

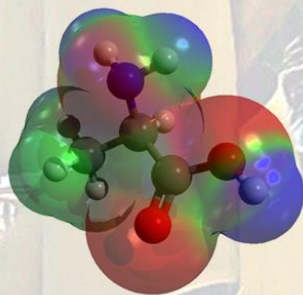
FME

XI Workshop em Física Molecular e Espectroscopia

Universidade Estadual de Feira de Santana

Feira de Santana - 08 a 11 de dezembro de 2013

Livro de Resumos



Editores:

Ana Carla P. Bitencourt

Angelo Marconi Maniero

Frederico V. Prudente

Mirco Ragni

XI Workshop em Física Molecular e Espectroscopia
08 a 11 de dezembro de 2013
Feira de Santana – BA

Prefácio

O Comitê Organizador gostaria de dar as boas vindas a todos os participantes do XI Workshop em Física Molecular e Espectroscopia, e ressaltar que foi uma grande satisfação realizar esta edição do evento. Uma intensa atividade científica está programada para os três dias de encontro.

Finalmente chegou o momento esperado de encontrar os colegas para discussões francas, acirradas e fraternas do progresso científico ocorrido desde o último encontro. O interesse com o desenvolvimento da Física Molecular e Espectroscopia nos une desde a primeira edição do WFME em 2003.

Organizar um evento do porte do WFME não é uma tarefa simples, e não seria possível sem ajuda. Cabe aqui então o meu agradecimento aos membros do Comitê Nacional, pela sua ajuda na escolha dos palestrantes e dos trabalhos para comunicação oral, e por sua participação como chair das sessões orais e de painéis. Agradeço também aos meus colegas membros do Comitê Local pela inestimável ajuda e, principalmente, pela enorme paciência que tiveram em trabalhar junto comigo.

Nesta ocasião estamos reunindo cerca de 130 participantes dos mais variados centros de pesquisas de todo o País. Este Workshop terá 10 palestras convidadas, 17 comunicações orais e 56 apresentações de painéis.

Esta edição é uma promoção conjunta da UEFS, através do Departamento de Física e da Pós-Graduação em Astrofísica, e da UFBA, através da Pós-Graduação em Física do Instituto de Física. Além destes, de forma direta ou indireta, várias Universidades contribuíram para o sucesso deste encontro científico, entre elas, deve-se destacar a UEFS, que forneceu o espaço físico, os livros de resumos, certificados, banners, dentre outras coisas. Agradecemos à CAPES, pelo apoio financeiro recebido, fundamental para a realização do evento; à FAPEMIG, pelo apoio para os participantes de Minas Gerais; à Thorlabs pelo apoio financeiro; e à BRUKER e à QuantumTech pela doação de blocos e caneta.

Então, desejamos a todos um proveitoso Workshop em Física Molecular e Espectroscopia.

Feira de Santana, 08 de dezembro de 2013

Prof^ª. Ana Carla Peixoto Bitencourt
Coordenadora do XI WFME

Comitê Nacional

Profa. Ana Carla Peixoto Bitencourt	Coordenadora - UEFS
Prof. Carlos Eduardo Fellows	UFF
Prof. Francisco Elias Jorge	UEFS
Prof. Frederico Vasconcellos Prudente	UFBA
Prof. Jayr de Amorim Filho	ITA/CNPEM
Prof. José David Manguiera Vianna	UnB/UFBA
Prof. Márcio Henrique Franco Bettega	UFPR
Profa. Maria Cristina Andreolli Lopes	UFJF
Prof. Ricardo Antonio de Simone Zanon	UDESC
Prof. Ricardo Luiz Longo	UFPE

Comitê Local

Prof. Angelo Marconi Maniero	UFBA
Prof. Antônio Delson Conceição	UEFS
Prof. Carlos Alberto Ribeiro	UEFS
Prof. Frederico Vasconcellos Prudente	UFBA
Prof. Marcilio Nunes Guimarães	UFRB
Prof. Mirco Ragni	UEFS

Programação

Dia 08/12/2013 - Domingo

17:00 – 19:00	Credenciamento
18:00 – 19:00	Abertura
19:00 – 20:00	Confraternização

Dia 09/12/2013 - Segunda-feira — Manhã

08:30 – 09:10	PC01	Evidência Experimental de Átomos Gêmeos H(2^2S) Metaestáveis a partir da Dissociação do H ₂ Frio Induzida por Elétrons Nelson Velho de Castro Faria – IF - UFRJ
09:15 – 10:00	PC02	Arquitetura Molecular de Complexos de Lantanídeos: previsão teórica e comprovação experimental Alfredo Mayall Simas – DQF - UFPE
10:00 – 10:30		Coffee Break
10:30 – 11:15	PC03	Vibrationally and rotationally nonadiabatic calculations on H ₃ ⁺ using coordinate-dependent vibrational and rotational masses Alexander Alijah – Université de Reims, França
11:15 – 11:35	CO01	Potenciais modelo para estudos da interação de pósitrons com átomos e moléculas Luis Argel Poveda Calvino – DF - UFMG
11:35 – 11:55	CO02	Non-local phases in Casimir atom interferometry François Impens – IF - UFRJ
11:55 – 12:15	CO03	Estudo de Potenciais-Modelo na Descrição de Sistemas Endohedrais: A@Cn Leandro Cerqueira Santos – CETENS - UFRB / IF - UFBA
12:15 – 12:35	CO04	Dupla fotoionização da camada de valência do CH ₂ Cl ₂ Katianne Alcantara – UFRJ
12:35 – 14:05		Almoço

Dia 09/12/2013 - Segunda-feira — Tarde

14:05 – 14:50	PC04	Slow ground state molecules from matrix isolation sublimation Claudio Lenz Cesar – IF - UFRJ
14:50 – 15:10	CO05	Ionização e dissociação de azabenzenos de interesse biológico por impacto de prótons e elétrons Wania Wolff – IF - UFRJ
15:10 – 15:30	CO06	Coltrims: An introduction to modern 3D-momentum spectroscopy Achim Czasch
15:30 – 15:50	CO07	Present Status and Future of Experimental Stations for Atomic and Molecular Spectroscopy at LNLS/SIRIUS Paulo de Tarso Fonseca – LNLS

15:50 – 17:40

Coffee Break
Sessão de painéis ímpares – LABOFIS

17:40 – 19:00

Sessão de discussão
Linhas EUV / LNLS – Sirius
Coordenador: Douglas Galante – LNLS

Dia 10/12/2013 - Terça-feira — Manhã

08:30 – 09:15	PC05	O Papel da Espectroscopia na Astronomia Paulo César da Rocha Poppe – DFIS - UEFS
09:15 – 10:00	PC06	Light scattering from ordered and disordered atomic clouds Philippe Wilhem Courteille – IF - USP
10:00 – 10:30		Coffee Break
10:30 – 11:15	PC07	Low energy electron scattering data for chemical plasma treatment of biomass Marco Aurélio Pinheiro Lima – IF - UNICAMP
11:15 – 11:35	CO08	In Vivo Analysis of Glyphosate's Effects on Glyphosate-Tolerant Soybean Plants By Using Chlorophyll a Fluorescence Anderson Rodrigues Lima Caires – UFGD
11:35 – 11:55	CO09	Espalhamento de pósitrons de baixa energia por NH ₃ Wagner Tenfen – UFFS
11:55 – 12:15	CO10	Uma diferente descrição da interação entre o íon Eu ³⁺ e seus primeiros vizinhos Yuri Alisson Rodrigues Oliveira – DF - UFS
12:15 – 12:35	CO11	Fragmentation and ionic desorption from condensed pyrimidine due to electron impact: relevance to solid state astrochemistry Fabio de Almeida Ribeiro – IQ - UFRJ
12:35 – 14:05		Almoço

Dia 10/12/2013 - Terça-feira — Tarde

14:05 – 14:50	PC04	Pentes de Frequência: de Metrologia à Espectroscopia de Alta Resolução Marcio H. G. de Miranda – DF - UFPE
14:50 – 15:10	CO12	Estrutura eletrônica do complexo <i>fac</i> -[ClRe(CO) ₃ (bipy)], empregando abordagens da Teoria do Funcional de Densidade Diesley Martins da Silva Araújo – IQ - UFU
15:10 – 15:30	CO13	Estudo comparativo da fragmentação por fótons de moléculas isoeletrônicas de interesse biológico Manuela Souza Arruda – CETEC - UFRB / IF - UFBA
15:30 – 15:50	CO14	Cross sections for electron scattering from zwitterionic glycine: incorporating solvents effects Josué Silva dos Santos – UFABC

15:50 – 17:40

Coffee Break
Sessão de painéis pares – LABOFIS

Colóquio

17:40 – 19:00	A molécula de N_2O^+ através de Espectroscopia de Fourier em alta resolução Carlos Eduardo Fellows – IF - UFF
---------------	---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

Dia 11/12/2013 - Quarta-feira — Manhã

08:30 – 09:15	PC09	Ionização de moléculas por feixes de femtosegundo e fótons Antonio Carlos Fontes dos Santos – IF - UFRJ
09:15 – 10:00	PC10	Explorando estados eletrônicos excitados de sistemas diatômicos Fernando Rei Ornellas – IQ - USP
10:00 – 10:30		Coffee Break
10:30 – 10:50	CO15	Microespectroscopia de FTIR como ferramenta de análise patológica de lesões cancerosas e inflamatórias Fabício Augusto de Lima – USP
10:50 – 11:10	CO16	Cálculo bidimensional dos níveis de energia da molécula de amônia usando coordenadas hipersféricas e representações adiabáticas e diabáticas Wanderson S. Jesus – IF - UFBA
11:10 – 11:30	CO17	Brazilian effective impact factor of physics journals: The third side of the coin José Rachid Mohallem – DF - UFMG
11:30 – 12:35		Síntese e Encerramento Coordenador: Carlos Eduardo Fellows – IF - UFF
12:35 – 14:00		Almoço

ÍNDICE

Palestras Convidadas – 09/12/2013

- 08:30 – PC01 – *Evidência Experimental de Átomos Gêmeos H(2²S) Metaestáveis a partir da Dissociação do H₂ Frio Induzida por Elétrons*
J. Robert, F. Zappa, C. R. de Carvalho, Ginette Jalbert, R. F. Nascimento, A. Trimeche, O. Dulieu, Aline Medina, Carla Carvalho, N.V. de Castro Faria 1
- 09:15 – PC02 – *Arquitetura Molecular de Complexos de Lantanídeos: previsão teórica e comprovação experimental*
Alfredo Mayall Simas 2
- 10:30 – PC03 – *Vibrationally and rotationally nonadiabatic calculations on H₃⁺ using coordinate-dependent vibrational and rotational masses*
Alexander Alijah 3

Comunicações Orais – 09/12/2013

- 11:15 – CO01 – *Potenciais modelo para estudos da interação de pósitrons com átomos e moléculas*
Luis A. Poveda, José R. Mohallem 4
- 11:35 – CO02 – *Non-local phases in Casimir atom interferometry*
François Impens, Claudio Ccapa Ttira, Ryan O. Behunin, Paulo A. Maia Neto 5
- 11:55 – CO03 – *Estudo de Potenciais-Modelo na Descrição de Sistemas Endohedrais: A@Cn.*
Leandro Cerqueira Santos, M. Graças R. Martins, R. Rivelino Moreno, J. David M. Vianna 6
- 12:15 – CO04 – *Dupla fotoionização da camada de valência do CH₂Cl₂*
K. F. Alcantara, A. H. A. Gomes, W. Wolff, L. Sigaud, A. C. F. Santos 7

Palestra Convidada – 09/12/2013

- 14:05 – PC04 – *Slow ground state molecules from matrix isolation sublimation*
A. N. Oliveira, R. L. Sacramento, B. X. Alves, H. B. Rocha, W. Wolff, M. S. Li, C. L. Cesar 8

Comunicações Orais – 09/12/2013

- 14:50 – CO05 – *Ionização e dissociação de azabenzenos de interesse biológico por impacto de prótons e elétrons*
W. Wolff, H. Luna, L. Sigaud, A. C. Tavares, E. C. Montenegro 9
- 15:10 – CO06 – *Coltrims: An introduction to modern 3D-momentum spectroscopy*
A. Czasch, O. Jagutzki, T. Jahnke, R. Dörner, H. Schmidt-Böcking 10
- 15:30 – CO07 – *Present Status and Future of Experimental Stations for Atomic and Molecular Spectroscopy at LNLS / SIRIUS*
P. T. Fonseca, D. Galante, J. C. Cezar, H. R. Moraes, L. Souza, G. L. P. M. Rodrigues, D. S. Chaves, C. Ambrósio, J. B. Marques, W. R. Araújo 11

Sessão de Painéis Ímpares – 09/12/2013

P001	<i>Construção de laser de diodo com cavidade estendida</i> A. N. Oliveira, R. L. Sacramento, B. X. Alves, H. B. Rocha, W. Wolff, M. S. Li, C. L. Cesar	12
P003	<i>Espectrômetro de Perda de Energia de elétrons de Baixíssimas Energias e Alta Resolução</i> R. F. C. Neves, H. V. Duque, R. R. Santos, M. C. A. Lopes	13
P005	<i>Sobre um estudo da entropia de Shannon em sistemas atômicos confinados de um e dois elétrons</i> Wallas Santos Nascimento, Frederico Vasconcellos Prudente	14
P007	<i>Perda e Captura de O^+ e O^{2+} em CF_2Cl_2</i> A. H. A. Gomes, K. F. Alcantara, A. C. F. Santos	15
P009	<i>All-electron double zeta basis sets for the most fifth-row atoms: Application in DFT spectroscopic constant calculations</i> F. E. Jorge, A. Canal Neto	16
P011	<i>Estudos de reações induzidas por prótons energéticos sobre a prolina, ácido ascórbico e a sua mistura na região do infravermelho</i> Tiago Silveira, Luiz Mendes, Ricardo Marinho, Enio Frota, Cássia Ponciano	17
P013	<i>Estudo do espectro eletrônico do $[Cr(CN)_6]^{3-}$ por TD-DFT</i> Helen G. C. de Meneses, André L. B. Formiga	18
P015	<i>Seções de Choque Totais do Espalhamento de Elétrons de Baixas Energias por Moléculas</i> Maria Cristina A. Lopes, Daniel G. M. da Silva	19
P017	<i>Curvas de energia potencial do íon hidreto de berílio BeH^+ e de seus isotômeros</i> Felipe Oliveira Ventura, Cristina Porto Gonçalves	20
P019	<i>Estudo e desenvolvimento instrumental de um analisador de energia de elétrons-íons e identificação de íons</i> Lucas Simoes Santos, César A. Oliveira Malta, Eduardo Moreira Damasceno, Beliato Santana Campos, Luiz Mendes	21
P021	<i>Um estudo da correlação eletrônica de sistemas confinados usando a teoria do funcional da densidade</i> João Cláudio C. Pereira, M. Graças R. Martins, J. David M. Vianna	22
P023	<i>DFT vibrationally averaged isotopic dipole moments of propane, propyne and water isotopologues</i> A. F. C. Arapicara, J. R. Mohallem	23
P025	<i>Avaliação teórica da transferência de carga fotoinduzida em um complexo envolvendo uma ftalocianina de Ru (II) ligada à forma anatase do TiO_2</i> D. M. S. Araújo, W. R. Gomes, A. E. H. Machado	24
P027	<i>Cálculo da concentração dos componentes atmosféricos a partir do modelo de transmissão SPCTRAL2</i> Rafaela Teixeira Alves, Germano Pinto Guedes	25
P029	<i>Análise da Utilização de filtros de alumínio na técnica de edxrf para amostras biológicas</i> Priscila Resmer, André Luiz Coelho Conceição, Sergei Anatolyevich Paschuk, Valeriy Denyak	26
P031	<i>Estudo de Estados Ressonantes em acoplamentos não-adiabáticos usando a abordagem hidrodinâmica da Mecânica Quântica</i> Wanisson Silva Santana, Frederico Vasconcellos Prudente, Mirco Ragni	27
P033	<i>Ligação de um pósitron com átomos e moléculas apolares: Uma convergência entre teoria e experimento</i> Paulo H. R. Amaral, José R. Mohallem	28
P035	<i>Magnetic Properties of Manganese (II) a structure derived from 2,6-dichlorobenzoic acid</i> Clebson dos Santos Cruz, Mario Reis, Diogo Esteves, Paula Brandão, Sandra S. Pedro, Julio Cesar G. Tedesco ..	29
P037	<i>Implantação de um Feixe de Pósitrons na UFJF</i> Adriana N. de Souza, Maria Cristina A. Lopes	30
P039	<i>Alterações na Intensidade de Fluorescência de Plantas de Soja Tratadas com Nanopartículas de Prata</i> William F. Falco, Joelson Fernandes, Bruno C. A. Pontim, Anderson R. L. Caires	31

