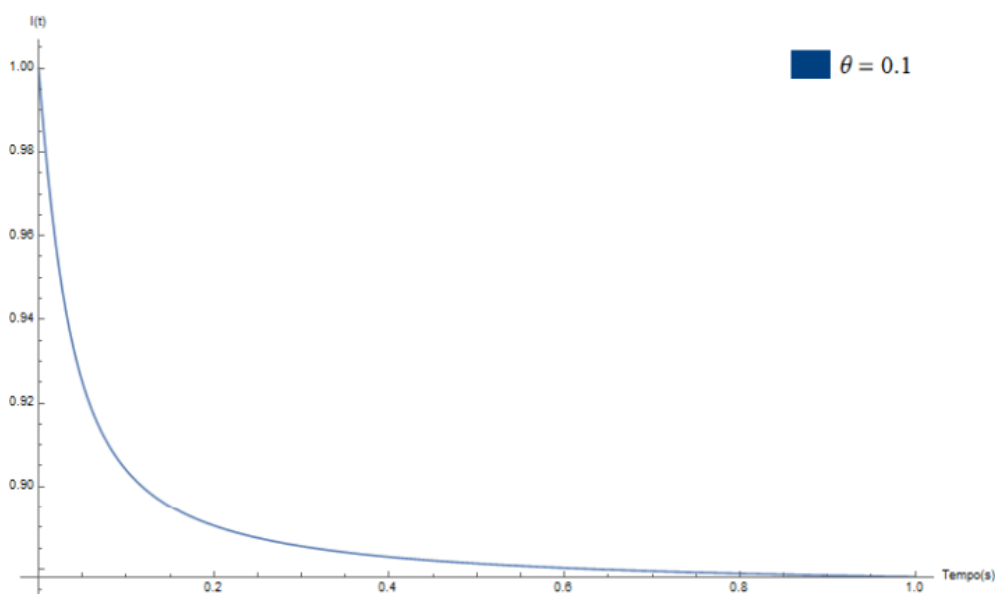


**Figura 2** – Simulação das distribuições de temperatura devido a passagem de um feixe de laser, (a) para um material com baixa absorção, (b) para um material absorvedor.

Em uma segunda simulação, o aumento do coeficiente de absorção óptica ( $\beta$ ), de  $504\text{m}^{-1}$  para  $1200\text{m}^{-1}$ , enquanto os demais parâmetros se mantiveram constantes, fez com que a distribuição de temperatura ficasse concentrada nas regiões iniciais de  $z$ . Mostrando que o aumento excessivo desse parâmetro reproduz a amostra absorvendo boa parte da energia térmica ao interagir com o laser de excitação. Por consequência, isso faz com que pouca energia térmica pode alterar o perfil de temperatura após a amostra, como pode ser visto a partir de  $Z = -0.004\text{m}$  e  $X = 0$  na Figura 2.b.

### Simulação - Transiente do Sinal de Lente Térmica

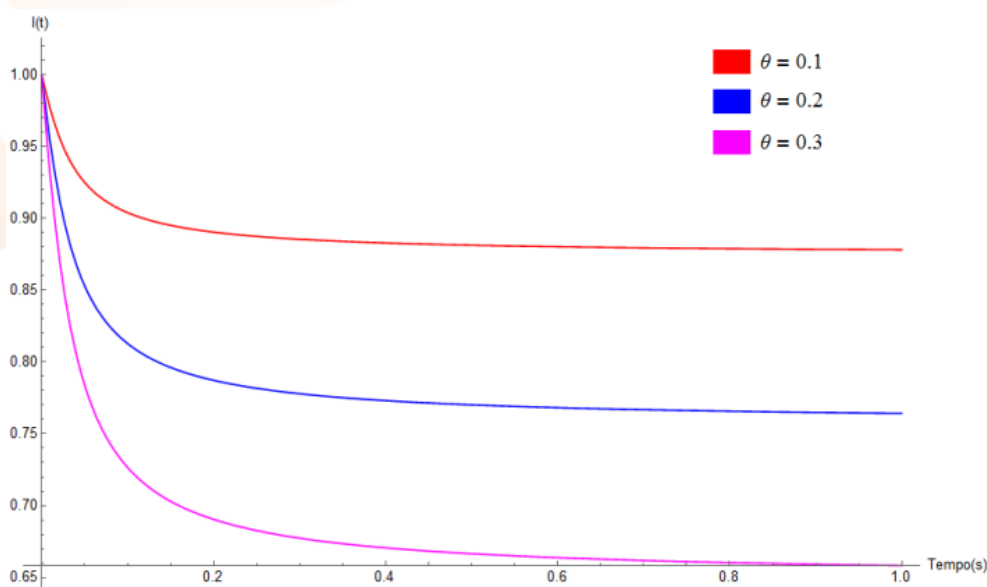
Já para a simulação do sinal da LT, os parâmetros escolhidos foram:  $t_c = 10^{-5}\text{s}$ ;  $m = 25$ ;  $V = 7$ ;  $I(0) = 10^{-3}\text{Wm}^{-2}$ , e  $\theta = 0.1$ :



**Figura 3** – Gráfico simulado do transiente da LT. A queda na intensidade indica a variação da fase causada pelo efeito térmico.

Conforme a Figura 3, a queda na intensidade configura o efeito térmico do perfil de temperatura do laser de excitação sobre o índice de refração dentro da amostra. Esse efeito varia a fase do feixe de prova, que têm o seu campo elétrico alterado no caminho óptico até detector. Essa queda de intensidade configura o sinal da LT, e pode ser medida laboratorialmente em um osciloscópio.

Para fins de comparação de múltiplos transientes, o parâmetro  $\theta$  foi variado em uma simulação posterior, com os demais parâmetros constantes:



**Figura 4** – Gráfico simulado comparando 3 sinais diferentes de LT. O parâmetro  $\theta$  varia de 0,1 a 0,3.

Nesta última simulação, foi possível notar que a variação do parâmetro  $\theta$  altera a posição geométrica de cada sinal, configurando, conseqüentemente, a amplitude do sinal de LT no modelo de Shen.