P041	<i>Propriedades Estruturais e Eletrônicas de Nanotubos B_xC_yN_z: Um Estudo por Primeiros Princípios</i> Rebeca Dourado, Sérgio Azevedo	32
P043	<i>Caracterização do estado fundamental da dimethoxy curcumin. Um estudo com campo de reação auto consistente</i> Ramos, Tárcius; Canuto, Sylvio	33
P045	<i>Estudo conformacional da amilopectina no vácuo e com efeito de solvente implícito</i> Daiani C. Leite, Paulo F. B. Gonçalves, Nadya P. da Silveira	34
P047	<i>Avaliação dos sítios de coordenação e das frequências vibracionais da amilopectina</i> Daiani C. Leite, Paulo F. B. Gonçalves, Nadya P. da Silveira	35
P049	<i>Dinâmica de Campos Térmicos e Sistemas Atômicos e Moleculares II: sobre uma generalização do Teorema de Gell-Mann e Low</i> Caio Guimarães Ressureição, Maria das Graças R. Martins, José David M. Vianna	36
P051	<i>Basis set with core-valence relativistic correction for elements of the third row (K-Kr). Applications in calculations of molecular properties.</i> D. E. Vargas, G. K. S. Brito, P. J. P. de Oliveira	37
P053	<i>Electronic circular dichroism of chiral alkenes: B3LYP and CAM-B3LYP calculations</i> R. N. Suave; F. E. Jorge; Sara S. Jorge	38
P055	<i>Cálculos MRHFCI para os sistemas Be e LiH utilizando as bases double-zeta padrão e novas bases double-zeta obtidas através do método HF^{Gauss}-GSA</i> Micael Dias de Andrade, Antonio Moreira de Cerqueira Sobrinho, Marco Antônio Chaer Nascimento, Luiz Augusto Carvalho Malbouisson	39

Palestras Convidadas – 10/12/2013

08:30	– PC05 – <i>O Papel da Espectroscopia na Astronomia</i> Paulo César da Rocha Poppe	40
09:15	– PC06 – <i>Light scattering from ordered and disordered atomic clouds</i> Ph. W. Courteille	41
10:30	– PC07 – <i>Low energy electron scattering data for chemical plasma treatment of biomass</i> Marco A. P. Lima, E. M. de Oliveira, R. F. da Costa, S. d'A Sanchez, M. H. F. Bettega, M. T. do N. Varella	42

Comunicações Orais – 10/12/2013

11:15	– CO08 – <i>In Vivo Analysis of Glyphosate's Effects on Glyphosate-Tolerant Soybean Plants By Using Chlorophyll a Fluorescence</i> Anderson R. L. Caires, Joelson Fernandes, William F. Falco, Samuel L. Oliveira	43
11:35	– CO09 – <i>Espalhamento de pósitrons de baixa energia por NH₃</i> Wagner Tenfen, Leidi Katia Giehl	44
11:55	– CO10 – <i>Uma diferente descrição da interação entre o íon Eu³⁺ e seus primeiros vizinhos.</i> Yuri A. R. Oliveira, Heveson L. L. Matos, Adelmo S. Souza, Marcos A. Couto dos Santos	45
12:15	– CO11 – <i>Fragmentation and ionic desorption from condensed pyrimidine due to electron impact: relevance to solid state astrochemistry</i> Fabio de Almeida Ribeiro, Guilherme Camelier Almeida, Wania Wolff, Heloisa Boechat-Roberty, Maria Luiza Rocco	46

Palestra Convidada – 10/12/2013

14:05	– PC08 – <i>Pentes de Frequência: de Metrologia à Espectroscopia de Alta Resolução</i> Marcio H. Gonçalves de Miranda	47
-------	--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	----

Comunicações Orais – 10/12/2013

- 14:50 – CO12 – *Estrutura eletrônica do complexo fac-[ClRe(CO)₃(bipy)], empregando abordagens da Teoria do Funcional de Densidade*
A. E. H. Machado, D. M. S. Araújo, A. O. Toledo Patrocínio 48
- 15:10 – CO13 – *Estudo comparativo da fragmentação por fótons de moléculas isoeletrônicas de interesse biológico*
Manuela Souza Arruda, Luiz Antonio Vieira Mendes, Aline Medina, Josenilton do Nascimento de Souza, Ricardo dos Reis Teixeira Marinho, Frederico Vasconcellos Prudente 49
- 15:30 – CO14 – *Cross sections for electron scattering from zwitterionic glycine: incorporating solvents effects*
Josué S. dos Santos, Márcio T. do N. Varella 50

Sessão de Painéis Pares – 10/12/2013

- P002 *Reaction Rate for CO+CO → CO₂ + C*
Patricia R. P. Barreto, Ana Claudia P. S. Cruz, Henrique O. Euclides 51
- P004 *Estudo da dinâmica de absorção no espalhamento de partículas por barreiras de potencial: Tratamentos dependente e independente do tempo.*
G. L. Zanin, F. Arretche 52
- P006 *Difusão de Pósitrons de Baixa Energia em Gás Hélio Via Caminhadas Aleatórias.*
E. P. Seidel, R. A. S. Zanon, F. Arretche 53
- P008 *Ionização e Fragmentação do CH₃CHO por Fótons, Prótons e Íons*
I. Prazeres, A. C. F. Santos, M. Arruda, F. V. Prudente, N. V. de Castro Faria, A. Medina 54
- P010 *A eletroinstabilidade da Guanina*
Lucas Medeiros Cornetta, Márcio Teixeira do Nascimento Varella 55
- P012 *A Influência do processo de desorção atômica na dinâmica de carga de um MOT de Rb*
I. M. Campestrini F. Arretche, A. L. Oliveira, R. A. S. Zanon 56
- P014 *Estudo dos canais de decaimento de estados excitados de valência em moléculas de dimetilsulfeto (DMS)*
R. Tiedt, L. S. Farenzena, M. T. Lee, I. Iga, M. G. P. Homem 57
- P016 *Elastic electron scattering from ethyl acetate*
G. H. Davanzo, R. T. Sugohara, M. G. P. Homem, I. Iga 58
- P018 *Determinação quantitativa de substâncias de interesse biológico, em solução aquosa, através da Espectroscopia Raman*
Elderlei de Jesus Pita Souza, Elias Ramos de Souza, Paulo Fernando de Almeida, Denis Gilbert Francis David . 59
- P020 *Desenvolvimento de sistemas luminescentes contendo íons Tb³⁺*
Thaís Meira Menezes, Maryene Alves Camargo, Jorge Luiz Neves 60
- P022 *Estudo da Influência da Descrição do Alvo na Determinação da Seção de Choque Diferencial para o Espalhamento Elástico de Elétrons por Moléculas Diatômicas*
A. S. Simões, I. L. M. Ferreira, M. C. L. Santos. L. C. Santos, A. M. Maniero, J. D. M. Vianna, M. G. R. Martins 61
- P024 *Photostability studies of prebiotic molecules at the VUV region*
H. Tanaka, A. Medina, M. G. P. Homem, L. A. V. Mendes, F. V. Prudente, R. R. T. Marinho 62
- P026 *Projeto de um espectrômetro de tempo de voo do tipo garrafa magnética para medidas em coincidência*
J. A. S. Pereira, L. A. V. Mendes, F. V. Prudente, R. T. Marinho, A. Medina 63
- P028 *A Utilização das Álgebras de Lie na Determinação de Espectros Moleculares de Moléculas Diatômicas.*
Marivaldo Mendonça de Jesus, Frederico Vasconcellos Prudente 64
- P030 *Theoretical Study of the Infrared, Raman and VCD Spectra of Thiophene Using Ab Initio*
Marcello Ferreira da Costa, Poliane Cristina de Farias 65

P032	<i>Síntese e caracterização óptica de nanopartículas de ouro para o estudo da supressão de fluorescência de macromoléculas biológicas</i> <u>Ernando Silva Ferreira, Juan Alberto Leyva Cruz</u>	66
P034	<i>Biological effects of permanent magnetic field gradient</i> <u>Mirco Ragni, Tamara Posati, Emanuele Persichetti</u>	67
P036	<i>HOMO and LUMO orbitals for the ground state of the CaSi, CaSi⁺ e CaSi⁻ molecule</i> <u>Júlia Wotzasek Pereira, Robson A. Simões, Vladir W. Ribas, Patrícia Regina P. Barreto</u>	68
P038	<i>HOMO and LUMO orbitals for the ground state of the BeGe₂ molecule.</i> <u>Henrique Ken S. Iwamoto, Robson A. Simões, Vladir W. Ribas, Bogos N. Sismanoglu</u>	69
P040	<i>HOMO and LUMO orbitals for the ground state of the MgCl molecule</i> <u>João V. A. Fernandes, Robson A. Simões, Vladir W. Ribas, Patrícia Regina P. Barreto</u>	70
P042	<i>Estudo de Sistemas Quânticos Confinados com dois Elétrons usando o método Monte Carlo Quântico com Funções Correlacionadas</i> <u>Thiago Nascimento Barbosa, Frederico Vasconcellos Prudente</u>	71
P044	<i>Estados eletrônicos de mais baixa energia da molécula Cl</i> <u>Tiago Vinicius Alves, Fernando Rei Ornellas</u>	72
P046	<i>Estudo da estrutura eletrônica das moléculas de Benzeno, Anilina e Nitroanilinas em suas formas neutras e dicatiónica</i> <u>Maria Suely P. Mundim, Carlos X. de Oliveira, Daví A. C. Ferreira</u>	73
P048	<i>Estudo Teórico-Experimental da Fotofragmentação da Molécula da Etanolamina na Região de Valência</i> <u>Mabele de Jesus Santos, Aline Medina, Manuela Sousa Arruda, Josenilton do Nascimento de Souza, Luiz Antonio Vieira Mendes, Ricardo dos Reis Teixeira Marinho, Frederico Vasconcellos Prudente</u>	74
P050	<i>Study of the confinement potential of two electrons in a double quantum dots</i> <u>Angelo Marconi Maniero, Frederico V. Prudente, L. S. F. Olavo, Carlos Renato de Carvalho, Ginette Jalbert</u>	75
P052	<i>Potenciais geradores de autofunções específicas</i> <u>Adna E. C. Silva, Ana C. P. Bitencourt, Mirco Ragni</u>	76
P054	<i>Sobre os Potenciais Efetivos no Espalhamento Elástico Elétron-Molécula Usando o Método de Interação de Configurações para Descrever o Alvo</i> <u>Mônica C. Lemos, A. S. Simões, I. L. M. Ferreira, A. M. Maniero, J. D. M. Vianna, M. G. R. Martins</u>	77
P056	<i>Caracterização dos Espectros de Fônons e Morfologia dos Compostos RE₂(MoO₄)₃ e RE₂(MoWO₄)₃</i> <u>Glaysdon Francisco Barros de Oliveira, Ilde Guedes da Silva, Flávia Oliveira Monteiro da Silva Abreu</u>	78

Colóquio – 10/12/2013

17:40	– Colóquio – <i>A molécula de N₂O⁺ através de Espectroscopia de Fourier em alta resolução</i> <u>Carlos Eduardo Fellows</u>	79
-------	----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	----

Palestras Convidadas – 11/12/2013

08:30	– PC09 – <i>Ionização de moléculas por feixes de femtosegundo e fótons</i> <u>A. C. F. Santos, K. F. Alcantara, A. H. A. Gomes</u>	80
09:15	– PC10 – <i>Explorando estados eletrônicos excitados de sistemas diatômicos</i> <u>Fernando R. Ornellas</u>	81

Comunicações Orais – 11/12/2013

10:30 – CO15 – <i>Microespectroscopia de FTIR como ferramenta de análise patológica de lesões cancerosas e inflamatórias</i> <u>Fabício Augusto de Lima</u> , Luciano Bachmann, Cyril Gobinet, Olivier Piot	82
10:50 – CO16 – <i>Cálculo bidimensional dos níveis de energia da molécula de amônia usando coordenadas hipersféricas e representações adiabáticas e diabáticas</i> <u>Wanderson S. Jesus</u> , Frederico V. Prudente, Ana C. P. Bitencourt, Mirco Ragni	83
11:10 – CO17 – <i>Brazilian effective impact factor of physics journals: The third side of the coin</i> <u>José Rachid Mohallem</u> , Norma Eduarda da Fonseca	84

Palestras Convidadas – 09/12/2013

Palestra Convidada PC01

Evidência Experimental de Átomos Gêmeos $H(2^2S)$ Metaestáveis a partir da Dissociação do H_2 Frio Induzida por Elétrons

J. Robert¹, F. Zappa², C. R. de Carvalho³, Ginette Jalbert³,
R. F. Nascimento⁴, A. Trimeche¹, O. Dulieu¹, Aline Medina⁵,
Carla Carvalho⁶, N.V. de Castro Faria³

¹ Laboratoire Aimé Cotton, Université Paris-Sud, France

² Departamento de Física, UFJF, Minas Gerais, Brasil

³ Instituto de Física, UFRJ, Brasil

⁴ CEFET, Petrópolis, Brasil

⁵ Instituto de Física, UFBA, Brasil

⁶ Instituto de Aplicação, UERJ, Brasil

Iremos apresentar a detecção direta do par de átomos $H(2^2S)$ metaestáveis produzidos a partir da dissociação de uma única molécula fria H_2 , em medidas de coincidência. A dissociação molecular foi induzida por impacto de elétrons para evitar as limitações das regras de seleção que regem as transições radiativas. Dois detectores, posicionados próximos do centro de colisão, medem os $H(2^2S)$ metaestáveis neutros através de um processo de quenching localizado, que mistura o estado $H(2^2S)$ com o $H(2^2P)$, levando a detecção de um Lyman- α . Nossos dados mostram a realização de medidas em coincidência que provam, pela primeira vez, a existência do canal de dissociação $H(2^2S) - H(2^2S)$.

Referência:

J. Robert, F. Zappa, C. R. de Carvalho, Ginette Jalbert, R. F. Nascimento, A. Trimeche, O. Dulieu, Aline Medina, Carla Carvalho, and N.V. de Castro Faria, PRL 111, 183203 (2013)

Palestra Convidada PC02

Arquitetura Molecular de Complexos de Lantanídeos: previsão teórica e comprovação experimental

Alfredo Mayall Simas

Departamento de Química Fundamental - Universidade Federal de Pernambuco

Complexos de európio agem como conversores moleculares de luz, na medida em que absorvem no ultravioleta e emitem luz vermelha visível. Um importante parâmetro neste processo é o rendimento quântico da emissão que é a razão entre o número de fótons emitidos e o número de fótons absorvidos. Quanto maior o rendimento quântico, maior a sensibilidade da aplicação que utiliza o fenômeno, como radioimunoensaios. Apresentaremos nesta palestra como, a partir de considerações teóricas, propusemos uma conjectura a respeito do rendimento quântico de emissão, conjectura esta que nos permitiu projetar teoricamente complexos inéditos que, após sintetizados, caracterizados e com as propriedades fotofísicas medidas, de fato apresentaram uma intensificação do rendimento quântico de até 81% em comparação aos rendimentos quânticos dos complexos semelhantes e até então conhecidos. Finalmente, mostraremos como confirmamos experimentalmente nossa hipótese teórica, embutida em nossa conjectura, de que esta intensificação ocorre especificamente por tornar menos proibidas as emissões no visível dos novos complexos.

Palestra Convidada PC03

Vibrationally and rotationally nonadiabatic calculations on H_3^+ using coordinate-dependent vibrational and rotational massesAlexander AlijahGroupe de Spectrométrie Moléculaire et Atmosphérique
University of Reims, France

* e-mail: alexander.aliyah@univ-reims.fr

The hydrogen molecular ion H_3^+ is one of the best examples of a fruitful collaboration between theorists and experimentalists. Though it is the simplest polyatomic system, its theoretical description is a great challenge if one aims at high accuracy. Recently, we have reported a very accurate potential energy surface [1] which includes adiabatic and relativistic corrections. The computed ro-vibrational frequencies show small differences to experimental data, which are due to non-adiabatic effects.

A very efficient way to account for off-resonance non-adiabatic coupling is to make the reduced mass coordinate-dependent. This was achieved here using the core-mass approach [2], and a vibrational-mass surface for H_3^+ was generated [3]. The new, high-precision measurements of twelve ro-vibrational transitions in the ν_2 bending fundamental of H_3^+ by Wu *et al.* [4] were used to scale this surface empirically and to derive state-dependent vibrational and rotational masses that reproduce the experimental transition energies to 10^{-3} cm^{-1} . Rotational term values for $J \leq 10$ were presented for the two lowest vibrational states and equivalent transitions in D_3^+ considered.

References:

- [1] M. Pavanello *et al.*, Phys. Rev. Lett. **108**, 023002 (2012)
- [2] J. R. Mohallem, L. G. Diniz and A. S. Dutra, Chem. Phys. Lett. **501**, 575 (2011)
- [3] L. G. Diniz, J. R. Mohallem, A. Alijah, M. Pavanello, L. Adamowicz, O. L. Polyansky and J. Tennyson, Phys. Rev. A **88**, 032506 (2013)
- [4] K.-Y. Wu, Y.-H. Lien, C.-C. Liao, Y.-R. Lin and J.-T. Shy, Phys. Rev. A **88**, 032507 (2013)

Comunicações Orais – 09/12/2013

Comunicação Oral CO01

Potenciais modelo para estudos da interação de pósitrons com átomos e moléculas

Luis A. Poveda, José R. Mohallem

Laboratório de Átomos e Moléculas Especiais, Departamento de Física, ICEx, Universidade Federal de Minas Gerais,
PO Box 702, 30123-970, Belo Horizonte, MG, Brasil

Neste trabalho se apresenta uma metodologia baseada no cálculo e construção de superfícies de energia potencial que descrevem adequadamente as interações de pósitrons com átomos e moléculas. Ditos potenciais serão empregados na obtenção das seções de choque de espalhamento elástico e inelástico para baixas energias do projétil assim como para o estudo de fenômenos que envolvem a formação de estados ligados pósitron-alvo

Financiado por FAPEMIG e CNPq

Referências

- [1] J. R. Mohallem, J. Mol. Struct. Theochem **709**, 11, 2004
- [2] D. Assafrão, H. R. J. Walters, F. Arretche, A. Dutra, J. R. Mohallem, Phys. Rev. A **84**, 022713, 2011
- [3] L. A. Poveda, A. Dutra, D. Assafrão, J. R. Mohallem, Phys. Rev. A **87**, 052702, 2013
- [4] C. M. Surko, G. F. Gribakin, S. J. Buckman, J. Phys. B **38**, R57, 2005

Comunicação Oral CO02

Non-local phases in Casimir atom interferometry

François Impens^{1,*}, Claudio Ccapa Ttira¹, Ryan O. Behunin^{2,3,4}, Paulo A. Maia Neto¹

¹ Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ 21941-972, Brazil

² Theoretical Division, MS B213, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM 87545, USA

³ Center for Nonlinear Studies, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico 87545, USA

⁴ Department of Applied Physics, Yale University, New Haven, Connecticut 06511, USA

* e-mail: impens@if.ufrj.br

We present an open system theory of atom interferometers evolving in the quantized electromagnetic field bounded by an ideal conductor. Our treatment reveals an unprecedented feature of atomic wave propagation, namely the appearance of a non-local double-path phase coherence [1]. This stands in sharp contrast to the standard interpretation of atom interferometers, where one associates well-defined separate phases to individual paths. Our non-local atomic phase coherence is instead associated to pairs of paths. Such phase arises from the coupling of the external atomic degrees of freedom(dofs) to the quantized electromagnetic field and internal atomic dofs, which play the role of a common reservoir for the pair of paths. The system – the external atomic waves – disturbs the environment – the electromagnetic field and the atomic dipole degrees of freedom – in a non-local manner by leaving footprints [2] on distinct paths of the atom interferometer. This non-local atomic phase can be obtained by two independent methods, involving either a diagrammatic expansion of the disturbed environment quantum state [2] or the derivation of an influence functional [3] describing the net effect of the environment on the external atomic waves [1]. Last, the non-local atomic phases also violate the phase additivity [4] – in contrast to the usual atomic phases.

References:

[1] F. Impens, R. O. Behunin, C. Ccapa Ttira, and P. A. Maia Neto, *Europhysics Lett.* 101, 60006 (2013)

[2] F. Impens, C. Ccapa Ttira, R. O. Behunin, and P. A. Maia Neto, submitted (2013)

[3] R. P. Feynman and F. L. Vernon, *Ann. Phys. (N.Y.)* 24, 118 (1963)

[4] F. Impens, C. Ccapa Ttira, and P. A. Maia Neto, to appear in *Journal of Physics B* and e-print arXiv:1304.2425 (2013)

Comunicação Oral CO03**Estudo de Potenciais-Modelo na Descrição de Sistemas Endohedrais: A@C_n.**Leandro Cerqueira Santos¹, M. Graças R. Martins², R. Rivelino Moreno², J. David M. Vianna^{2,3}¹ CETENS-UFRB / IF-UFBA² IF - UFBA³ UnB

O problema quântico relativo a sistemas físicos espacialmente confinados vem sendo estudado nos últimos anos por vários autores. Tais sistemas possuem propriedades eletrônicas e ópticas modificadas, quando comparadas com sistemas livres, de grande interesse tanto no campo teórico quanto no campo experimental. Estudos experimentais recentes e o desenvolvimento tecnológico tem despertado grande interesse teórico, em particular no que diz respeito ao confinamento por estruturas de carbono conhecidas como buckminsterfulleren (A@C_n, n = 20, 30, 60, ...) e seus derivados, como, por exemplo, o A@C₂₀H₂₀. Nesses estudos é analisado o comportamento dos níveis de energia de átomos, de moléculas e de íons inseridos nessas cavidades microscópicas. Entre as formas de enfoque para esses problemas há aquelas que se baseiam em modelos de potencial atrativo que simulam o efeito da cavidade sobre o átomo inserido. Alguns modelos de potenciais vindo sendo explorados na literatura, tais como Potencial Quadrado [1,2], Woods-Saxon [2], Gaussiano [3], entre outros, para simular a estrutura de carbono e desta forma analisa-se as propriedades do átomo confinado no centro da cavidade. No entanto podemos mostrar, com cálculos DFT, que alguns sistemas possuem mínimo de energia deslocado do centro da cavidade; tal efeito não é descrito pelos potenciais usuais utilizados na literatura. Neste trabalho propomos um tipo de potencial baseado na função Sinc(x), que permite posicionar diferentes mínimos dentro da cavidade da estrutura de carbono. Analisamos o efeito do confinamento sobre o átomo de Hidrogênio por diferentes estruturas de carbono H@C_n, comparando nossos resultados com os de outros autores utilizando diferentes potenciais.

[1] D M Mitnik et al Phys Ver A 78 (2008) 062501

[2] V K Dolmatov et al J Phys B: At. Mol. Phys 45 (2012) 105102

[3] E M nascimento et al J Phys B: At. Mol. Phys 44 (2011) 015003

Comunicação Oral CO04**Dupla fotoionização da camada de valência do CH₂Cl₂**

K. F. Alcantara, A. H. A. Gomes, W. Wolff, L. Sigaud, A. C. F. Santos

Universidade Federal do Rio de Janeiro

A ocorrência da ionização de muitos elétrons devido à fotoabsorção é um processo pouco provável se comparado com a fotoionização de um único elétron, sendo este processo determinado completamente pela correlação entre os elétrons [1]. A correlação eletrônica dos elétrons é altamente significativa, porém difícil de ser estudada, uma vez que os valores das seções de choque são baixos e esse é um problema que envolve muitos corpos. No entanto, a fotoionização é o processo chave para entender a correlação eletrônica dos elétrons em moléculas. A probabilidade de ionizar duplamente os elétrons da camada de valência é pequena, mas ela definitivamente é observada devido aos processos de “shake-off”(SO) e do chamado “two-step one”(TS1) ou “knock-out”, que correspondem a processos não adiabáticos e adiabáticos respectivamente [2-6]. Neste trabalho, estudamos os papéis dos processos “shake-off”(SO) e “knock-out”na dupla fotoionização da molécula de CH₂Cl₂. Através dos dados experimentais obtidos no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron – LNLS, nós estimamos as probabilidades para ambos os mecanismos na fotoionização da camada de valência do CH₂Cl₂ em função da energia do fóton incidente. Nossos resultados experimentais se mostraram qualitativamente de acordo com os modelos de Thomas [3] e Sanson [4] utilizados.

Referências:

- [1] R. Wehlitz, Simultaneous Emission of Multiple Electrons from Atoms and Molecules Using Synchrotron Radiation. *Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics*, **58**, USA, Academic Press, 2010, pp. 1-76.
- [2] T. Schneider, P. L. Chocian, and J.-M. Rost, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 073002-1, (2002).
- [3] T. Darrah Thomas, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 417 (1984).
- [4] J. A. R. Sanson, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2861 (1990).
- [5] J. A. R. Sanson, R. J. Bartlett, Z. X. He, *Phys. Rev. A* **46**, 7277 (1992).
- [6] A.C.F. Santos, A. Hasan, T. Yates, R. D. DuBois, *Phys. Rev. A* **67**, 052708 (2003).

Palestra Convidada – 09/12/2013

Palestra Convidada PC04

Slow ground state molecules from matrix isolation sublimation

A. N. Oliveira^{1,2}, R. L. Sacramento¹, B. X. Alves¹,
H. B. Rocha¹, W. Wolff¹, M. S. Li³, C. L. Cesar¹

¹ Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro

² Divisão de Metrologia Ótica, Inmetro

³ Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo

We have studied, via laser absorption spectroscopy, the velocity distribution and rotational temperature of ${}^7\text{Li}_2$ dimers released from a cryogenic matrix of solid neon. As previously [Sacramento et al., *J. Chem. Phys.* **136**, 154202(2012)], we have implanted atoms, and possibly molecules, into the Ne matrix by laser ablation of a solid lithium precursor. We obtain rotational and translational temperatures of ~ 5 K for the beam created by the matrix sublimation at ~ 16 K, with a drift velocity of ~ 150 m s⁻¹. The average density of molecules in the free expanding sublimation plume is estimated at the upper 10^9 cm⁻³ along the laser axis, resulting in over 10^{10} molecules per sublimation pulse. We have preliminary evidence that a fraction of these molecules is created in the matrix by the mating atoms, opening up the possibility to produce any kind of allowed molecule, using different precursors for alternate laser ablation. Such an intense source of cryogenic molecules have possible applications ranging from fundamental physics tests, quantum information studies, cold collisions and chemistry, to trapping. We discuss the next steps towards a proof of this molecular formation within the matrix.

Comunicações Orais – 09/12/2013

Comunicação Oral CO05

Ionização e dissociação de azabenzenos de interesse biológico por impacto de prótons e elétrons

W. Wolff, H. Luna, L. Sigaud, A. C. Tavares, E. C. Montenegro

Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro

Secções de choque em valores absolutos de ionização e fragmentação são apresentados para a molécula de pirimidina por impacto de prótons sobre uma larga faixa de velocidades intermediárias e por impacto de elétrons abrangendo velocidades equivalentes dos prótons e sob a validade da aproximação de Born. O trabalho mostra que uma nova e significativa informação sobre a fragmentação e ionização molecular pode ser extraída a partir de medições absolutas das secções de choque totais e parciais de fragmentação. O comportamento das secções de choque de fragmentação relacionadas à aproximação de Born são apresentadas primeiramente baseadas em dados da literatura. Diferenças entre as secções de choque de elétrons e prótons colidindo com a molécula pirimidina, mesmo no regime de validade da aproximação de Born foram encontrados e a comparação entre eles provaram ser uma ferramenta eficiente para identificar diferenças importantes sobre a transferência de energia, induzida por ambas as partículas e que são refletidas nas secções de choque de alguns fragmentos iônicos. Os dados obtidos sob impacto de elétrons são comparados com dados da literatura e suas diferenças analisadas. Um esquema de fragmentação é proposto e obtido a partir da produção de uma vacância inicial em um dos orbitais de valência por impacto de prótons e elétrons. O presente procedimento permitiu a determinação quantitativa da população das vacâncias dos orbitais moleculares associados à produção dos 9 fragmentos carregados mais intensos. A aplicação da metodologia à outros compostos aromáticos e aos compostos isoméricos da pirimidina será discutida.

Comunicação Oral CO06

Coltrims: An introduction to modern 3D-momentum spectroscopy

A. Czasch^{1,2}, O. Jagutzki^{1,2}, T. Jahnke¹, R. Dörner¹, H. Schmidt-Böcking¹

¹ Institute for Nuclear Physics, Frankfurt University, Germany

² RoentDek Company, Germany

During the last decade the Coltrims-technique has revolutionized the field of momentum spectroscopy. By simultaneously measuring the 3D-momentum vectors of all involved particles it is now possible to investigate complex many-particle processes in gas targets and surfaces. In the presentation we will discuss the discovery of the ICD-effect (Interatomic Coulombic Decay) and the results of the ICD Coltrims-measurements as a prime example.

Comunicação Oral CO07

Present Status and Future of Experimental Stations for Atomic and Molecular Spectroscopy at LNLS/SIRIUS

P. T. Fonseca, D. Galante, J. C. Cezar, H. R. Moraes, L. Souza,
G. L. P. M. Rodrigues, D. S. Chaves, C. Ambrósio, J. B. Marques, W. R. Araújo

Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, Caixa Postal 6192, CEP: 13081-970 Campinas - SP, Brazil

We report the current status and performance of two experimental stations for atomic and molecular spectroscopy at the Brazilian Synchrotron Light Laboratory (Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS). The first one is the Rotatable Chamber, which has a Time of Flight (TOF) detector. It was manufactured in 1999 and it is the second most used experimental station in the soft x-ray and UV beamlines. The second one is the Plasma Desorption Mass Spectroscopy (PDMS) chamber and also it is one of the oldest experimental stations. Besides discussing about the necessary improvements in both chambers, we will also present proposals of upgrades and/or substitutions, with the aim of discussing with the user community about the future science applications with these stations and also which kind of new experimental stations we would like to have for using in Sirius, the new Brazilian Synchrotron Source.

Sessão de Painéis Ímpares – 09/12/2013

Painel P001

Construção de laser de diodo com cavidade estendida

A. N. Oliveira^{1,2}, R. L. Sacramento¹, B. X. Alves¹,
H. B. Rocha¹, W. Wolff¹, M. S. Li³, C. L. Cesar¹

¹ Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro

² Divisão de Metrologia Ótica, Inmetro

³ Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo

Este trabalho apresenta o projeto, a montagem e a caracterização de um laser de diodo com cavidade externa, operando em comprimento de onda em torno de 670 nm, que será utilizado em espectroscopia de alta resolução com átomos de Li. Além do baixo custo do projeto, se comparado a outros tipos de fonte laser, o dispositivo apresenta largura espectral estreita e permite a sintonização de uma faixa espectral suficientemente adequada à aplicação final.

Painel P003**Espectrômetro de Perda de Energia de elétrons de Baixíssimas Energias e Alta Resolução**R. F. C. Neves^{1,2}, H. V. Duque¹, R. R. Santos¹, M. C. A. Lopes¹¹ Departamento de Física – ICE, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora, Minas Gerais, Brasil.² Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sul de Minas Gerais – Câmpus Poços de Caldas, Poços de Caldas, Minas Gerais, Brasil.

Com o objetivo de investigar os processos decorrentes da colisão de elétrons com moléculas, está sendo desenvolvido no Laboratório de Espectroscopia Molecular da UFJF um espectrômetro de impacto de elétrons de baixas energias. Este instrumento permitirá a obtenção de valores absolutos de seções de choque diferenciais, SCD, do espalhamento de elétrons dos canais elásticos e inelásticos, envolvendo excitações eletrônicas e ionização do alvo. O espectrômetro, que aplica a técnica de feixes cruzados, é constituído por um canhão de elétrons monocromatizado, um feixe gasoso, um analisador de energias de elétrons do tipo cilíndrico 127° e um detector do tipo Channeltron. O espectrômetro possui também, um analisador de massa quadrupolo Hiden. Todos os elementos estão instalados no interior de uma câmara de alto vácuo, com pressão residual da ordem de 10^{-7} Torr, revestida por cinco camadas de μ -metal, reduzindo campos magnéticos residuais na região de colisão para valores em torno de 3 mGauss. O espectrômetro é controlado por circuitos eletrônicos construídos em nosso laboratório, que produzem feixes eletrônicos estáveis e intensos. Com este equipamento produzimos pela primeira vez no país feixes com energia de 0,1 eV, com intensidade de 0,5 nA. Para feixes não monocromatizados de 10 eV, o espectrômetro produz feixes colimados e estáveis com intensidades de 70 nA. O espectrômetro apresentou um excelente desempenho na região de energia de 10 eV a 200 eV, com variação angular de 10° a 60° e resolução energética de 90 meV. Novos trabalhos estão em desenvolvimento para estender a faixa de baixa energia de impacto até 0,5 eV e aumentar sua resolução até 60 meV. As determinações dos valores absolutos de SCDs são realizadas aplicando o método de fluxo relativo, que envolve a comparação do sinal do espalhamento de elétrons do gás desconhecido com o He, cujas SCDs são conhecidas com precisão na literatura.

Agradecimentos: CNPq, CAPES, FAPEMIG e FINEP.