## CONCLUSÕES

Diante o que foi exposto anteriormente, conclui-se que o projeto cumpriu com êxito o seu objetivo de estudar os diferentes modelos da ELT, desde a medida inicial de Gordon, até o modelo de Shen, bem como realizar simulações deste. Além disso, tais simulações apontaram que o modelo de Shen explica de maneira satisfatória o fenômeno da ELT, em consonância com que foi apresentado na literatura usada como base.

## REFERÊNCIAS

- [1] J. W. Berrar, “Investigação das propriedades Ópticas, térmicas e fotoativas de corantes dpp por meio da espectroscopia de lente térmica resolvida no tempo,” 2022.
- [2] P. R. B. Pedreira, Desenvolvimento de um protótipo de Lente Térmica resolvida no tempo para estudos de líquidos em condições transitórias em tempo real. PhD thesis, 2005.
- [3] J. Shen, R. D. Lowe, and R. D. Snook, “A model for cw laser induced modemismatched dual-beam thermal lens spectrometry,” *Chemical Physics*, vol. 165, no. 2, pp. 385–396, 1992.

## ESTUDO DA TRANSFERÊNCIA DE ENERGIA ENTRE $\text{Pr}^{3+}$ E $\text{Yb}^{3+}$ EM VIDROS LSCAS VIA ESPECTROSCOPIA FOTOACÚSTICA

**B.S. Greatti, M.L. Baesso, V.S. Zanuto**

Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

\*Corresponding author's email: [greattibrenno@gmail.com](mailto:greattibrenno@gmail.com)

**Palavras-chave:** *Back transfer*, íons trivalentes, luminescência.

Neste trabalho é reportado o estudo espectroscópico da existência do processo de *downconversion* (DC) via Fotoluminescência (FL) em vidros LSCAS (*low-silica calcium aluminosilicate*) codopados com íons  $\text{Pr}^{3+}/\text{Yb}^{3+}$ . A dependência entre as emissões na região do visível e infravermelho próximo são avaliadas conforme a concentração em massa (wt.%) destes íons. Ademais, os sinais fotoacústicos são analisados conforme a variação da concentração via Espectroscopia Fotoacústica (PAS) a fim fornecer maiores informações a respeito da transferência de energia entre os íons. Os resultados indicam a ocorrência do processo de *downconversion* nas amostras examinadas, seguido de uma transferência inversa (*back-transfer*).

### INTRODUÇÃO

O processo DC, previsto por Dexter em 1950, consiste na conversão de fótons de alta energia em dois ou mais fótons de menor energia através da transferência entre íons presentes no material [1]. A atenção se voltou a estes materiais com o crescente interesse na aplicação no melhoramento da conversão espectral em células solares de silício. A limitação atual se baseia no descasamento espectral existente entre o espectro de emissão solar e o band-gap do silício. Sendo assim, a maioria da energia é convertida em calor. Mais recentemente, estudos demonstram que o próximo avanço nesta área pode vir do desenvolvimento de materiais conversores que possam ser utilizados em combinação com a célula a fim de resgatar os fótons que poderiam ser perdidos e convertê-los em fótons que possam ser, por fim, absorvidos pela célula. Em especial, o uso do par  $\text{Ln}^{\text{N}+} - \text{Yb}^{3+}$  tem sido intensamente estudado para converter a energia do fóton absorvido pelo  $\text{Ln}^{\text{N}+}$  na região UV-Vis para um ou mais fótons de menor energia no infravermelho próximo. Estes fótons são compatíveis para serem absorvidos pelo  $\text{Yb}^{3+}$  e posteriormente emitidos em uma região mais próxima do bandgap do silício (1000nm) [2].

Neste trabalho, a FL e a PAS foram utilizadas para identificar o crescimento ou decrescimento das emissões na região UV-Vis e NIR em amostras LSCAS:  $x\text{Pr}^{3+}/y\text{Yb}^{3+}$  como possíveis indicadores dos mecanismos de transferência de energia entre os íons.

### MATERIAIS E MÉTODOS

Um conjunto de amostras foi preparado com composição em peso segundo a Tabela 1.

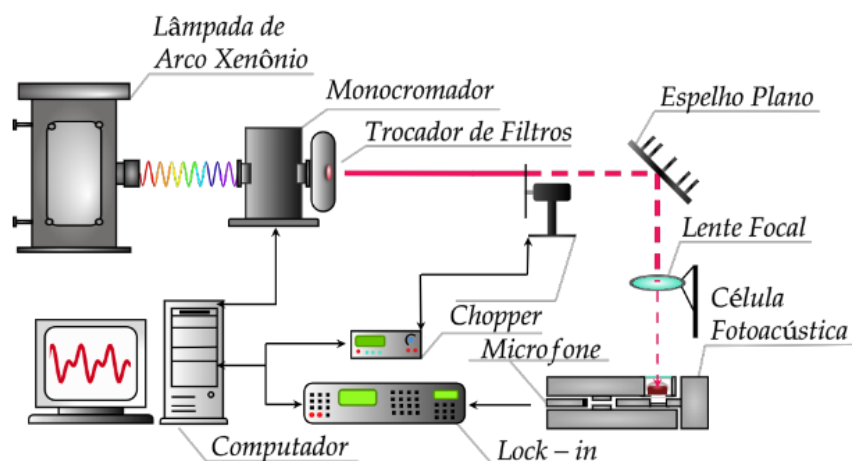
**Tabela 1.** Composição das amostras LSCAS:  $x\text{Pr}^{3+}/y\text{Yb}^{3+}$ .

wt.%	CaO	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	SiO <sub>2</sub>	MgO	Pr <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Yb <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
LSCAS1.0Pr0.0Yb	46.9	41.0	7.0	4.1	1.0	0.0
LSCAS1.0Pr1.0Yb	46.4	40.5	7.0	4.1	1.0	1.0
LSCAS1.0Pr2.0Yb	45.9	40.0	7.0	4.1	1.0	2.0
LSCAS1.0Pr4.0Yb	44.9	39.0	7.0	4.1	1.0	4.0
LSCAS1.0Pr8.0Yb	42.9	37.0	7.0	4.1	1.0	8.0

Os materiais foram fundidos à vácuo em temperatura e pressão de aproximadamente 1600°C e 10<sup>-4</sup> torr, respectivamente, em cadinho de grafite durante cerca de 2h. Tais condições favorecem a expulsão de moléculas OH<sup>-</sup>, fornecem alta transparência e contribuem para a resistência mecânica.