Painel P005**Sobre um estudo da entropia de Shannon em sistemas atômicos confinados de um e dois elétrons.**

Wallas Santos Nascimento, Frederico Vasconcellos Prudente

Universidade Federal da Bahia

A entropia de Shannon, que no âmbito da Teoria da Informação fornece uma medida de incerteza de uma dada distribuição de probabilidade [1], tem sido empregada no estudo de sistemas atômicos e moleculares livres para, entre outras, analisar a qualidade da função de onda [2]. Entretanto, poucos estudos têm sido feitos para sistemas quânticos confinados espacialmente [3]. Esses sistemas, em particular, têm suas propriedades físico-químicas alteradas em relação ao sistema livre. O presente trabalho tem como objetivo analisar a entropia de Shannon para sistemas quânticos confinados. Com esse intuito foram estudados alguns sistemas atômicos com um e dois elétrons. Os sistemas de um elétron escolhidos foram: o átomo de hidrogênio confinado e alguns de seus íons isoeletrônicos confinados como o átomo de hélio ionizado (He^+) e o átomo de lítio duplamente ionizado (Li^{2+}). Para o estudo de sistemas com dois elétrons foram escolhidos o átomo de hélio confinado (He) e um de seus íons isoeletrônicos confinados, o átomo de lítio ionizado (Li^+). Para esses sistemas, em seu estado fundamental, foram calculadas as entropias de Shannon no espaço das posições ($S_r = - \int |\psi(\vec{r})|^2 \ln(|\psi(\vec{r})|^2) d\vec{r}$) e no espaço dos momentos ($S_p = - \int |\psi(\vec{p})|^2 \ln(|\psi(\vec{p})|^2) d\vec{p}$) [4], bem como a soma entrópica ($S_t = S_r + S_p$). Com esse procedimento foi possível apontar as tendências do comportamento das entropias de Shannon, testar o cumprimento da relação de incerteza entrópica ($S_t = S_r + S_p \geq n(1 + \ln \pi)$) [5] e, por fim, analisar a conjectura proposta por S. Gadre et al. [2] que utiliza a quantidade S_t como medidor de qualidade de funções-base.

[1] SHANNON, C. A mathematica theory of communication. The Bell System Technical Journal, v. 27, p. 379-423, 623-656, 1948.

[2] GADRE, S. et al. Some novel characteristics of atomic information entropy. Internation Journal of Quantum Chemistry, v. 32, n. 5, p. 2602, 1985.

[3] SEN, K. D. Characteristic features of shannon information entropy of confined atoms. Journal of Chemical Physics, v. 123, p. 074110, 2005.

[4] AQUINO, N.; FLORES-RIVEROS, A.; RIVAS-SILVA, J.F. Shannon and Fisher entropies for a hydrogen atom under soft spherical confinement. Physics Letters A, vol. 377, p. 2062, 2013.

[5] BIALYNICKI-BIRULA, I.; MYCIELSH, J. Uncertainty relations for information entropy in wave mechanics. Communications in Mathematical Physics, v. 44, p. 129, 1975.

Painel P007**Perda e Captura de O^+ e O^{2+} em CF_2Cl_2**

A. H. A. Gomes, K. F. Alcantara, A. C. F. Santos

Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro;

O Freon 12 (CF_2Cl_2) é uma molécula de vasta aplicação industrial, como gás refrigerante, propelente em aerossóis e processos de gravação por plasma. É também conhecida por ser um importante agente na destruição da camada de ozônio [1]. A atmosfera da terra é constantemente bombardeada por íons energéticos provenientes de ventos solares e raios cósmicos. Entre estes, está presente o oxigênio, que tem grande poder de penetração na atmosfera terrestre [2]. Quando íons de oxigênio energéticos interagem com as moléculas de CF_2Cl_2 lançadas na atmosfera, podem ocorrer diversos processos de interação que resultam na fragmentação da molécula com a liberação de átomos de cloro, que interagem com o ozônio causando sua quebra.

Neste trabalho, foram realizadas medidas seção de choque absoluta de perda e captura eletrônica e fragmentação, usando espectroscopia por tempo de voo, da molécula de CF_2Cl_2 em colisões com oxigênio simples e duplamente carregado. Foram calculados valores teóricos para perda e captura eletrônica usando modelos já existentes [3] que apresentaram ótima concordância com as medidas experimentais. A fragmentação apresentou comportamento compatível com dados existentes na literatura para colisões da molécula com prótons e elétrons [4].

Referências:

- [1] A.H.A. Gomes, W. Wolff, N. Ferreira, K.F. Alcantara, H. Luna, G.M. Sigaud, A.C.F. Santos, *International Journal of Mass Spectrometry*, 319-320 (2012) 1-8;
- [2] J.A.M. Pereira, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 240 (2005) 133-136;
- [3] G. M. Sigaud, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 44 (2011) 225201
- [4] V. V. Afrosimov, A. A. Basalaev, B. Fastrup, E. Horsdal-Pedersen, M. N. Panov, A. V. Tulub, D. S. Yakovlev, *Journal of Physics B: At. Mol. Opt. Phys.* 36 (2003) 1991-2000;

Painel P009**All-electron double zeta basis sets for the most fifth-row atoms: Application in DFT spectroscopic constant calculations**

F. E. Jorge, A. Canal Neto

Departamento de Física, Universidade Federal do Espírito Santo

Segmented all-electron contracted double zeta valence plus polarization function (DZP) basis sets for the elements Cs, Ba, La, from Hf to Ir, and from Au to Rn are constructed [1] for using in conjunction with the non-relativistic and Douglas-Kroll-Hess (DKH) Hamiltonians. Their contraction pattern guarantees their computational efficiency compared to generally contracted relativistic basis sets. Using the B3LYP hybrid functional, the performance of the DZP-DKH basis set is assessed for predicting atomic ionization energy as well as spectroscopy constants of some compounds [1]. Despite its compact size, this set demonstrates consistent, efficient, and reliable performance and will be especially useful in calculations of molecular properties that require explicit treatment of the core electrons. In fact, they are sufficiently small to be used in place of effective core potentials for routine studies of molecules.

The most important findings of these calculations are the followings:

- On average, the agreement between DKH2-B3LYP/DZP-DKH and benchmark theoretical atomic ionization energies is good. At the same level of theory, one can see that our results are not so different from those obtained with a very large uncontracted well-tempered basis set [2].
- On spectroscopic constant calculations, we verify that the addition of *1d* diffuse function to the fifth-row element DZP-DKH set improves significantly the accordance with larger basis sets. The reason for that must be the reduced size of our set.
- Comparing with benchmark theoretical spectroscopic constants results, the ANO-RCC-DZP set [3] performs better than our sets, but, with experimental data, the opposite occurs.

References

- [1] A. Canal Neto and F. E. Jorge, Chem. Phys. Lett. 582 (2013) 158.
- [2] S. Huzinaga and M. Kolbukowski, Chem. Phys. Lett. 212 (1993) 260.
- [3] B. O. Roos, R. Lindh, P.-Å. Malmqvist, V. Veryazov, and P.-O. Widmark, J. Phys. Chem. A 109 (2005) 6575.

Painel P011

Estudos de reações induzidas por prótons energéticos sobre a prolina, ácido ascórbico e a sua mistura na região do infravermelho

Tiago Silveira¹, Luiz Mendes², Ricardo Marinho², Enio Frota³, Cássia Ponciano³

¹ Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia

² Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia, Salvador, Brasil

³ Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica, Rio de Janeiro, Brasil

A busca de informação a respeito dos resultados da interação de diferentes tipos de radiação com a matéria em seus mais variados contextos (astrofísico, biológico, médico, etc) tem motivado diversos estudos atuais. Como ferramenta de análise, a espectrometria óptica, em especial a de radiação infravermelha (IR), pode desempenhar um papel fundamental na físico-química molecular devido ao fato de um grande número de espécies químicas apresentarem transições vibracionais e rotacionais bem caracterizadas na faixa de Frequência correspondente a essa radiação. Este trabalho, procurará então mostrar os primeiros resultados da avaliação da interação de prótons energéticos (1 MV) com a prolina ($C_5H_9NO_2$) e o ácido ascórbico ou vitamina C ($C_6H_8O_6$). O interesse do estudo sobre a prolina vem do seu cunho biológico (aminoácido) e o ácido ascórbico pelo seu caráter antioxidante. Para isto, incidimos prótons (produzidos no acelerador Van de Graaf da PUC-Rio) sobre a prolina e o ácido ascórbico separadamente e posteriormente na mistura dos dois em diferentes proporções. A partir de espectroscopia de infravermelho por transformada de Fourier (FTIR), obtivemos as curvas que dão informação do processo de perda de amostra em face ao ambiente gerado pelos prótons sobre as mesmas. Estas degradações foram devidamente quantificadas e seus mecanismos começam a ser discutidos.

CNPq, CAPES - PROCAD/ CASADINHO Processo CNPq 552726/2011-7

Painel P013

Estudo do espectro eletrônico do $[\text{Cr}(\text{CN})_6]^{3-}$ por TD-DFT

Helen G. C. de Meneses, André L. B. Formiga

UNICAMP

Os compostos derivados do azul da Prússia são conhecidos por apresentarem propriedades magnéticas e fotoquímicas que estão relacionadas à estrutura eletrônica. Dentre eles o $[\text{Cr}(\text{CN})_6]^{3-}$ destaca-se como “building block” em *single-molecule magnets* que possuem altas temperaturas de ordenamento magnético [1]. Assim, com a finalidade de entender o comportamento eletrônico e espectroscópico destes materiais, vários cálculos *ab initio* e semi-empírico foram realizados para alguns dos cianometalatos [2]. Bons resultados foram obtidos usando a metodologia CASSCF/CASPT2 [3] mas falta na literatura uma investigação do problema usando a DFT e o formalismo TD-DFT.

Dessa forma, este trabalho visa calcular as excitações eletrônicas do complexo $[\text{Cr}(\text{CN})_6]^{3-}$ usando TD-DFT, atribuir essas transições e compará-las com os valores experimentais [4]. Para isso, usamos os funcionais B3LYP e PBE0 e as bases e respectivos ECP LANL2DZ(Cr)/6-31G(C,N), LANL2TZ(Cr)/6-31G(C,N) e def2-TZVP(Cr,C,N).

O espectro de absorção do complexo $[\text{Cr}(\text{CN})_6]^{3-}$ é caracterizado pelas transições que ocorrem entre os orbitais *d* do metal e pelas transições de transferência de carga. Observamos as transições referentes à transferência de carga dos orbitais dos ligantes para os orbitais *d* do crômio (LMCT) mais especificamente a transição $t_{2g}(\pi, \text{Cr}) \leftarrow t_{1u}(\sigma, \text{CN})$, essa atribuição explicaria o comportamento fotoquímico desse complexo. No caso das transições *d-d* estas apresentaram força de oscilador menor que 10^{-6} .

[1] Ferlay, S.; Mallah, T.; Ouahès, R.; Veillet, P.; Verdager, M. *Nature* 1995, 378, 701.

[2] Hendrickx, M. F. A.; Mironov, V. S.; Chibotaru, L. F.; Ceulemans, A. J. *Am. Chem. Soc.* 2003, 125, 3694.

[3] Pierloot, K.; Van Praet, E.; Vanquickenborne, L. G.; Ross, B. O. *J. Phys. Chem.* 1993, 97, 12220.

[4] Alexander, J. J.; Gray, H. B. *J. Am. Chem. Soc.* 1968, 90, 4260.

Painel P015

Seções de Choque Totais do Espalhamento de Elétrons de Baixas Energias por Moléculas

Maria Cristina A. Lopes, Daniel G. M. da Silva

Departamento de Física – ICE, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora, Minas Gerais, Brasil

Com o objetivo de colocar o Brasil no seleto grupo de Países que conseguem trabalhar experimentalmente com feixes de Elétrons de baixas energias no estudo de átomos e moléculas, no Laboratório de Espectroscopia Molecular (LEAM) da UFJF foi desenvolvido um canhão o de Elétrons de baixa energia, cobrindo a faixa de 0,1 a 200 eV e sua eletrônica de controle para o estudo de átomos e moléculas. O canhão produz feixes com eficiência extraordinariamente alta, isto é, com um diâmetro menor que 0,5 mm e intensidades variando de 0,5 nA a 280 nA para as energias de 0,1 a 200 eV respectivamente. Este canhão, não monocromatizado, está sendo utilizado em um novo aparelho de medidas de Seções de Choque Totais (SCT). Isto não é uma tarefa simples uma vez que produzir feixes de partículas carregadas de baixa energia, intenso, focalizado e com alta resolução energética, implica em trabalhar em condições de extrema sensibilidade do feixe, que é altamente susceptível a campos Elétricos e magnéticos, às condições de vácuo, á óptica eletrônica empregada, aos materiais empregados no espectrômetro e a estabilidade dos equipamentos de controle e aquisição de dados. O aparelho de medidas de SCT emprega a técnica de transmissão linear e cobre a região de energias de impacto de 2 a 200 eV. O aparelho foi implantado em uma nova câmara de vácuo revestida por 5 camadas de mu-metal para blindagem de campos magnéticos espúrios e dois sistemas de bombas turbomoleculares, uma para o bombeamento diferencial do canhão e a outra para a célula de espalhamento e região do analisador. Para este aparelho foi também projetada e construída uma nova célula de espalhamento, para aquisição das SCT a baixas energias. O aparelho de medidas de SCT a baixas energias está sendo atualmente caracterizado.

Agradecemos pelo suporte financeiro á FAPEMIG, CNPq, FINEP, CAPES.

Painel P017**Curvas de energia potencial do íon hidreto de berílio BeH^+ e de seus isotopômeros**

Felipe Oliveira Ventura, Cristina Porto Gonçalves

UESB

O estudo de moléculas com poucos elétrons é de fundamental importância para o entendimento da formação de moléculas mais complexas e de processos como fotoionização e fotofragmentação em nuvens interestelares. Neste trabalho será apresentado um estudo teórico do íon molecular BeH^+ e dos seus isotopômeros BeD^+ e BeT^+ , onde D é o deutério e T o trítio. Foram realizados cálculos de estrutura eletrônica para obter a Curva de Energia Potencial (CEP) dos sistemas moleculares, onde as energias eletrônicas calculadas ocorreram ao nível da aproximação Born-Oppenheimer (ABO) e ao nível da Correção de Massa Nuclear Finita (FNMC - Finite Nuclear Mass Correction). A FNMC é uma metodologia proposta por J. R. Mohallem e colaboradores [J. R. Mohallem, F. Rolim e C. P. Gonçalves, *Mol. Phys.* 99 (2001) 87] que vai além da aproximação Born-Oppenheimer e permite o estudo de efeitos isotópicos no nível eletrônico dos sistemas moleculares, sem a necessidade de trabalhar com o nível nuclear, pelo que prediz a ABO ao separar o movimento eletrônico do movimento nuclear. O pacote computacional utilizado no trabalho foi o GAMESS modificado, com a inclusão da FNMC no código fonte do software. Foi utilizado o método Interação de Configurações (CI) com excitações simples e duplas (CISD) e a base Def2-QZVP (<https://bse.pnl.gov/bse/portal>). As distâncias interatômicas compreenderam a regiões próximas da distância de equilíbrio (2,496 bohrs) até a região de dissociação molecular (12,006 bohrs). Os valores encontrados ao nível da ABO foram comparados com dados presentes na literatura [F. B. C. Machado e F. R. Ornellas. *J. Chem. Phys.* 94, 7237 (1991)] e se mostraram satisfatórios, entretanto, não há dados na literatura que mostra a aplicação da FNMC no íon molecular BeH^+ e nos seus isotopômeros.

Agradecimentos: À UESB através do apoio da Pró-reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação - PPG.

Painel P019

Estudo e desenvolvimento instrumental de um analisador de energia de elétrons-íons e identificação de íons

Lucas Simoes Santos, César A. Oliveira Malta, Eduardo Moreira Damasceno,
Beliato Santana Campos, Luiz Mendes

IF – Universidade Federal da Bahia

Neste trabalho, que aqui apresentamos, visamos em primeiro plano a apresentação o do início do desenvolvimento técnico de uma instrumentação científica voltado à interpretação, por meio de técnicas espectroscópicas, dos resultados da interação o de diferentes tipos de radiação o com amostras de interesse científico geral. Concentrando-nos em regimes extremos onde pode ocorrer este tipo de interação o como os de baixíssima pressão ou de alto vácuo.

Especificamente proporemos as ideias que nortearão processo inicial de construção o de um espectrômetro de dupla coincidência com análise da massa de íons pela técnica de tempo de voo (TOF) e análise de energia cinética dos elétrons emitidos. Este analisador utilizará o princípio denominado de garrafa magnética para a parte de elétrons. No mesmo pretende-se fazer a detecção dos elétrons com detector sensível a posição de forma poder obter espectros ro-vibracionais de moléculas poliatômicas quando excitadas por luz monocromática, laser ou elétrons. Pretende-se, em um momento posterior, tomar os resultados obtidos e confrontá-los com estudos teóricos dos mecanismos de dissociação e ionização em diferentes contextos como o da astrofísica e evolução química de moléculas complexas no espaço, por exemplo.