Para as medidas de fotoluminescência, as amostras foram cortadas e polidas sob qualidade óptica a fim de evitar possíveis perdas por espalhamento e reflexão. Os espectros de emissão foram obtidos tanto no UV-Vis quanto NIR sob excitação de um laser He-Cd (Kimmon/IK5652R-G) em 442 nm. A luminescência foi colhida e separada via grades de difração e detectada com um tubo fotomultiplicador (Hamamatsu/R928) ou detector InGaAs. Os sinais de PL foram amplificados via amplificador *lock-in*.

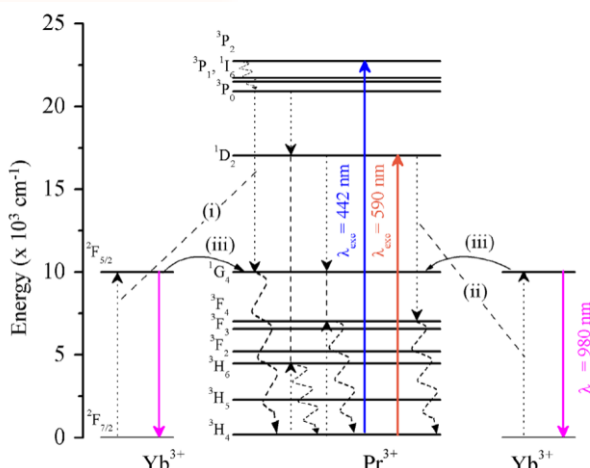
Para a espectroscopia fotoacústica, as amostras foram maceradas em pó, com tamanho de grão controlado. Como fonte, foi utilizada uma lâmpada de Arco Xenônio (model 68820; Oriel Corp.) de 1000W de potência, com incidência direta nas grades de difração de um monocromador (Cornerstone<sup>TM</sup> 130B 1/8m; Newport) com filtros acoplados (UFSW-100, Newport). Após ser modulado por um modulador mecânico controlado (MC2000B, THORLabs) o feixe é direcionado para o interior de uma célula fotoacústica onde reside a amostra. O sinal fotoacústico é detectado via microfone capacitivo (model 2639; Bruel & Kjaer) e amplificado por um amplificador *lock-in*. Todos os espectros obtidos foram normalizados com respeito ao sinal de uma amostra padrão de carvão ultrapuro. Um esquema da montagem está explicitado na Figura 1.

**Figura 1** – Esquema experimental da Espectroscopia Fotoacústica (PAS).



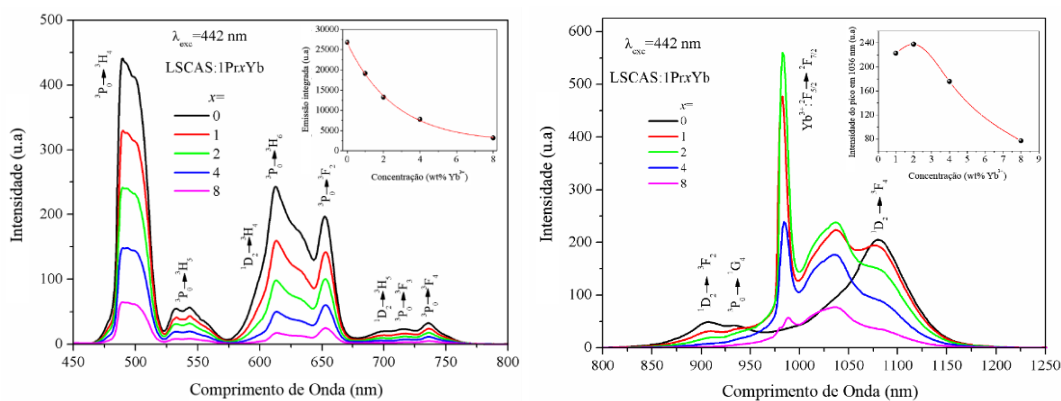
## RESULTADOS E DISCUSSÃO

A Figura 2 apresenta um diagrama de energia simplificado da interação entre os íons  $\text{Pr}^{3+}$  e  $\text{Yb}^{3+}$  presentes na matriz. Neste diagrama, dois mecanismos de relaxação cruzada ( $\text{Pr}^{3+}: {}^3\text{P}_0 \rightarrow {}^1\text{G}_4$  e  $\text{Pr}^{3+}: {}^1\text{D}_2 \rightarrow {}^3\text{F}_4$ ) levam à emissão de um fóton ( $\text{Yb}^{3+}: {}^2\text{F}_{5/2} \rightarrow {}^2\text{F}_{7/2}$ ). Um segundo mecanismo pode ocorrer entre o nível  $\text{Yb}^{3+}: {}^2\text{F}_{5/2}$  para o  $\text{Pr}^{3+}: {}^1\text{G}_4$ , caracterizado como um *back transfer*, isto é, uma devolução da energia no sentido oposto ao usual.



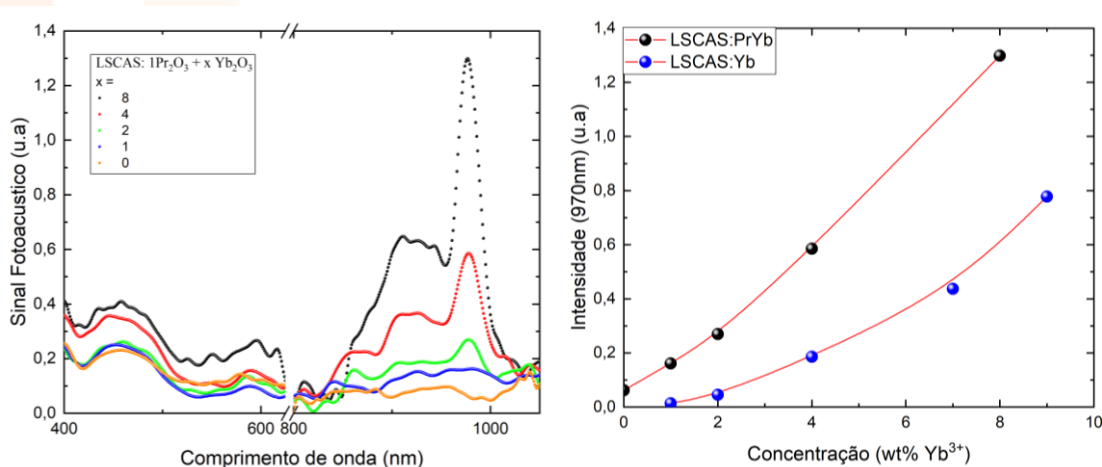
**Figura 2** – Diagrama de Jablonski para os mecanismos eletrônicos entre os íons  $\text{Pr}^{3+}$  e  $\text{Yb}^{3+}$ .