Logo, espera-se ao final deste projeto o funcionamento de um equipamento capaz de proporcionar informações a respeito da dinâmica molecular no momento da interção da amostra com diferentes tipos de radiação, como os estados atômico/moleculares participantes, produções parciais, totais, entre outros.

PIBIC/CNPq e PIBIC/FAPESB

Painel P021

Um estudo da correlação eletrônica de sistemas confinados usando a teoria do funcional da densidade

João Cláudio C. Pereira^{1,2}, M. Graças R. Martins², J. David M. Vianna³

¹ Centro de Ciência e Tecnologia Universidade Federal do Recôncavo da Bahia, Cruz das Almas - BA, Brasil

² Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia, Salvador-BA, Brasil.

³ Instituto de Física, Universidade de Brasília, Brasília-DF, Brasil

Uma área de pesquisa de interesse atualmente é o problema quântico relativo a sistemas confinados. Entre os objetivos dessa pesquisa encontra-se a análise da estrutura eletrônica de átomos, moléculas, íons, átomos e moléculas artificiais isolados e na presença de campos eletromagnéticos. Do ponto de vista matemático há pelo menos duas classes de métodos em desenvolvimento: aquela que se baseia em modelos de potenciais e a que inclui condições de contorno sobre as funções que descrevem o sistema, havendo em ambos os casos uma preocupação com a análise de qual classe se mostra mais efetiva na análise da correlação eletrônica. Neste trabalho, desenvolvemos a teoria do funcional da densidade (DFT) incluindo condições de contorno apropriadas, para analisar o efeito que o confinamento tem sobre a correlação eletrônica de sistemas com muitos elétrons confinados em regiões esféricas. Primeiras aplicações a átomos e quantum dots, e comparações dos resultados com outros métodos são apresentadas.

Painel P023

DFT vibrationally averaged isotopic dipole moments of propane, propyne and water isotopologues

A. F. C. Arapicara¹, J. R. Mohallem²

¹ Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, CEFET-MG, Coordenação de Ciências, Campus I, 30.421-169, Belo Horizonte, MG

² Laboratório de Átomos e Moléculas Especiais, Departamento de Física, ICEx, Universidade Federal de Minas Gerais, PO Box 702, 30123-970, Belo Horizonte, MG, Brasil

Post Born-Oppenheimer isotopic effects and zero-point vibrational averages were previously embodied in calculations of the dipole moments of isotopic species of some apolar molecules within the HF-SCF approximation [1]. Many other molecules, however, demand the inclusion of electronic correlation for this goal. Here, DFT calculations are reported for the isotopic effects on dipole moments of molecules with increasing permanent dipole moments, namely propane ($\mu \simeq 0.1$ debye), propyne ($\mu \simeq 0.7$ debye) and water ($\mu \simeq 2.9$ debye). The need of increasing correlation is connected to the presence of a triple bond in propyne and a lone electron pair in water. The results account well for the experimental values and isotopic trends of the dipole moments of these molecules. The prospect of applying the same approach in order to identify lines of isotopologues of other molecules, particularly benzene, from radioastronomic spectra is discussed.

Supported by CNPq and Fapemig

[1] A. Arapiraca, D. Jonsson and J. R. Mohallem, J. Chem. Phys. **135**, 244313 (2011)

Painel P025**Avaliação teórica da transferência de carga fotoinduzida em um complexo envolvendo uma ftalocianina de Ru (II) ligada à forma anatase do TiO₂**D. M. S. Araújo¹, W. R. Gomes¹, A. E. H. Machado^{1,2}¹ Universidade Federal de Uberlândia, Instituto de Química, Laboratório de Fotoquímica e Ciência de Materiais.
diesleymartins@yahoo.com.br² Universidade Federal de Goiás, Campus Catalão, Departamento de Química.

Recentemente, Jono e colaboradores demonstraram a transferência interfacial de carga (TIC) em complexo entre o 7,7,8,8-tetracianoquinodimetano (TCNQ) e um nanocluster de anatase [1], envolvendo o HOMO do TCNQ e estados virtuais da anatase, com limiar de absorção deslocado para o visível/infravermelho próximo, sugerindo que associações desse tipo podem ser alternativas para o desenvolvimento de dispositivos para fotocatalise solar [2]. Apresentamos resultados obtidos para complexo similar envolvendo uma ftalocianina de Rutênio (II) e anatase, empregando a Teoria do Funcional de Densidade (DFT e TD-DFT). Na otimização estrutural e cálculo das frequências vibracionais, empregou-se o funcional B3LYP e o conjunto de bases LANL2DZ ECP [3] e respectivo pseudo-potencial para o Ti, e o conjunto Def2-TZVPD [3] para os demais átomos, e pseudo-potencial do Ru. O nanocluster baseou-se em estrutura descrita por Jono e colaboradores [1], mantido congelado durante todos os cálculos, SCRF=CPCM [4] simulando a acetonitrila. O funcional CAM-B3LYP [5] foi usado na simulação do espectro eletrônico. A análise das transições eletrônicas e orbitais moleculares sugere o envolvimento majoritário dos orbitais HOMO-1, LUMO+1 e LUMO+2 nas transições eletrônicas de menor energia associadas à TIC corante-nanocluster. Em vista disso, dois “band gap” foram identificados para o complexo (1,80 e 3,13 eV), inferiores ao valor experimental reportado para o semiconductor puro (3,24 eV). Os resultados, embora preliminares, sugerem que este complexo é promissor para o desenvolvimento de dispositivos fotocatalíticos, incluindo os para conversão de energia.

CNPq, FAPEMIG, RQ-MG (FAPEMIG/REDE-113/10), CAPES.

[1] Jono, R. et. al., J. Phys. Chem. Letters, 2011, 10, 1167.

[2] Machado, A.E.H. et. al., Potential Applications for Solar Photocatalysis: From Environmental Remediation to Energy Conversion, in Solar Radiation. 2012.

[3] Schuchardt, K.L. et al., J. Chem. Inf. Model., 2007, 47,1045.

[4] Cossi, M. et al., J. Comp. Chem., 2003, 24, 669.

[5] Aittala, P. J. et al., Chem.Phys. Lett., 2011, 501,226.

Painel P027

Cálculo da concentração dos componentes atmosféricos a partir do modelo de transmissão SPCTRAL2

Rafaela Teixeira Alves, Germano Pinto Guedes

Universidade Estadual de Feira de Santana

Neste trabalho, buscamos calcular as concentrações de alguns gases opticamente ativos, a exemplo do vapor de água, do ozônio e a saturação dos aerossóis presentes na atmosfera terrestre e estudar os seus efeitos na transmissão da radiação solar. Alguns modelos tentam reproduzir esta atenuação calculando o espectro solar que chega a superfície terrestre utilizando o espectro solar extraterrestre (AM0), os coeficientes espectrais de absorção moleculares e as concentrações ou características dos componentes opticamente ativos. Neste trabalho, utilizamos o modelo de transmissão atmosférica SPCTRAL2, criado por Bird e Riordan (1986), com o qual podemos determinar principalmente a concentração desses componentes, dependendo apenas da latitude, o número do dia do ano (calendário juliano) e a inclinação do local na superfície da terra. Neste processo utilizamos uma rotina para inverter analiticamente as equações do modelo para determinar as suas incógnitas: as concentrações do vapor de água (H_2O), do ozônio (O_3) e o tamanho e a saturação dos aerossóis, resultados que serão apresentados neste trabalho.

Referências:

BASTOS, I. T. S.; GUEDES, G. P.. Estudo dos efeitos da composição atmosférica na transmissão do espectro solar. In: XV Seminário de Iniciação Científica da UEFS, Feira de Santana, 2011.

BIRD, R. E.; RIODAN, C. Simple solar spectral model for direct and diffuse irradiance Heinemann, 2aed., 345p, 1986.

SOARES, A. E. B. A.. Método de inversão para determinação de concentrações de vapor d'água, ozônio e aerossóis na atmosfera, a partir de sinais de um radiômetro de LEDs, em tempo real. Universidade Federal da Bahia, MSc. diss., 2010

LECKNER, B., "The Spectral Distribution of Solar Radiation at the Earth's Surface- Elements of a Model", Solar Energy, Vol. 20, 1978, pp. 143-150."

Painel P029**Análise da Utilização de filtros de alumínio na técnica de edxrf para amostras biológicas**

Priscila Resmer, André Luiz Coelho Conceição, Sergei Anatolyevich Paschuk, Valeriy Denyak

UTFPR

Considerada a neoplasia que mais mata mulheres no Brasil, o câncer de mama, deve apresentar cerca de 52.680 novos casos no país em 2013 [1]. Pesquisadores tem associado a presença de neoplasia mamária com alterações nas concentrações de elementos como: Fe, Ca, Cu e Zn [2,3]. Neste sentido, a técnica de Fluorescência de raios X por dispersão de energia (ED-XRF) é a mais utilizada para tal caracterização elementar. No entanto, as incertezas relacionadas às concentrações elementares analisados por ED-XRF são fortemente dependentes do padrão de calibração e do feixe de raios X. Uma vez que o padrão de calibração fornecido pelo fabricante foi validado, focamos nosso estudo na análise do perfil de emissão do tubo de raios X. Assim, foi analisado o uso de filtros de alumínio de diversas espessuras na saída do tubo de raios X, pertencente ao Laboratório de Física Nuclear Aplicada da Universidade Tecnológica Federal do Paraná em Curitiba, a fim de avaliar a incerteza relacionada à concentração daqueles elementos em biópsias de neoplasias mamárias em decorrência da modificação do espectro de excitação da amostra. Uma amostra de tecido mamário neoplásico foi submetida à técnica de EDXRF, sem filtro, e então com filtro de 0,25mm; 0,50mm; 0,75mm; 1mm e 1,25mm na saída do tubo de raios X, de modo a modificar o espectro de excitação da amostra. Para avaliar a espectroscopia da maneira mais fidedigna considerou-se o cálculo de incerteza que este pico representava no espectro. Resultados preliminares mostraram que para o Fe a não utilização de filtros, e, o uso de filtro de 0,25mm correspondem a maior precisão dos dados obtidos.

Painel P031

Estudo de Estados Ressonantes em acoplamentos não-adiabáticos usando a abordagem hidrodinâmica da Mecânica Quântica

Wanisson Silva Santana¹, Frederico Vasconcellos Prudente¹, Mirco Ragni²

¹ Instituto de Física - Universidade Federal da Bahia

² Departamento de Física - Universidade Estadual de Feira de Santana

Neste trabalho propomos um estudo da dinâmica de espalhamento de um pacote de onda dependente do tempo na perspectiva da Hidrodinâmica Quântica. Partindo da equação da continuidade para a densidade de probabilidade e sua equação de partícula associada, desejamos analisar efeitos de ressonância oriundos de acoplamentos não-adiabáticos em sistemas moleculares, bem como, calcular as energias e amplitudes associadas a tais estados de ressonância para alguns potenciais modelos, por exemplo, Oscilador Harmônico, Eckart, Van der Waals. Embora tenha angariado poucos adeptos, no que tange o seu caráter interpretativo, a formulação hidrodinâmica trás uma estrutura matemática que permite tratar diversos problemas de interesse, principalmente, em física e química. Por fazer um tratamento da densidade de probabilidade análogo ao da dinâmica dos fluídos, a hidrodinâmica quântica apresenta um caminho viável para abordar problemas de muitos corpos, principalmente, do ponto de vista computacional.

Painel P033

Ligação de um pósitron com átomos e moléculas apolares: Uma convergência entre teoria e experimento[1]

Paulo H. R. Amaral, José R. Mohallem

Laboratório de Átomos e Moléculas Especiais, Departamento de Física, ICEx, Universidade Federal de Minas Gerais, PO Box 702, 30123-970, Belo Horizonte, MG, Brasil

O problema de estados ligados de um pósitron com átomos e moléculas apolares é estudado por meio de um potencial de polarizabilidade adicionado ao potencial de núcleo duro repulsivo: $V = V_{rc} - \frac{\alpha r^{-4}}{2}$. Uma relação contínua entre o raio de corte e a polarizabilidade é identificada para alcanos, levando a uma expressão linear entre as energias de ligação experimentais observadas em [2] e a polarizabilidade. Também sugerimos um novo valor para as energias de ligação para os átomos I e Pt, assim como para outras moléculas com geometria semelhante a dos alcanos. O acordo experimental é excelente.

Financiado por CNPq e FAPEMIG.

[1] P. H. R. Amaral and J. R. Mohallem, Phys. Rev. A **86**, 042708 (2012)

[2] J. R. Danielson, J. A. Young and C. M. Surko, J. Phys. B **42**, 235203 (2009)

Painel P035

Magnetic Properties of Manganese (II) a structure derived from 2,6-dichlorobenzoic acid

Clebson dos Santos Cruz¹, Mario Reis¹, Diogo Esteves², Paula Brandão²,
Sandra S. Pedro¹, Julio Cesar G. Tedesco³

¹ Instituto de Física Universidade Federal Fluminense, Niterói-RJ, Brasil.

² Department of Chemistry-CICECO, University of Aveiro, Aveiro, Portugal.

³ Niels Bohr Institute, University of Copenhagen, Universitetsparken 5, 2100, Copenhagen, Denmark.

In recent years there have been great advances in the research of molecular magnets. Novel synthetic techniques in both metal-organic and soft inorganic chemistry are providing a wealth of new compounds to investigate. Manganese compounds are attracting considerable interest in recent years because of their magnetic behavior. In this context, we report the synthesis, crystal structure and magnetic properties of a novel Mn(II) compound which is a two-dimensional coordination polymer formed with molecular formula $[\text{Mn}_2(\mu - 2, 6 \text{ DCBA})(\mu_2 - \text{CH}_3\text{CO}_2)_2(2\text{H}_2\text{O})]$. Single crystal X-ray diffraction analysis reveals that compound crystallizes in space group $P2/c$ with lattice parameters $a = 10.1547(7) \text{ \AA}$, $b = 24.5829(2) \text{ \AA}$, $c = 12.6606(2) \text{ \AA}$, $\beta = 93.707(3)$, $V = 3153.9(3) \text{ \AA}^3$ and $Z = 4$. The crystal structure consists in layers of composition $[\text{Mn}_2(\mu - 2, 6 \text{ DCBA})(\mu_2 - \text{CH}_3\text{CO}_2)_2(2\text{H}_2\text{O})]_\infty$ separated by two water molecules. Magnetically, the ions are arranged in a zig-zag chain, wherein a trimeric structure is repeated periodically along the chain. The magnetic properties of the compound have been studied in detail under variable temperatures. The experimental results suggests that the complex has an antiferromagnetic overall character. Susceptibility measurements at high temperature follow the Curie-Weiss Law, as expected from magnetically isolated ions. The effective moment obtained is consistent with the literature for systems with Mn isolated ions in octahedral symmetry.

Painel P037

Implantação de um Feixe de Pósitrons na UFJF

Adriana N. de Souza, Maria Cristina A. Lopes

Departamento de Física - ICE, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora, Minas Gerais, Brasil

Neste trabalho reportamos o desenvolvimento de um feixe de pósitrons que será associado ao aparelho de medidas da UFJF de Seções de Choque Totais do espalhamento de elétrons por moléculas, envolvendo uma tecnologia ainda não existente no país. Este aparato possibilitará realizar novos estudos fundamentais, possibilitando a utilização tanto de elétrons quanto feixe de pósitrons, o que permitirá o aprofundamento do estudo da físico-química envolvida no processo de interação de elétrons e pósitrons com a matéria. Diversas atividades já foram desenvolvidas no LEAM voltadas a construção de um feixe de pósitrons eletrostático e metodologia de trabalho. O feixe de pósitrons foi instalado em uma câmara de alto vácuo, revestida por mu-metal, bombeada por uma bomba turbomolecular, com capacidade de bombeamento de 600 l/s e uma bomba mecânica de 28 m³/h. Pósitrons emitidos por uma fonte ²²Na com atividade de 1,5 mCi, são termalizados por um moderador de tungstênio, extraídos e focalizados na entrada de um analisador 127°. Este analisador não tem a finalidade de selecionar a energia de feixe de pósitrons, mas de desviar os pósitrons moderados da trajetória do feixe emitido pela capsula de ²²Na. Após passarem pelo analisador, os pósitrons passam por um novo conjunto de lentes aceleradoras que focalizam, colimam e definem a energia de impacto do feixe sobre o alvo a ser estudado. Estão sendo realizados no momento os testes iniciais da eficiência do moderador. Devido à baixa atividade da fonte, os pósitrons transmitidos pela câmara de espalhamento, com e sem gás, serão detectados por um multiplicador de elétrons e o sinal gerado será tratado por uma eletrônica usual de contagem de pulsos rápidos e registrados por uma contadora.

Agradecemos pelo suporte financeiro à FAPEMIG, CNPq, FINEP, CAPES.

Painel P039

Alterações na Intensidade de Fluorescência de Plantas de Soja Tratadas com Nanopartículas de Prata

William F. Falco, Joelson Fernandes, Bruno C. A. Pontim, Anderson R. L. Caires

Universidade Federal da Grande Dourados

Devido à crescente aplicação de materiais nanoparticulados em diversos setores da indústria, comércio e ciência, faz-se necessária a discussão sobre os impactos que tais materiais podem provocar no meio ambiente. Neste contexto, a espectroscopia de fluorescência induzida a laser foi usada para detectar a fluorescência de folhas e frutos de plantas de soja tratadas com nanopartículas de prata (AgNPs), usando um espectrofluorímetro portátil composto por dois laser de excitação (405 e 532 nm), um monocromador (USB 2000-FL - Ocean Optics), uma fibra óptica do tipo Y e um laptop. Foram analisados três grupos de amostras: plantas livres de nanopartículas (SN), que foi usado como grupo controle; plantas nas quais nanopartículas foram inoculadas nas sementes antes do plantio (NS); e plantas nas quais as nanopartículas foram aplicadas diretamente sobre as folhas das plantas adultas (NF). Vinte plantas foram avaliadas por grupo e todas as medições foram efetuadas à temperatura ambiente. No tempo devido, foi realizada a colheita dos frutos e as medidas de fluorescência foram feitas em trinta sementes de cada grupo. Os resultados mostraram que as AgNPs induzem supressão na fluorescência da clorofila das plantas de soja, indicando que a interação entre luz e planta foi modificada na presença de nanopartículas metálicas. Além disso, os resultados também sugerem que as nanopartículas de prata foram capazes de translocar e acumular nas plantas de soja após a inoculação nas sementes, induzindo alterações na atividade fotossintética das plantas. Ambos os comprimentos de onda de excitação, 405 nm e 532 nm, foram capazes de detectar o efeito sobre a fluorescência da clorofila induzida pelas AgNPs. As análises realizadas nos frutos também apresentaram uma supressão na intensidade de fluorescência dos grupos submetidos ao tratamento com AgNPs, tanto para excitação em 405 nm quanto em 532 nm, sugerindo que as AgNPs foram capazes de se translocar pela planta até o fruto ou ainda provocar alterações que afetaram a planta como um todo, incluindo os frutos.

Painel P041**Propriedades Estruturais e Eletrônicas de Nanotubos $B_xC_yN_z$: Um Estudo por Primeiros Princípios**Rebeca Dourado¹, Sérgio Azevedo²¹ UNEB- Campus Xique-Xique-BA² UFPB

Materiais unidimensionais são promissores para serem usados como partes de dispositivos eletrônicos, e entre estes, os nanotubos de carbono (CNT) ocupam um lugar especial. Foi mostrado através de estudos teóricos e experimentais, que os nanotubos de carbono possuem propriedades eletrônicas que dependem apenas do seu diâmetro e da sua quiralidade [1]. Estes sistemas podem ser metais ou semicondutores unidimensionais, dependendo da geometria do tubo [1]. Mas, é possível modificar as propriedades eletrônicas dos nanotubos pela substituição de alguns átomos de carbono por heteroátomos [2], uma vez que a incorporação desses heteroátomos pode alterar a estrutura, a reatividade química, e as propriedades mecânicas dos nanotubos.

Realizamos um estudo *ab-initio* da estabilidade energética e da estrutura eletrônica de nanotubos $B_xC_yN_z$. Primeiramente consideramos o nanotubo de carbono zigzag e armchair puro, e fomos adicionando um anel de BN até a quantidade de dez anéis. Em seguida, partimos do nanotubo de carbono com um anel de BN, e fizemos um estudo em função do diâmetro. Encontramos que a presença do anel de BN pode interferir nas propriedades eletrônicas dos nanotubos, podendo provocar uma abertura ou o fechamento do gap, de acordo com a quiralidade, do número de anéis e do diâmetro do nanotubo.

Referências:

[1] SAITO, R.; FUJITA, M.; DRESSELHAUS, G.; DRESSELHAUS, M. S. Electronic structure of chiral graphene tubes. *Applied Physics Letters*, v. 60, p. 2204-2206, 1992.

[2] TERRONES, M. et al. New direction in nanotube science. *Materials Today*, v. 7, n. 10, p. 30-45, 2004.

Painel P043

**Caracterização do estado fundamental da dimethoxy curcumin.
Um estudo com campo de reação auto consistente**

Ramos, Tárcius, Canuto, Sylvio

Instituto de Física da USP

Efeitos de solventes nas propriedades espectroscópicas, estruturais e eletrônicas de moléculas e biomoléculas são um dos tópicos de maior atenção na físico-química atual. Estudamos modificações espectrais decorrentes da interação da molécula dimethoxy curcumin (DMC) com o meio solvente. Conhecida também como açafrão da terra, é um pigmento muito utilizado como estimulante aromático e tempero. Recentemente foram atribuídas ao DMC atividades farmacológicas como antioxidante e antitumoral. Os métodos tradicionais para tratar de efeitos de solvente são os modelos contínuos como o Campo de Reação Auto Consistente (SCRf) e os Modelos Contínuos Polarizáveis (PCM) [1]. Aparentemente, suas propriedades biológicas são potencializadas com absorção de radiação eletromagnética [2,3], na região do visível-ultravioleta, mais precisamente na região de 400 nm, cujo interesse por uma boa descrição tem sido crescente [4]. Entretanto sua maior característica experimental é o grande Stokes shift, ou seja, a diferença na frequência de absorção e emissão. A caracterização do estado fundamental estudada consiste no processo de simulação computacional de otimização da geometria, cálculo do momento de dipolo, do espectro de absorção visível-ultravioleta, população tautomérica e orbitais de interesse no processo de absorção. Estes cálculos consideraram a molécula em fase gasosa, em solvente apolar (ciclohexano) e em solvente polar (acetoneitrila).

Painel P045**Estudo conformacional da amilopectina no vácuo e com efeito de solvente implícito**

Daiani C. Leite, Paulo F. B. Gonçalves, Nadya P. da Silveira

Instituto de Química - UFRGS

O interesse estrutural na área de carboidratos tem crescido devido a importância desses estudos em relação à conformação e atividade biológica [1]. A amilopectina, carboidrato estudado neste trabalho, é um homopolissacarídeo encontrado no amido formado por unidades de α -D-glicose, conectadas por ligações $\alpha(1,4)$ e $\alpha(1,6)$, sendo o ponto de ramificação atualmente investigado como um pentassacarídeo [2]. Este estudo consistiu em estimar uma geometria satisfatória do carboidrato para posterior avaliação do efeito do solvente. Todos os cálculos foram realizados no programa Gaussian 09 [3] (nível de teoria DFT). A otimização foi conduzida inicialmente com o estudo da α -D-glicose (sentido das hidroxilas e ângulo ω), passando para o estudo da maltose e isomaltose, responsáveis pela descrição das ligações $\alpha(1,4)$ (ângulos diedros Φ/Ψ) e $\alpha(1,6)$ (ângulos diedros $\Phi/\Psi/\Omega$) respectivamente, os quais não serão detalhados neste trabalho. Para a otimização (cálculos no vácuo e com efeito de solvente) foi utilizado o funcional B3LYP [4] e conjuntos de base 6-31G(d), 6-31G(d,p) e 6-311++G(d,p). Para os cálculos com efeito de solvente foi utilizado o Modelo do Contínuo Polarizável [5] (PCM) e a mistura de solventes DMSO/H₂O baseado em estudo experimental de solubilização da amilopectina ($\epsilon=49,9$). Os resultados demonstram que com o aumento significativo do conjunto de base há diminuição da energia do sistema. A inclusão da função p aos átomos leves auxilia na estabilização energética ao melhorar a descrição das interações de ligação enquanto as funções difusas ajudam a descrever as interações de longa distância. O ângulo ζ $\alpha(1,4)$ possui valores similares aqueles encontrados para a maltose devido à manifestação do efeito exo-anomérico. Da mesma forma é observada similaridade no ângulo Ψ $\alpha(1,4)$, pois neste ângulo as ligações de hidrogênio formadas são melhor descritas. Devido ao número de hidroxilas presentes na amilopectina e conseqüentemente ao elevado momento dipolar da molécula o efeito do solvente causa uma estabilização energética do sistema.

Referências:

- [1] Cocinero, E. J.; Lesarri, A.; Ecija, P.; et al. *Journal of the American Chemical Society* 2013, 135 (7), 2845-2852.
- [2] Perez, S.; Bertoft, E. *Starch-Starke* 2010, 62 (8), 389-420.
- [3] Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; et al. *Gaussian 09, A.1*; Gaussian, Inc., Wallingford CT: 2009.
- [4] Becke, A. D. *Journal of Chemical Physics* 1993, 98 (2), 1372-1377.
- [5] Cammi, R.; Tomasi, J. *Journal of Computational Chemistry* 1995, 16 (12), 1449-1458.

Painel P047**Avaliação dos sítios de coordenação e das frequências vibracionais da amilopectina**

Daiani C. Leite, Paulo F. B. Gonçalves, Nadya P. da Silveira

Instituto de Química - UFRGS

Os carboidratos compõem a classe de biomoléculas mais abundante encontrada, conhecidos por apresentar uma variedade de funções. A amilopectina, carboidrato estudado neste trabalho e um dos componentes do amido, desperta grande interesse científico, pois, através dos grupos hidroxilas presentes em sua estrutura ramificada, pode interagir com outras espécies [1]. Este estudo consistiu na avaliação dos valores das cargas parciais para estimar possíveis sítios de interação com metais, visto o interesse crescente em polímeros quelantes, além de produzir um espectro vibracional teórico e correlacioná-lo com o experimental, este produzido em estudos anteriores. Todos os cálculos foram realizados no programa Gaussian 09 [2] utilizando nível de teoria DFT. Para o estudo dos possíveis sítios de coordenação da amilopectina foram realizados cálculos de cargas parciais empregando o funcional B3LYP [3] e conjunto de base 6-31G(d,p) utilizando o método ChelpG [4]. As frequências vibracionais teóricas foram obtidas com o funcional B3LYP e conjunto de base 6-31G(d,p). De acordo com os resultados obtidos observa-se que os átomos de oxigênio O2 e O3 possuem maior densidade eletrônica quando comparados aos outros átomos de oxigênio, tornando-os prováveis ligantes preferenciais na coordenação com íons metálicos. Essa seletividade pode ser atribuída aos efeitos estéricos e conformacionais da molécula, assim como à reatividade das hidroxilas [5]. De fato, os átomos de oxigênio ligados aos átomos de carbono C1, C4 e C6 da amilopectina estão em sua maioria participando das ligações glicosídicas, deixando evidente a atividade das hidroxilas ligadas aos carbonos C2 e C3 na interação com outras espécies. Os valores das frequências encontradas teoricamente podem ser considerados bastante próximos daquelas encontradas experimentalmente. O que pode ser destacado aqui é a descrição das ligações de hidrogênio, da hidroxila e do estiramento da ligação C–OH, muito importantes na identificação de um carboidrato.

Referências:

- [1] Ciesielski, W.; Tomasik, P. *Journal of Inorganic Biochemistry* 2004, 98 (12), 2039-2051.
- [2] Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; et al. *Gaussian 09, A.1*; Gaussian, Inc., Wallingford CT: 2009.
- [3] Becke, A. D. *Journal of Chemical Physics* 1993, 98 (2), 1372-1377.
- [4] Breneman, C. M.; Wiberg, K. B. *Journal of Computational Chemistry* 1990, 11 (3), 361-373.
- [5] Damager, I.; Engelsen, S. B.; Blennow, A.; et al. *Chemical Reviews* 2010, 110 (4), 2049-2080.

Painel P049

Dinâmica de Campos Térmicos e Sistemas Atômicos e Moleculares II: sobre uma generalização do Teorema de Gell-Mann e Low

Caio Guimarães Ressureição, Maria das Graças R. Martins, José David M. Vianna

Instituto de Física - UFBA

Há na literatura diversos procedimentos para introduzir a temperatura na teoria quântica. Uma dessas formulações, conhecida como Dinâmica de Campos Térmicos (Thermofield Dynamics), foi desenvolvida por Umezawa e Takahashi com desdobramentos algébricos realizados por Fernandes, Khanna, Santana e Vianna, e vem recebendo atenção em várias aplicações físicas. Nessa formulação a ideia principal é expressar a média estatística de um observável \hat{A} como o valor esperado de \hat{A} em um estado de vácuo dependente da temperatura. Para isto são usados dois elementos básicos: uma duplicação dos graus de liberdade do sistema em estudo com base em regras específicas de conjugação e as transformações canônicas de Bogoliubov. Visando a aplicação da Dinâmica de Campos Térmicos (DCT), a sistemas de muitos elétrons (átomos e moléculas) em trabalhos anteriores desenvolvemos com essa formulação uma teoria de campo médio para férmions e bósons. No presente trabalho, analisamos e desenvolvemos com a DCT uma possível generalização do teorema de Gell-Mann e Low, de forma a estabelecer, à temperaturas finitas, uma relação entre o estado fundamental do sistema interagente com o estado fundamental não interagente.

F. C. Khanna, A. P. C. Malbouisson, J. M. C. Malbouisson and A. E. Santana, Thermal Quantum Field Theory Algebraic Aspects and Applications, World Scientific (2009).

A. E. Santana, A. M. Neto, J. D. M. Vianna and F. C. Khanna, Physica A 280, 405 (2001).

Painel P051**Basis set with core-valence relativistic correction for elements of the third row (K-Kr).
Applications in calculations of molecular properties.**

D. E. Vargas*, G. K. S. Brito, P. J. P. de Oliveira

Federal Institute of Science and Technology of Espírito Santo, Cachoeiro de Itapemirim, Brazil.

* e-mail: douglasvargas@hotmail.com

It is well known in the scientific community that relativistic effects are important in calculations of molecular properties from the elements of the third row of the periodic table (K - Kr). We construct basis set of quadruple zeta quality with relativistic correction that include the effects of electron correlation in the region of the core. The sets were generated from the QZP basis set [1] and were designated as CQZP-DKH. The term DKH is used because the Hamiltonian scalar relativistic Douglas-Kroll-Hess was used to solve the Schrödinger equation. The relativistic correction was made through of coefficients recontraction of the CQZP basis set. For the construction of CQZP-DKH set, we used as a criterion the following equation:

$$E_c(\text{core}) = E_c(\text{all electrons}) - E_c(\text{valence}).$$

Where $E_c(\text{core})$ is the core correlation energy, $E_c(\text{all electrons})$ is the all electrons correlation energy and $E_c(\text{valence})$ is the valence correlation energy. The effects of electron correlation in the core are relevant when high accuracy is important and the property to be calculated depends of a good description in the nuclear region. Examples include: The quest for a highly accurate molecular geometry and chemical accuracy of thermochemical properties [2]. The work is in the generation stage of the basis set and coefficients and the exponents that have been obtained are showing good performance in describing the relativistic effects and also the core correlation energy at the molecular environment. All calculations were performed with the program Orca and the Mathematica program was used in the optimization process.

Acknowledgments: This work was supported by FAPES and IFES.

References:

- [1] G. Camiletti, S. F. Machado, and F. E. Jorge, Gaussian basis set of double zeta quality for atoms K through Kr: Application in DFT calculations of molecular properties, *J. Comp. Chem.* 29 (2008) 2434.
- [2] K. A. Peterson, T. H. Dunning Jr., Accurate correlation consistent basis sets for molecular core; valence correlation effects: The second row atoms Al-Ar, and the first row atoms B-Ne revisited, *J. Chem. Phys.* 117 (2002) 10548.

Painel P053**Electronic circular dichroism of chiral alkenes: B3LYP and CAM-B3LYP calculations**

R. N. Suave, F. E. Jorge, Sara S. Jorge

Departamento de Física, Universidade Federal do Espírito Santo

Time-dependent density functional theory (TDDFT) calculations of electronic circular dichroism (ECD) are widely used to determine absolute configurations (ACs) of chiral molecules. Two very popular DFT exchange-correlation functionals, one hybrid (B3LYP) and one long-range corrected (CAM-B3LYP), along with a hierarchical sequence of augmented basis sets of double, triple, and quadruple zeta valence qualities plus polarization functions (AXZP, X = D, T, and Q) [1,2] for the elements from H to Ar are here investigated, and the ECD spectra are predicted for eight alkenes and compared to gas-phase experimental spectra [3]. We have chosen these alkenes because of the available experimental data and because these molecules are conformationally rigid (cf. Ref. [4]), i.e., at room temperature they essentially exist exclusively in one conformation. This avoids the complications which ensue in the case of conformationally flexible molecules. Emphasis is given to the predicted ECD spectra dependence with respect to the basis set size and to the used functional. Little variation in predicted ECD spectra is found with the basis set size enlargement, but the sensitivity to the functional is greater. Good agreement is obtained lone with the CAM-B3LYP functional, leading to the conclusion that TDDFT calculations of ECD spectra can routinely provide reliable ACs if and only if an appropriate functional is used. It should be mentioned here that it is the first time that a hierarchical sequence of basis set is used to determine ACs of such systems.