A Figura 3.a apresenta o espectro de emissão no visível para os vidros codopados sob excitação em 442nm. Todas as emissões observadas são referentes ao  $\text{Pr}^{3+}$  referentes aos níveis  ${}^3\text{P}_0$  e  ${}^1\text{D}_2$ . Com a adição de  $\text{Yb}_2\text{O}_3$  as emissões decrescem exponencialmente. Como a concentração de  $\text{Pr}^{3+}$  é constante, a adição de  $\text{Yb}^{3+}$  induz uma competição por energia, ou uma transferência cada vez mais eficaz do  $\text{Pr}^{3+}$  para o  $\text{Yb}^{3+}$ . A curva em preto (Fig. 3.b) expõe três bandas de emissão do  $\text{Pr}^{3+}$ , que decaem com a adição de  $\text{Yb}^{3+}$  como observado na Fig. 3.a. Já as bandas do  $\text{Yb}^{3+}$  seguem o padrão exposto no detalhe, com um leve aumento com máximo em 2 wt.% deste íon. Com a continuação do aumento de  $\text{Yb}^{3+}$ , a intensidade de emissão decai exponencialmente. Este decaimento pode ser atribuído tanto ao processo de *back transfer* explicitado anteriormente quanto ao *quantum quenching* da vizinhança ( $\text{Yb}^{3+} \rightarrow \text{Yb}^{3+}$ ). A distinção dos dois possíveis fenômenos pode ser feita através da análise do tempo de vida, uma vez que a transferência de energia para o nível  ${}^1\text{G}_4$  do  $\text{Pr}^{3+}$  é menor do que para o nível  ${}^2\text{F}_{5/2}$  do próprio  $\text{Yb}^{3+}$  e, portanto, o primeiro mecanismo é mais provável de ocorrer [3].



**Figura 3** – Espectroscopia de Fotoluminescência com excitação em 442 nm e detecção (a) na região do visível ( $\text{Pr}^{3+}$ ) e (b) no infravermelho próximo ( $\text{Pr}^{3+}$  e  $\text{Yb}^{3+}$ ).

Em complemento, a espectroscopia fotoacústica (Fig. 4.a) foi utilizada para analisar a absorção e posterior geração de calor, destacando as regiões de absorção do  $\text{Pr}^{3+}$  (400 a 625 nm) e do  $\text{Yb}^{3+}$  (800 a 1050 nm). Percebe-se que com o aumento da concentração de  $\text{Yb}^{3+}$ , a absorção do  $\text{Pr}^{3+}$  mantém-se estável até que a wt.% ( $\text{Yb}_2\text{O}_3$ ) > 2% e, a partir disso, passa a crescer, indicando que a transferência  $\text{Yb}^{3+} \rightarrow \text{Pr}^{3+}$  pode estar ocorrendo devido a um aumento das relaxações multifônon. Por outro lado, a absorção referente ao  $\text{Yb}^{3+}$  simplesmente cresce conforme a concentração. Entretanto, quando a intensidade de sinal fotoacústico em 970 nm das amostras codopadas são comparadas com a intensidade do mesmo pico em amostras unicamente dopadas com  $\text{Yb}^{3+}$  (Fig. 4.b), percebe-se que as intensidades evoluem mais rapidamente no primeiro caso do que no segundo, indicando de fato a transferência de energia para o  $\text{Yb}^{3+}$ .



**Figura 4** – (a) Espectro PAS das amostras codopadas com  $\text{Pr}^{3+}/\text{Yb}^{3+}$  e (b) comparação das intensidades de sinal fotoacústico em 970 nm para as amostras codopadas (esfera preta) e unicamente dopadas com  $\text{Yb}^{3+}$  (esfera azul) em diferentes concentrações.

## CONCLUSÕES

Em conclusão, a espectroscopia fotoacústica foi útil no estudo do aumento das relaxações multifônon com o aumento da concentração de  $\text{Yb}^{3+}$ , indicando tanto uma transferência cruzada ( $\text{Pr}^{3+} \rightarrow \text{Yb}^{3+}$ ) quanto uma transferência inversa ( $\text{Yb}^{3+} \rightarrow \text{Pr}^{3+}$ ) nas matrizes LSCAS. Esses resultados confirmam e complementam estudos previamente realizados com estes dopantes em conjunto. Estudos do tempo de vida de luminescência ainda precisam ser analisados a fim de confirmar os fenômenos de transferência e concluir a possível aplicação como modificadores espectrais.

## REFERÊNCIAS

- [1] D.L. Dexter, Phys. Rev. (1957) 630.
- [2] M. L. Baesso et al. J. Appl. Phys. (2022) 131.
- [3] L. J. Borrero-González et al. Journal of Luminescence (2014) 145.

## UMA NOVA ABORDAGEM NA INTERPRETAÇÃO DAS TEXTURAS LÍQUIDO CRISTALINAS COM O USO DA PLACA- $\lambda$

D. D. Lüders<sup>\*1</sup>, E. Akpınar<sup>2</sup>, M. L. G. Pereira<sup>1</sup> e N. G. C. Astrath<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, UEM – Maringá-PR, Brasil.

<sup>2</sup>Departamento de Química, Universidade Bolu Abant İzzet Baysal, Bolu, Turquia.