References

- [1] A. Canal Neto, E.P. Muniz, R. Centoducatte, and F.E. Jorge, *J. Mol. Struct. (Theochem)* 718 (2005) 219.
- [2] P.A. Fantin, P.L. Barbieri, A. Canal Neto, and F.E. Jorge, *J. Mol. Struct. (Theochem)* 810 (2007) 103.
- [3] A. F. Drake and S. F. Mason, *Tetrahedron* 33 (1977) 937.
- [4] D. M. McCann, P. J. Stephens, *J. Org. Chem.* 71 (2006) 6074.

Painel P055**Cálculos *MRHF*CI para os sistemas Be e LiH utilizando as bases double-zeta padrão e novas bases double-zeta obtidas através do método *HF^{Gauss}-GSA***

Micael Dias de Andrade¹, Antonio Moreira de Cerqueira Sobrinho¹,
Marco Antônio Chaer Nascimento², Luiz Augusto Carvalho Malbouisson¹

¹ Instituto de Física da UFBA

² Instituto de Química da UFRJ

Novas bases atômicas mínimas para átomos da primeira linha da Tabela Periódica foram construídas em trabalho anterior utilizando o método *HF^{Gauss}-GSA* [1]. Essas bases foram testadas calculando a energia do estado fundamental de algumas moléculas em dois níveis de aproximação, Hartree-Fock (*HF*) e Interação de Configurações (*CI*). Em quase todos os casos, obteve-se energias melhores do que aquelas obtidas utilizando as bases *STO-3G* e *STO-6G*. Além disso foram realizados cálculos Multi-Referência Hartree-Fock *CI* (*MRHF*CI) [2] fornecendo o valor do momento de dipolo elétrico permanente em concordância com o valor experimental. Neste trabalho, otimizando o funcional *HF* do átomo com a mesma metodologia *HF^{Gauss}-GSA*, foram geradas novas bases Double-Zeta (*DZnova*) para os átomos Li e Be. Foram realizados cálculos *MRHF*CI para o Be com as bases *DZ*, *TZ* e *DZp* padrão e *DZnova* e para o LiH com a base *DZnova*. Com um reduzido número de configurações nas bases *MRHF*, foi possível em todos os casos obter energias próximas do cálculo *CI* completo e para o LiH, além da energia, foi possível encontrar o valor do momento de dipolo elétrico permanente em concordância com o valor experimental.

Referências:

[1] M. D. de Andrade, M. A. C. Nascimento, K. C. Mundim, A. M. C. Sobrinho e L. A. C. Malbouisson. Int. Journal of Quantum Chemistry, 108 (2008) 2486;

[2] A. M. C. Sobrinho; M. A. C. Nascimento; M. D. de Andrade; L. A. C. Malbouisson; Int. J. Quantum Chem. 108 (2008) 2595;

Palestras Convidadas – 10/12/2013

Palestra Convidada PC05

O Papel da Espectroscopia na Astronomia

Paulo César da Rocha Poppe

Departamento de Física – Universidade Estadual de Feira de Santana

O estudo da luz através de suas cores componentes que surgem quando esta atravessa um prisma ou uma rede de difração, vem sendo aplicado intensamente na Astronomia desde o início do Séc. XIX. No entanto, não podemos esquecer, historicamente, o resultado experimental obtido por Isaac Newton na segunda metade do Séc. XVII, que, ao passar a luz branca (como a luz do Sol) por um prisma e decompô-la em diferentes cores, obteve um espectro (ou uma sequência de cores) como o do arco-iris. Desse modo, quase toda informação sobre as propriedades físicas e químicas dos objetos astronômicos (planetas, cometas, estrelas, galáxias, etc.) podem ser obtidas direta ou indiretamente de seus espectros, principalmente suas temperaturas, densidades e composições.

A Astronomia Observacional, que abarca estudos em todo o espectro eletromagnético e que se ocupa de obter tais informações, pode ser pontuada em três grandes momentos históricos: a invenção da luneta/telescópio, o emprego da fotografia e o uso da espectroscopia. Estima-se que a instrumentação associada a esta última técnica (espectrógrafo) tem contribuído mais (cerca de 85%) do qualquer outro acessório (fotômetro, polarímetro, coronógrafo, etc.) empregado pelos astrônomos.

Nesta palestra, como contribuição do MP-ASTRO (Mestrado Profissional em Astronomia) e do G.A.T.O. (Grupo de Astronomia Teórica e Observacional), iremos abordar a importância da espectroscopia para o avanço dos resultados científicos nas diversas áreas da Astronomia, apresentando o desenvolvimento desta técnica e o seu emprego nos principais telescópios usados pela comunidade astronômica. Ainda, iremos exemplificar os procedimentos necessários para uma observação espectroscópica de galáxias no óptico (dentro do projeto observacional de longo prazo realizado no Observatório do Pico dos Dias – Laboratório Nacional de Astrofísica - MCTI), além dos passos necessários para a redução IRAF (Image Reduction and Analysis Facility) do espectro bruto, i.e., obtenção do espectro final devidamente calibrado em fluxo e em comprimento de onda. Finalmente, uma rápida discussão sobre a ciência que pode ser associada (ora desenvolvida pelo nosso grupo) também será apresentada neste trabalho.

Palestra Convidada PC06

Light scattering from ordered and disordered atomic clouds

Ph. W. Courteille

Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo

The scattering of light from macroscopic material objects can be described in terms of Maxwell's equations solved for a given set of boundary conditions. In contrast, for point-like targets such as atoms in a dilute gas, the scattering is understood in terms of Bohr's atomic model. Since any macroscopic object is formed from elementary scatterers (atoms or molecules), it is an interesting question how the scatterers must cooperate to produce macroscopic scattering phenomena such as refraction or Mie scattering. The cooperation can be studied in confined cold atomic clouds, which exhibit micro- as well as macroscopic scattering features. We will discuss a microscopic approach to cooperative scattering able to grasp apparently contradictory features of both, micro- and macroscopic scattering. In a regime called single-photon superradiance it reproduces Rayleigh, Bragg or Mie scattering, in a regime dominated by multiple scattering it predicts coherent backscattering or the formation of photonic band structures. In ultracold clouds, correlations between subsequent scattering processes can even cause collective instabilities called matter wave superradiance and collective atomic recoil lasing depending on whether the correlations are sustained by long-lived matter wave coherences or mediated by long-lived modes of a high finesse ring cavity. We support the validity of our model by experimental observations.

Palestra Convidada PC07

Low energy electron scattering data for chemical plasma treatment of biomass

Marco A. P. Lima^{1,*}, E. M. de Oliveira¹, R. F. da Costa²,
S. d'A Sanchez³, M. H. F. Bettega³, M. T. do N. Varella⁴

¹ Instituto de Física “Gleb Wataghin”, Universidade Estadual de Campinas, 13083-859
Campinas, São Paulo, Brazil

² Centro de Ciências Naturais e Humanas, Universidade Federal do ABC, 09210-170
Santo André, São Paulo, Brazil

³ Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná, 81531-990
Curitiba, Paraná, Brazil

⁴ Instituto de Física, Universidade de São Paulo, 05315-970
São Paulo, São Paulo, Brazil.
e-mail: maplima@ifi.unicamp.br

Replacing fossil fuels with biofuels from renewable sources is an important goal for reducing greenhouse gas emissions. Many countries are already using few percent of ethanol in the gasoline and few of them, with more aggressive programs, have developed flex fuel engines that can run with any mixture of gasoline and ethanol. An important point is how to produce ethanol in a sustainable way and with which technology? Biomass is a good candidate since it has cellulose and hemicellulose as source of sugars. In order to liberate these sugars for fermentation, it is important to learn how to separate the main components. Chemical routes (acid treatment) and biological routes (enzymatic hydrolysis) are combined and used for these purposes. Atmospheric plasmas can be useful for attacking the biomass in a controlled manner and low energy electrons may have an important role in the process. Recently we have been studying the interaction of electrons with lignin subunits[1] (phenol, guaiacol, p-coumaryl alcohol), cellulose components[2,3], β -D-glucose and cellobiose (β (1 - 4) linked glucose dimer) and hemicellulose components [3] (β -D-xylose). We also obtained results for the amylose subunits α -D-glucose and maltose (α (1 - 4) linked glucose dimer). Altogether, the resonance spectra of lignin, cellulose and hemicellulose components establish a physical/chemical basis for electron-induced biomass pretreatment that could be applied to biofuel production. In my talk I will give a progress report on this matter.

References

- [1] E. M. de Oliveira, S. d'A Sanchez, M. H. F. Bettega, A. P. P. Natalense, M. A. P. Lima, M. T. do N. Varella, Phys. Rev. A 86, 020701 (R) (2012).
- [2] R. F. da Costa, M. H. F. Bettega, M. T. do N. Varella, M. A. P. Lima, J. Chem. Phys. 132, 124309 (2010).
- [3] E. M. de Oliveira, R. F. da Costa, S. d'A Sanchez, A. P. P. Natalense, M. H. F. Bettega, M. A. P. Lima, M. T. do N. Varella, Phys. Chem. Chem. Phys. 15, 1682 (2013).

Comunicações Orais – 10/12/2013

Comunicação Oral CO08

In Vivo Analysis of Glyphosate's Effects on Glyphosate-Tolerant Soybean Plants By Using Chlorophyll a Fluorescence

Anderson R. L. Caires^{1,*}, Joelson Ferandes¹, William F. Falco¹, Samuel L. Oliveira²

¹ Grupo de Óptica Aplicada, Universidade Federal da Grande Dourados, Dourados, MS, Brasil

² Grupo de Óptica e Fotônica, Universidade Federal de Mato Grosso do Sul, Campo Grande, MS, Brasil

* e-mail: andersoncaires@ufgd.edu.br

Glyphosate is a non-selective herbicide widely used to control weeds prior to crop emergence. The large-scale use of glyphosate has raised many questions about its possible damage to crops as well as environmental impact. In the present investigation, Laser-Induced Fluorescence (LIF) was applied, by an in vivo analysis using a portable device, to determine changes in chlorophyll a fluorescence induced by glyphosate in three varieties of glyphosate-resistant soybean plants. The results revealed that all plants treated with the herbicide presented a strong suppression of chlorophyll a fluorescence which was glyphosate-content dependent¹. In addition, the fluorescence ratio in the red and far-red region (685 nm/735 nm) suggests that glyphosate application lead to the chlorophyll degradation. The data also indicated that the use of glyphosate, even at concentrations recommended by the manufacturer, suppressed chlorophyll a fluorescence and changed the functioning of the photosynthetic apparatus¹. In summary, this study shows that fluorescence spectroscopy can early detect alterations in the plant response induced by glyphosate, suggesting that a fluorescence-based method may be used as a rapid, accurate, and portable sensor to identify excessive use of this herbicide.

References

[1] J. Ferandes, W.F. Falco, S.L. Oliveira, A.R.L. Caires, Applied Optics 2013, 52, pp. 3004-3011.

Comunicação Oral CO09

Espalhamento de pósitrons de baixa energia por NH_3

Wagner Tenfen, Leidi Katia Giehl

Universidade Federal da Fronteira Sul

O processo colisional de pósitrons com moléculas é um objeto interessante de estudo, e difere dos estudos de colisão de elétrons já que o pósitron espalhado é distinguível dos elétrons moleculares. Esta diferença é muito importante, pois não há necessidade de considerar interações de troca quando pósitrons estão interagindo com moléculas. Uma outra diferença é a forma funcional do potencial de polarização, e alguns modelos para explicar esta interação estão disponíveis na literatura. Já foi verificado que o modelo PCOP [1] resulta em seções de choque diferenciais e integrais confiáveis para pósitrons colidindo com moléculas polares, por isso é adequado para representar a polarização de moléculas de NH_3 na presença de pósitrons de baixa energia. Uma vez que o potencial de interação na aproximação estático mais polarização, aplicamos o método de frações continuadas [2] a fim de obter seções de choque elásticas na faixa de energia entre 0,1 eV e 10,0 eV.

[1] F. Arretche *et al* 2010 *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B* <http://dx.doi.org/10.1016/j.nimb.2009.10.187>**268** 178

[2] J. Horáček and T. Sasakawa 1983 *Phys. Rev. A* <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.28.2151>**28** 2151

Comunicação Oral CO10

Uma diferente descrição da interação entre o íon Eu^{3+} e seus primeiros vizinhos.

Yuri A. R. Oliveira^{1,*}, Heveson L. L. Matos¹, Adelmo S. Souza², Marcos A. Couto dos Santos¹

¹ Departamento de Física - Universidade Federal de Sergipe - São Cristóvão - SE - Brasil

² Departamento de Química Fundamental - Universidade Federal de Pernambuco - Recife - PE - Brasil

* e-mail: yuri.fisica.ufs@gmail.com

Os compostos Eu:LiYF_4 e $\text{Eu}(\text{btfa})_3(4,4'\text{-bipy})(\text{EtOH})$ estão sendo revisitados através do método dos primeiros vizinhos equivalentes (MENN) e pelo modelo de recobrimento simples (SOM). Esta revisão tem como finalidade sugerir uma comparação entre a simetria local do európio em complexos contendo β -dicetonas e a simetria S_4 no Eu:LiYF_4 . Sugerindo também que a ligação iônica em sistemas contendo lantanídeos seja tratada como uma pura atração eletrostática. O desdobramento do nível 7F_1 do európio foi satisfatoriamente previsto em ambos os casos por conjuntos de fatores de carga muito similares. De maneira que esta similaridade indica que o íon lantanídeo trata as espécies químicas (N, O e F) em sua primeira vizinhança apenas como cargas negativas.

Comunicação Oral CO11

Fragmentation and ionic desorption from condensed pyrimidine due to electron impact: relevance to solid state astrochemistry

Fabio de Almeida Ribeiro¹, Guilherme Camelier Almeida¹,
Wania Wolff², Heloisa Boechat-Roberty³, Maria Luiza Rocco¹

¹ Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil

² Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil

³ Observatório do Valongo, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil

Pyrimidine (1,3-diazine) is a heterocyclic compound of high biological importance since cytosine, thymine and uracil nucleobases are pyrimidine derivatives. Tracers of uracil have been detected in the Murchison meteorite what suggest that these molecules might be of interstellar origin. Though no pyrimidine has been detected in the interstellar space yet, it may be of low abundance and perhaps be incorporated in ice mantles covering dust grains. When exposed to the stellar radiation field (e.g. photons, electrons and charged particles), several surface processes of considerable importance may be induced. In this work, the impact of electrons on ice mantle surfaces were simulated employing electron beams with variable impact energy ($1700 \text{ eV} \leq E \leq 3000 \text{ eV}$) colliding in a pyrimidine film condensed *in situ* on a 152 K cooled metallic substrate inside an ultra-high vacuum chamber. The Electron Stimulated Ion Desorption (ESID) technique coupled to Time-of-Flight Mass Spectrometry (TOF-MS) was used to analyze the positively charged ionic fragments which desorb from the surface at each impact energy. The most abundant ions desorbed are H^+ and H_2^+ , although several other fragments have been identified. The fragmentation pattern of pyrimidine is characterized by six distinct regions on its mass spectra, containing ionic fragments of one to six members of the pyrimidine ring. The production of molecular ionic fragments, such as HCN^+ , C_2H_4^+ , N_2H^+ and $\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2^+$, is believed to be caused by the creation of inner-shell holes, followed by electronic relaxation via Auger process and through ionization of valence shell electrons by secondary electrons. Metastable ions were also assigned in comparison with gas phase photofragmentation data. Desorbed ions observed in this experiment can act as markers of the presence of pyrimidine in molecular clouds or in protoplanetary discs and their desorption yields per electron impact contribute to chemical evolution models in different astrophysical objects.

Palestra Convidada – 10/12/2013

Palestra Convidada PC08

Pentes de Frequência: de Metrologia à Espectroscopia de Alta Resolução

Marcio H. Gonçalves de Miranda

Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco
e-mail: mhgm@df.ufpe.br

Pentes de frequência ultra estáveis tem contribuído de forma decisiva para o avanço de áreas como metrologia, física atômica e molecular. Como pentes de frequência unem alta precisão, alta potência por pulso e uma estrutura periódica de régua de frequência em um único laser, este sistema torna-se altamente desejável para diversas aplicações como medidas de frequências óticas, espectroscopia em átomos e moléculas, transferência e comparação de frequências entre relógios atômicos. Nesta apresentação falarei sobre o princípio de funcionamento de um pente de frequências, como estabilizá-lo e como realizar espectroscopia direta em átomos frios.