\*Corresponding author's email: [ddluders@uem.com](mailto:ddluders@uem.com)

**Palavras-chave:** Sinal óptico, fase nemática biaxial, fase colestérica biaxial.

Os cristais líquidos liotrópicos são substâncias formadas por micelas anisotrópicas. Suas unidades estruturais dependem fortemente da concentração e da temperatura, como resultado, a anisotropia óptica muda de isotrópico para uniaxial ou biaxial. A figura de indicatriz óptica é essencial para entender as diferentes mesofases, que, por sua vez, estão diretamente ligadas a organização micelar. Nesse sentido, no presente trabalho foi desenvolvido um algoritmo que realiza uma composição de várias imagens em uma única imagem denominada de imagem resultante. Tal algoritmo permite reconhecer as transições de fases nemática discótica ( $N_D$ ) – nemática biaxial ( $N_B$ ) e  $N_B$  – nemática calamítica ( $N_C$ ) quando aplicado na sequência de fase  $N_D$  –  $N_B$  –  $N_C$  orientada via campo magnético. Em adição, a orientação da indicatriz foi interpretada no presente ao longo da mencionada sequência de fase usando a placa- $\lambda$ , do microscópio óptico de luz polarizada, para modificar as cores de interferência das texturas exibidas pela amostra. As cores, as quais dependem da orientação da indicatriz, podem crescer ou decrescer na carta de cores de Michel-Lévy quando a placa- $\lambda$  é inserida no caminho óptico do microscópio. Ainda no presente, foi adotado a mesma metodologia para realizar o estudo de outra sequência de fase: colestérica discótica ( $Ch_D$ ) – colestérica biaxial ( $Ch_B$ ) e  $N_C^*$  [colestérica calamítica ( $Ch_C$ ) desenrolada pela presença do campo magnético]. Para ambas as sequências de fases o sinal de alongação e sinal óptico são apresentados do ponto de vista microscópico e macroscópico.

### INTRODUÇÃO

Os cristais líquidos liotrópicos são formados a partir de uma concentração denominada de concentração micelar crítica, e estes são provenientes da mistura de um surfactante constituído de moléculas anfifílicas em um solvente, como a água [1]. Acima da denominada concentração, as moléculas anfifílicas se aglomeram e dão origem as micelas, que são os menores constituintes que compõem o meio liotrópico. Dependendo da temperatura e concentração relativa dos constituintes da amostra as micelas podem apresentar uma simetria isotrópica, uniaxial ou biaxial.

Nas fases nemáticas uniaxiais calamítica (discótica) as micelas apresentam uma geometria com prolata (oblata), e sob ação do campo magnético ( $\vec{H}$ ) os seus eixos de simetria tendem a se alinhar em uma direção média paralela (perpendicularmente) à direção do campo aplicado. Desta forma, a fase nemática calamítica ( $N_C$ ) e nemática discótica ( $N_D$ ) são caracterizadas por apresentarem uma anisotropia de susceptibilidade diamagnética ( $\Delta\chi$ ) positiva e negativa, respectivamente. Em

contrapartida, a fase nemática biaxial ( $N_B$ ) é caracterizada por ter três eixos de simetria, uma geometria ortorrômbica e três eixos principais de susceptibilidade diamagnética,  $\chi_1 > \chi_2 > \chi_3$ , onde o eixo principal da micela associado com  $\chi_1$  alinha-se paralelo à  $\vec{H}$  [2,3].

As fases nemáticas  $N_D$ ,  $N_C$  e  $N_B$  podem dar origem as respectivas fases colestérica discótica ( $Ch_D$ ), colestérica calamítica ( $Ch_C$ ) e colestérica biaxial ( $Ch_B$ ) quando a amostra é dopada com um agente quiral a partir de uma determina concentração mínima [4, 5]. As moléculas quirais têm a ação de torcer os planos nemáticos em torno de um eixo de rotação. O referido eixo é denominado de eixo óptico e também de eixo do colestérico. Em adição, o passo do colestérico é definido como sendo a distância percorrida ao longo do eixo de torção para o qual os planos nemáticos observados sofram uma rotação de  $360^\circ$  em relação ao ponto de partida [5].

Em relação as propriedades ópticas, as fases nemáticas uniaxiais se caracterizam por apresentar dois índices de refração ( $n$ ) distintos, enquanto a fase  $N_B$  apresenta três índices de refração [6]. A partir dos índices é possível representar as fases isotrópica, uniaxiais e biaxiais a partir das figuras de indicatrizes óptica [7] por meio da equação,

$$\frac{x^2}{n_1^2} + \frac{y^2}{n_2^2} + \frac{z^2}{n_3^2} = 1, \quad (1)$$

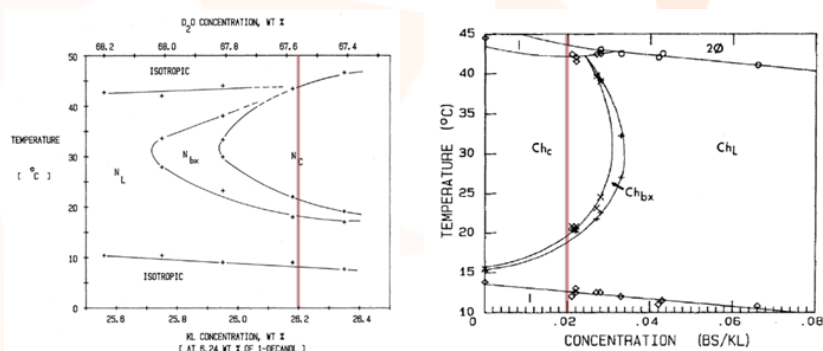
onde  $n_1$ ,  $n_2$  e  $n_3$  são os índices de refração associados aos eixos  $x$ ,  $y$  e  $z$ , respectivamente. O eixo óptico da fase uniaxial corresponde a direção normal à secção circular definida pela Equação (1), enquanto na fase biaxial são observadas duas secções circulares; portanto, dois eixos ópticos. Na referência [6] pode ser observada uma completa descrição da indicatriz ao longo da sequência de fase  $N_D$ - $N_B$ - $N_C$ .

Em geral, quando um meio anisotrópico é observado sob microscopia óptica de luz polarizada, este apresenta uma textura com cores de interferência que dependem da birrefringência óptica ( $\Delta n$ ) associada a secção da indicatriz paralela ao plano da platina do microscópio, e da espessura do material ( $d$ ). A carta de cores de Michel-Lévy é quem relaciona as cores de interferência observada com a retardação ( $R$ ) induzida pelo meio anisotrópico, a qual é descrita pela equação  $R = \Delta n d$  [7]. Uma forma de alterar a retardação, ou a cores de interferência por um valor pré-determinado é através do uso do acessório da placa- $\lambda$  presente no microscópio óptico de luz polarizada. Esse acessório permite determinar em algumas circunstâncias o sinal de alongação do cristal, o sinal óptico e quais são os raios rápido e lento da secção da indicatriz paralela ao plano da platina [7].

Diante do supracitado, o presente trabalho tem por objetivo utilizar a placa- $\lambda$  do microscópio óptico de luz polarizada para caracterizar as propriedades ópticas das fases nemáticas e colestéricas. Além disso, o desenvolvimento de um algoritmo para identificar a transição de fase  $N_B \rightarrow N_C$  a partir das texturas microscópicas.

## MATERIAIS E MÉTODOS

A mistura liotrópica nemática e liotrópica colestérica proveniente da mistura de laurato de potássio (KL), 1-decanol (DeOH), água deuterada ( $D_2O$ ) e sulfato de brucina (BS) foram investigadas preparando as amostras em duas linhas de dois diagramas de fases propostos por Saupe e colaboradores [2, 4] – Figuras 1(a) e 1(b).



**Figura 1** – Diagrama de fases da mistura (a) KL, DeOH e D<sub>2</sub>O e (b) KL, DeOH, D<sub>2</sub>O e BS. A linha em vermelho foi adaptada [2, 4], e a mesma indica a concentração em que as amostras foram preparadas.

Os constituintes que compõe as amostras liotrópicas foram pesados em balança Mettler Toledo modelo AT201, com precisão de 0,01 mg, em tubos de ensaios previamente limpos. Após a pesagem, os tubos foram selados com *parafilm* e as amostras foram homogeneizadas através de processos repetitivos de agitação e centrifugação. Após esse processo, a mesma foi deixada em repouso por pelo menos um dia antes de ser analisada.

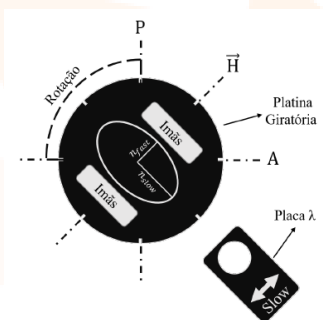
#### Microscopia óptica de luz polarizada

Para identificar as sequências de fase apresentadas pelas amostras em função da temperatura, as mesmas foram confinadas em capilares planos de 300  $\mu\text{m}$  e selados com *parafilm*, na sequência, eles foram introduzidos no *hot-stage* (câmara de aquecimento/resfriamento) que estava acoplado sob a platina do microscópio óptico de luz polarizada.

Para o estudo da sequência de fase nemática ( $N_D - N_B - N_C$ ) e colestérica ( $Ch_D - Ch_B - N_C^*$ ) as amostras foram orientadas em presença de campo magnético ( $\vec{H}$ ) através de ímãs neodímio. O referido estudo foi realizado em função da temperatura e, a cada temperatura, obteve-se três fotos nas seguintes configurações experimentais:

- i  $\rightarrow \vec{H}$  alinhado na direção NE-SO, sem a inserção da placa- $\lambda$ ;
- ii  $\rightarrow \vec{H}$  alinhado na direção NE-SO, com a inserção da placa- $\lambda$ ;
- iii  $\rightarrow \vec{H}$  alinhado na direção NO-SE, com a inserção da placa- $\lambda$ .

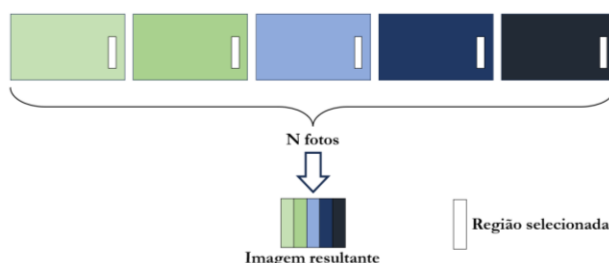
Sob as configurações acima, as secções elípticas das indicatrizes das mesofases nemática e colestérica apresentam um de seus eixos principais alinhados paralelamente com o campo magnético e, conseqüentemente, paralelo ao raio lento (*slow*) da placa- $\lambda$  do microscópio, conforme ilustra a Figura 2. Sob essa condição, as cores de interferência crescem (decrecem) na carta de cores de Michel-Lévy quando o raio lento (rápido) de vibração do meio está paralelo com o raio lento de vibração da placa- $\lambda$  [7]. Em resumo, lento + lento  $\rightarrow$  cresce e rápido + lento  $\rightarrow$  decresce.



**Figura 2** – Configuração do microscópio: P é o polarizador, A o analisador e  $\vec{H}$  o campo magnético. A amostra está alinhada de modo que a seção elíptica da indicatriz (paralela ao plano da platina) tem um dos eixos principais ( $n_{fast}$  ou  $n_{slow}$ , com  $n_{fast} < n_{slow}$ ) sempre paralelo ao raio lento do acessório da placa- $\lambda$ .

### Algoritmo de composição de imagens

O processo de investigação e caracterização de uma sequência de fase por microscopia óptica de luz polarizada consiste em submeter a amostra a uma taxa de aquecimento ou resfriamento em função do tempo. Neste processo de varredura térmica, utilizamos uma câmera digital acoplada ao microscópio óptico para capturar uma série de imagens (texturas) para posterior análise. Em razão da quantidade de imagens, foi desenvolvido através do programa *Wolfram Mathematica* um algoritmo que recorta a sequência de imagens obtida no processo de varredura em um tamanho específico e, em uma posição pré-definida pelo operador. Na sequência, uma imagem resultante é obtida fazendo o “empilhamento” lado a lado dos recortes das imagens seguindo a mesma ordem da sequência das imagens recortadas. A Figura 3 exemplifica qualitativamente o funcionamento do algoritmo.

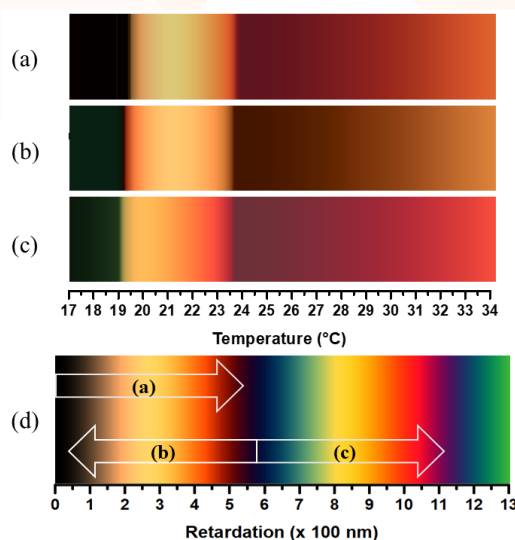


**Figura 3** – Ilustração do processo de execução do algoritmo no recorte de imagens e composição da imagem resultante com o número de fotos  $N=5$ .

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

A Figura 4(a) mostra a imagem resultante da sequência de fase  $N_D \rightarrow N_B \rightarrow N_C$ , a qual foi obtida em um ciclo de aquecimento a partir da fase  $N_D$  previamente orientada por campo magnético. Esta imagem é uma composição de 1875 fotografias “empilhadas” da esquerda para a direita. Em adição a Figura 4(a), nota-se ainda duas “linhas” verticais bem definidas que reflete uma mudança significativa na birrefringência, ou de maneira análoga na retardação, nas transições de fases. A primeira linha refere-se à transição  $N_D \rightarrow N_B$ , enquanto a segunda a transição  $N_B \rightarrow N_C$ . Essa mudança significativa observada nas cores de interferência está de acordo com os resultados de birrefringência óptica reportado na literatura [8]. Na sequência foi realizada a mesma varredura com a inserção da placa- $\lambda$  no caminho óptico do microscópio, Figura 4(b). Note que nesta situação ouve um decréscimo na retardação. Na Figura 4(c), a varredura foi repetida, porém a amostra foi rotacionada em  $90^\circ$  em

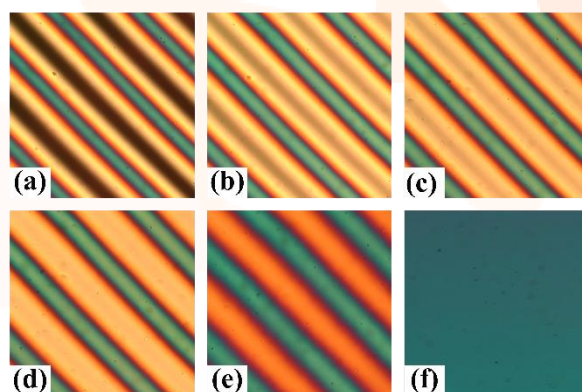
relação a Figura 4(b). Nesta configuração, observa-se um acréscimo nas cores de interferência. As mudanças nas cores de interferência observadas estão sintetizadas na Figura 4(d) com três flechas sobre a carta de cores de Michel-Lévy. O início da flecha corresponde a fase  $N_D$  e a ponta da flecha simboliza a retardação na fase  $N_C$  logo acima da transição de fase  $N_B \rightarrow N_C$ .



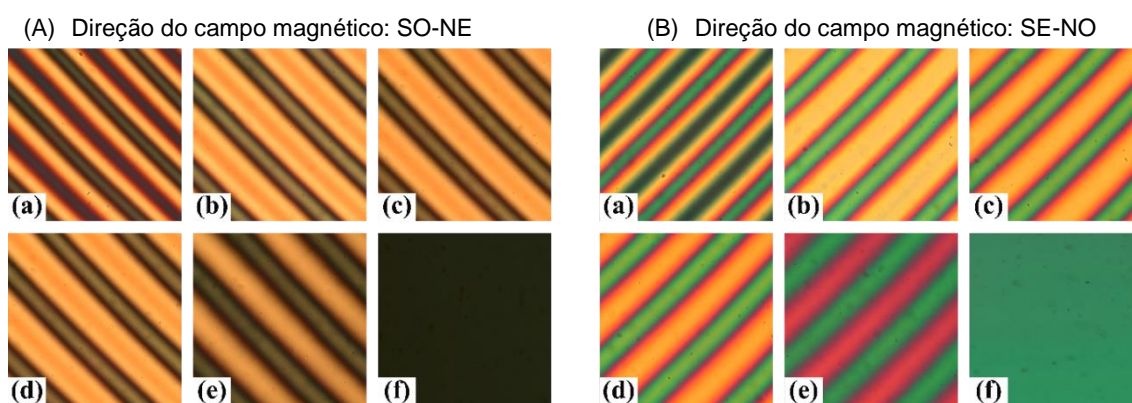
**Figura 4** – Em (a)–(c) são mostradas três imagens resultantes obtidas para a sequência de fase  $N_D$ - $N_B$ - $N_C$  orientada na presença de campo magnético. A espessura da amostra utilizada foi de 300  $\mu\text{m}$ . Para (a),  $\vec{H}$  está ao longo da direção NE-SO, e sem a inserção da placa- $\lambda$ ; em (b) e (c), a placa- $\lambda$  está inserida, e  $\vec{H}$  está ao longo da direção SO-NE e SE-NO, respectivamente. Em (d), a carta de Michel-Lévy está apresentada incluindo três flechas onde cada uma mostra a mudança em R em função da temperatura, as quais partem da fase  $N_D$  e termina na fase  $N_C$  logo após a transição de fase  $N_B$ - $N_C$  para (a), (b), e (c).

Partindo dos resultados acima e levando em conta as medidas de birrefringência óptica [8] e dos índices de refração [9], conclui-se que é impossível determinar o sinal óptico das fases  $N_D$  e  $N_B$ . Na fase  $N_D$ , a impossibilidade remete ao fato do eixo óptico estar normal à platina do microscópio, e na fase  $N_B$  os dois eixos ópticos estão contidos em um plano também normal a platina. Nesses casos, não tem como determinar com placa- $\lambda$  se o eixo óptico está associado ao raio lento ou rápido. Para fase  $N_C$ , o eixo óptico está paralelo ao campo  $\vec{H}$ , desta forma, dentro do arranjo experimental conclui-se que a direção do eixo óptico corresponde a direção do raio rápido, menor índice de refração, pois conforme mostrado na Figura 4(b) houve um decréscimo com a inserção da placa- $\lambda$ .

Após a caracterização da sequência de fase  $N_D$ - $N_B$ - $N_C$ , deu-se início ao estudo da mesma sequência de fase colesterizada pelo agente quiral sulfato de brucina (BS). A Figura 5 mostra a sequência de fase  $Ch_D$ - $Ch_B$ - $N_C^*$  obtida em função do incremento da temperatura. O padrão das listras corresponde as fases da mencionada sequência conforme já foi reportado na literatura [5]. Na Figura 6(A) é apresentada a mesma sequência de fase da Figura 5, porém com a inserção da placa- $\lambda$ . Note que ao inserir a placa houve uma redução nas cores de interferência ou de retardação para toda a sequência. Girando agora a amostra em  $90^\circ$  e mantendo o placa- $\lambda$  inserida, verifica-se na Figura 6(B) um aumento nas cores de interferência.



**Figura 5** – Textura das fases colestérica: (a)  $Ch_D$  (15.0°C); (b)  $Ch_B$  próximo da fase  $Ch_D$  (18.8°C); (c)  $Ch_B$  (19.6°C); (d)  $Ch_B$  (20.6°C); (e)  $Ch_B$  próximo da fase  $N_C^*$  (21.2°C) e (f)  $N_C^* \equiv Ch_C$  desenrolado pela presença do campo magnético (21.6°C). A espessura da amostra é de 300 $\mu$ m, e o campo magnético está ao longo da direção SO-NE.



**Figura 6** – A sequência de fase colestérica da Figura 5 é representada com a inserção da placa- $\lambda$  no caminho óptico do microscópio. O campo magnético aplicado está ao longo das direções (A) SO-NE e (B) SE-NO.

Através da literatura [10], sabe-se que macroscopicamente a fase colestérica apresenta um único eixo óptico na direção do eixo de torção, *i.e.*, perpendicular as listras. Sob esse aspecto, e levando em conta que a retardação diminuiu quando a placa- $\lambda$  foi inserida na Figura 5, conclui-se que na direção do eixo óptico tem-se o raio rápido, menor índice de refração, e perpendicular a este o raio lento, maior índice de refração. Desta forma, a sequência como um todo tem apenas um único sinal óptico negativo. Este fato está em desacordo com a literatura [11]. Em relação a orientação da indicatriz dos planos nemáticos da fase  $Ch_D$  e  $Ch_B$ , constata-se que a micela com geometria discótica é torcida em uma direção transversal ao eixo de simetria da micela, enquanto que a micela com geometria biaxial é torcida em torno do seu eixo de maior susceptibilidade magnética.

## CONCLUSÕES

O algoritmo desenvolvido, que converte inúmeras imagens em uma única imagem resultante, mostrou-se ser uma técnica auxiliar na identificação da transição de fase  $N_B \rightarrow N_C$  através da técnica de microscopia óptica de luz polarizada.

Utilizando o acessório da placa- $\lambda$  do microscópio concluímos que:



- i → A indicatriz óptica na fase  $N_B$  tem uma única orientação em todo o seu intervalo de temperatura. Em adição, dentro do arranjo experimental utilizado foi impossível identificar e caracterizar a transição de sinal óptico – positivo ↔ negativo – que acontece na fase nemática biaxial.
- ii → As orientações da indicatrizes ao longo dos planos nemáticos torcidos, que definem as mesofases colestericas discótica e biaxial, foram caracterizadas.
- iii → As fases  $Ch_D$ ,  $Ch_B$  e  $N_C^*$  têm um sinal óptico negativo e, conseqüentemente, não há mudança de sinal óptico nas transições de fases  $Ch_D \rightarrow Ch_B$  e  $Ch_B \rightarrow N_C^*$ .

## REFERÊNCIAS

- [1] A. M. Figueiredo Neto and S. R. A. Salinas. *The Physics of Lyotropic Liquid Crystals*. New York: Oxford University Press, 2005.
- [2] L. J. Yu and A. Saupe. Observation of a biaxial nematic phase in potassium laurate – 1-decanol – water mixtures. *Phys. Rev. Lett.*, 45(12):1000 – 1003, 1980.
- [3] A. M. Figueiredo Neto and Y. Galerne. In *Biaxial Nematic Liquid Crystals: Theory, Simulation and Experiment*. John Wiley & Sons, 2015.
- [4] G. Melnik and A. Saupe. Microscopic textures of micellar cholesteric liquid crystals. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 145(1):95 – 110, 1987.
- [5] E. Akpınar, D. Reis, and A. M. Figueiredo Neto. Study of the Cholesteric-to-Cholesteric Phase Transitions on the Lyotropic Mixture of KL/K<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>/1-Undecanol/Water/Brucine Presenting the Cholesteric Biaxial Phase. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, 576(1):98 – 105, 2013.
- [6] D. D. Lüders, E. Akpınar, and N. M. Kimura. A new interpretation of the optical interference figures observed in a lyotropic biaxial nematic phase for a ternary mixture of DTMABr, 1-DDeOH and H<sub>2</sub>O. *Journal of Molecular Liquids*, 366:120108, 2022.
- [7] E. E. Wahlstrom. *Optical crystallography*. London:Wiley, 4th edition, 1969.
- [8] Y. Galerne and J. P. Marcerou. Temperature Behavior of the Order-Parameter Invariants in the Uniaxial and Biaxial Nematic Phases of a Lyotropic Liquid Crystal. *Phys. Rev. Lett.*, 55(23): 2109 – 2112, 1983.
- [9] P. A. Santoro, A. R. Sampaio, H. L. F. da Luz, and A. J. Palangana. Temperature dependence of refractive indices near uniaxial-biaxial nematic phase transition. *Physics Letters A*, 353(6):512 – 515, 2006.
- [10] H. R. Brand and H. Pleiner. Cholesteric to cholesteric phase transitions in liquid crystals. *Journal de Physique Letters*, Edp sciences, 46(15):711-718, 1985.
- [11] W. S. Braga, O. R. Santos, N. M. Kimura, M. Simões, and A. J. Palangana. Optical signals of uniaxial and biaxial cholesteric lyotropic phases. *Journal of Molecular Liquids*, 354:118894, 2022.

PÓS-GRADUAÇÃO  
**FÍSIC**  **25** anos  
UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ

**PFI/UEM – 25 anos de contribuição para a ciência**

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ

**AGRADECE:**





ISBN: 978-65-272-0152-6



9 786527 201526