Comunicações Orais – 10/12/2013**Comunicação Oral CO12****Estrutura eletrônica do complexo *fac*-[ClRe(CO)₃(bipy)], empregando abordagens da Teoria do Funcional de Densidade**A. E. H. Machado¹, D. M. S. Araújo², A. O. Toledo Patrocínio²¹ Universidade Federal de Uberlândia, Instituto de Química - Laboratório de Fotoquímica e Ciência de Materiais.
Universidade Federal de Goiás, Campus Catalão, Departamento de Química.² Universidade Federal de Uberlândia, Instituto de Química - Laboratório de Fotoquímica e Ciência de Materiais.

A fotofísica/fotoquímica de complexos tricarbonil polipiridil Rênio (I) tem atraído atenção pela aplicação em diferentes campos tecnológicos. Estudos experimentais envolvendo diferentes complexos Re(I) polipiridila tem sido feitos de modo a estabelecer o papel dos ligantes sobre a estrutura eletrônica e propriedades espectrais desses compostos eletronicamente excitados, sobre a eficiência dos processos de transferência de energia e de elétrons. Apesar do sucesso das abordagens da química quântica (QQ) nesse campo, pouca contribuição tem sido feita. Nosso objetivo é aplicar abordagens QQ para correlacionar a estrutura eletrônica à natureza dos ligantes, contribuindo para a compreensão da fotofísica de complexos de Re(I), contribuindo no 'design' de derivados com características eletrônicas e espectrais melhoradas. A estrutura do complexo foi otimizada e as frequências vibracionais calculadas usando diferentes combinações entre funcionais DFT e conjuntos de bases atômicas, em cálculos SCRF=IEFPCM simulando a acetonitrila. Consideramos que a melhor combinação entre funcional e conjunto de bases atômicas para uma descrição adequada da estrutura eletrônica, seria a capaz de fornecer, em abordagem TDDFT, a melhor descrição do espectro eletrônico do complexo. A combinação entre o funcional M06 e as bases atômicas SARC-DKH, para o Re(I), e Def2-TZVPP para os demais átomos foi a que forneceu a melhor descrição. Constatou-se, por exemplo, que a banda de absorção de menor energia está relacionada à combinação entre uma transição MLCT (orbital d do Re(I) e Lmol⁻¹cm⁻¹ do ligante bipyridila (bipy)) e uma de transferência de carga envolvendo orbitais não ligantes do O e do Cl, e orbital π* do bipy, resultando em duas transições, uma HOMO→LUMO S₀→S₁ a 412,66 nm, de baixa probabilidade (f=0,0016), e outra a 393,55 nm, HOMO-1→LUMO, responsável pelo máximo observado, com ε = 4183 Lmol⁻¹cm⁻¹, (f=0,0600). A energia dessa transição é 5,35% menor que o valor experimental medido em acetonitrila (372,50 nm; ε = 3322 Lmol⁻¹cm⁻¹).

CNPq, FAPEMIG, RQ-MG (FAPEMIG/REDE-113/10), CAPES.

Comunicação Oral CO13

Estudo comparativo da fragmentação por fótons de moléculas isoeletrônicas de interesse biológico

Manuela Souza Arruda^{1,2}, Luiz Antonio Vieira Mendes², Aline Medina²,
Josenilton do Nascimento de Souza², Ricardo dos Reis Teixeira Marinho²
Frederico Vasconcellos Prudente²

¹ Universidade Federal do Recôncavo da Bahia

² Universidade Federal da Bahia

Colisões de fótons com moléculas podem ter diversas aplicações como, por exemplo: na astrofísica, em estudos relacionados à evolução físico-química de espécies moleculares presentes nos primórdios da existência do universo. Moléculas contendo átomos de carbono, oxigênio, nitrogênio e hidrogênio têm sido de especial interesse no estudo da evolução físico-química do universo. Desta maneira, no presente trabalho, fazemos um estudo comparativo da interação de fótons na região do UVV e raio-X moles com moléculas isoeletrônicas de interesse biológico: ácido fórmico (HCOOH), formamida (HCONH₂) e acetaldeído (HCOCH₃). Em particular, acrescentamos informações experimentais e teóricas relacionadas ao entendimento dos processos de fotofragmentação destas moléculas em fase gasosa devido à ionização de elétrons da valência e do caroço. Os espectros experimentais foram obtidos no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), nas linhas de luz TGM e SGM, com o auxílio de um espectrômetro de massa por tempo voo e utilizando a técnica de coincidência entre elétrons e íons, PEPICO. Fazemos, também, uma análise teórica dos processos de fotofragmentação e fotoionização, utilizando a Teoria do Funcional da Densidade e a Teoria do Funcional da Densidade Dependente do Tempo.

Comunicação Oral CO14

Cross sections for electron scattering from zwitterionic glycine: incorporating solvents effects

Josué S. dos Santos¹, Márcio T. do N. Varella

¹ Universidade Federal do ABC, Centro de Ciências Naturais e Humanas, Rua Santa Adélia, 166, 09210-170, Santo André, São Paulo, Brazil

² Instituto de Física, Universidade de São Paulo, CP 66318, 05315-970, São Paulo, SP, Brazil

The fact that biologically relevant systems exist in solution is a clear limitation of gas-phase studies of biomolecules, and this drawback is particularly evident for aminoacids, since the neutral forms are usually more stable in the gas phase, while the zwitterionic forms are more stable in solution.

From the point of view of atomistic computer simulations, solvation effects are not trivially described in electron-molecule interactions. The difficulties arise from the computational effort required to account for the anion states and the explicit solvent molecules. In fact, since these anions are metastable, there is no well established methodology to address this problem. In this study we employ Monte Carlo simulations to obtain glycine-water clusters in the zwitterionic form, and the Schwinger Multichannel Method implemented with Pseudopotentials (SMCPP) to study the transient anion states of these clusters.

Sessão de Painéis Pares – 10/12/2013**Painel P002****Reaction Rate for $\text{CO}+\text{CO} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{C}$**

Patricia R. P. Barreto, Ana Claudia P. S. Cruz, Henrique O. Euclides

Laboratório Associado de Plasma, Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, São José dos Campos, SP, Brasil

The CO disproportionation reaction (Boudouard reaction), $\text{CO}+\text{CO} \rightarrow \text{CO}_2+\text{C}$ is one of key free carbon formation processes occurring both in high-temperature gas flows and in non-equilibrium electric discharges, there is two possibilities, one it occurs in the surface and the other one in the gas phase. This paper presents the gas phase reaction rate for $\text{CO}+\text{CO} \rightarrow \text{CO}_2+\text{C}$ obtained using transition state theory[1,2]. The calculation was developed at M06L/aug-cc-pVTZ, the activation energy for the forward direction is $158.1 \text{ kcal mol}^{-1}$ while in the reverse direction is only $1.3 \text{ kcal mol}^{-1}$. The original reaction rate has been modified to include the vibrational modes of reactants. Essenhigh[3] suggested high vibrational level of reactants has been necessary in order to achieve the products. Using the Dunham coefficient[4], the vibrational energy has been included in the calculation in order to compare with reference data for the title reaction.

References:

- [1]. P. R. P. Barreto, A. F. A. Vilela, R. Gargano, J Mol Struct (Theochem) 639, 2003, 167.
- [2]. P. R. P. Barreto, A. F. A. Vilela, R. Gargano, Int. J. Quantum Chem., 103, 2005, 685.
- [3]. K. A. Essenhigh, Y. G. Utkin, C. d Bernard, I. V. Adamovich, J. W. Rich, Chem, Phys, 330, 2006, 506.
- [4]. J. L. Dunham, Phys. Rev., 41, 1932, 721.

Painel P004

Estudo da dinâmica de absorção no espalhamento de partículas por barreiras de potencial: Tratamentos dependente e independente do tempo.

G. L. Zanin, F. Arretche

Departamento de Física, Universidade do Estado de Santa Catarina, 89223-100 Joinville, Santa Catarina, Brasil

O objetivo principal deste trabalho é estudar a dinâmica de absorção gerada por potenciais complexo sem Mecânica Quântica Não-Relativística. Para tais propósitos atacamos o problema via duas linhas de ação, potenciais pontuais e potenciais com uma largura finita no espaço. No caso de potenciais pontuais, estudamos o potencial delta de Dirac enquanto no contexto dos potenciais com largura finita estudamos dois potenciais-modelo, a saber, a barreira quadrada, representando potenciais com uma largura constante, e no segundo caso estudamos um potencial do tipo Eckart, representando os potenciais com largura variável no espaço. Para todos estes casos, comparamos as previsões geradas pelo modelo dependente do tempo com os tratamentos usuais apresentados na literatura para estados estacionários de espalhamento. Para todos estes casos, comparamos as previsões geradas pelo modelo dependente do tempo [A. Goldbert, H.M. Schey and J.L. Schwartz, AJP 35, 177 (1967), W. Elberfeld and M. Kleber, AJP 56, 154 (1988)] com os tratamentos usuais apresentados na literatura para estados estacionários de espalhamento [P. Molinàs-Mata and P. Molinàs-Mata, Phys. Rev. A 54, 2060 (1996), Z. Ahmed, Phys. Rev. A 47, 4761 (1993)].

Painel P006

Difusão de Póstrons de Baixa Energia em Gás Hélio Via Caminhadas Aleatórias.

E. P. Seidel¹, R. A. S. Zanon¹, F. Arretche²

¹ Departamento de Física, Universidade do Estado de Santa Catarina, 89223-100 Joinville, Santa Catarina, Brasil.

² Departamento de Física, Universidade Federal de Santa Catarina, 88040-900 Florianópolis, Santa Catarina, Brasil.

Neste trabalho, realizamos uma simulação, via caminhadas aleatórias, da difusão de póstrons em um meio gasoso formado por átomos de hélio. Por meio de tal simulação, estudamos por quanto tempo um póstron permanece "vivo" até aniquilar quando sua energia está abaixo do limiar de formação do positrônio. Consideramos a fonte de póstrons como sendo pontual. Com esta condição de trabalho, determinamos a distância média e o número médio de colisões que o póstron sofre enquanto termaliza com o meio gasoso com especial atenção para as consequências no espectro de aniquilação produzido.

Painel P008**Ionização e Fragmentação do CH₃CHO por Fótons, Prótons e Íons**

I. Prazeres¹, A. C. F. Santos², M. Arruda³,
F. V. Prudente¹, N. V. de Castro Faria⁴, A. Medina¹

¹ Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia, 40210-340 Salvador, BA, Brasil

² Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 21941-972 Rio de Janeiro, RJ, Brasil

³ Instituto de Física, Universidade Federal do Recôncavo da Bahia, 44.380-000 Cruz das Almas, BA, Brasil

⁴ Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 21941-972 Rio de Janeiro, RJ, Brasil

Do ponto de vista físico e químico, o estudo da origem da vida está relacionado com a formação de biomoléculas, como os ácidos nucleicos (DNA e RNA) e as proteínas. Uma hipótese para explicar a origem da vida sugere que as biomoléculas foram formadas no espaço pela recombinação de moléculas orgânicas mais simples submetidas a radiação e a colisões com partículas do vento solar, como prótons, elétrons e íons, e então trazidas para a Terra por meteoros e cometas. Assim, o estudo de moléculas pré-bióticas simples é de fundamental importância para entender a formação de moléculas orgânicas complexas. Esse trabalho é um estudo experimental de uma dessas moléculas pré-bióticas, o acetaldeído (CH₃CHO), visando obter a partir dos processos de ionização e fragmentação um melhor entendimento da dinâmica da formação dessa biomolécula. Apresentaremos os espectros resultantes da ionização e fragmentação do acetaldeído por fótons, prótons, Li⁺ e Li²⁺. As medidas com prótons e íons de Lítio foram obtidas no Laboratório de Colisões Atômicas e Moleculares da Universidade Federal do Rio de Janeiro (LaCAM-UFRJ) com energias que variam entre 200 eV e 2,0 MeV. Os feixes são gerados por uma fonte de íons SNICS-II e passam por um acelerador de 1,7 MV tipo Tandem 5SDH. Os fragmentos iônicos produzidos após a interação são analisados por um espectrômetro de tempo de voo (TOF) em coincidência com o projétil incidente. As medidas com fótons com energias de 10 eV a 22 eV foram previamente obtidas por nosso grupo no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS) com o auxílio de um espectrômetro de massa por tempo de voo e utilizando a técnica de coincidência entre elétrons e íons, PEPICO. Será apresentada uma comparação entre os espectros obtidos com os diferentes projéteis.

Referências:

- [1] Manuela S. Arruda, Ricardo R. T. Marinho, Angelo M. Maniero, Maria Suely P. Múndin, Alexandra Mocellin, Sergio Pilling, Arnaldo N. de Brito e Frederico V. Prudente, *J. Phys. Chem. A* 116, 6693 (2012).
- [2] K. F. Alcantara, W. Wolff, A. H. A. Gomes, L. Sigaud, S. Soriano, V. Oliveira, A. B. Rocha e A. C. F. Santos, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 44, 165205 (2011).

Este trabalho é financiado pelo CAPES, CNPq, UFBA e pelo acordo PROCAD/Casadinho.

Painel P010

A eletroinstabilidade da Guanina

Lucas Medeiros Cornetta, Márcio Teixeira do Nascimento Varella

IFUSP

A dissociação induzida pela captura eletrônica em biomoléculas e, em especial, em diferentes sítios de DNA tem sido alvo de muitos estudos teóricos e experimentais. No presente trabalho, apresentarei estudos envolvendo a captura eletrônica da guanina monofosfato (GMP) em fase gasosa, a análise da estabilidade do ânion, e perspectivas futuras do projeto.

Painel P012

A Influência do processo de dessorção atômica na dinâmica de carga de um MOT de Rb

I. M. Campestrini F. Arretche, A. L. Oliveira, R. A. S. Zanon

UDESC

O uso de armadilhas magneto-ópticas (MOT) na obtenção de amostras atômicas ultra frias, tem se tornado uma técnica de grande aplicação. Com o intuito de se aprimorar a eficiência destas armadilhas em se obter um grande número de átomos aprisionados e longos tempos de vida, a influência da luz de banda larga sobre os átomos aprisionados tem sido objeto de estudo do grupo. Tal influência se dá através do efeito de dessorção atômica induzida por luz, conhecido como LIAD, sendo pela primeira vez observado por Gozzini et al [1]. A partir deste, diversos estudos teóricos e experimentais para a dinâmica de LIAD vem sendo apresentados na literatura [2-5]. Desta forma, o nosso objetivo consiste no estudo de um modelo de LIAD, baseado nos modelos propostos por Zang et al[2] e Atutov et al [4], para a otimização do processos de carregamento em uma armadilha magneto-óptica de Rubídio, e com isto, num segundo momento, poder modelar os dados experimentais por nós obtidos.

[1] Gozzini A., Mango F., Xu J. H., Alzetta G., Maccarone F. and Bernheim R. A., Nuovo Cimento D, 15 (1993) 709.

[2] Zhang P., Li G., Zhang Y., Guo Y., Wang J. and Zhang T., Phys. Rev. A 80, 053420 (2009).

[3] Anderson B. P. and Kasevich M. A., Phys. Rev. A 63, 023404 (2001).

[4] Atutov S. N., Calabrese R., Guidi V., Mai B., Rudavets A. G., Scansani E. Tomassetti L., Biancalana V., Burchianti A., Marinelli C., Mariotti E., Moi L. and Veronesi S., Phys. Rev. A 67, 053401 (2003).

[5] Telles, G, Ishikawa T., Gibbs M. and Raman C., Phys. Rev. A 81, 032710 (2010).

Painel P014

Estudo dos canais de decaimento de estados excitados de valência em moléculas de dimetilsulfeto (DMS)

R. Tiedt¹, L. S. Farenzena¹,
M. T. Lee², I. Iga², M. G. P. Homem²

¹ Departamento de Física, UFSC, Florianópolis/ SC

² Departamento de Química, UFSCar, São Carlos/ SP

Processos de fotoabsorção, fotoionização e fotodissociação em sistemas moleculares são importantes em um amplo espectro de energias do fóton incidente. Neste trabalho relatamos uma investigação experimental sobre a interação de radiação na região de energia do ultravioleta de vácuo com a molécula de dimetilsulfeto (DMS). Seções de choque absolutas para processos de fotoabsorção e rendimento de ionização foram medidas no intervalo de energia entre 8.0 e 21.5 eV. A partir desses dados, seções de choque para processos de fotoionização e decaimento neutro foram obtidas. Particularmente, esta região de energia se caracteriza pela presença de estados moleculares superexcitados cujo decaimento ocorre através de mecanismos de competição entre canais de decaimento ionizantes e não ionizantes. A obtenções de dados de seções de choque, portanto, nos fornece informações valiosas sobre os mecanismos de competição entre os possíveis canais de decaimento. As medidas foram realizadas usando a técnica de câmara dupla de ionização [1,2]. Os dados obtidos para as seções de choque de fotoabsorção estão em excelente acordo com dados da literatura para energias abaixo de 11.0 eV [3].

Este trabalho foi realizado no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS) através da proposta D05A-TGM 15362. Os autores agradecem o suporte financeiro do CNPq, FAPESP e à equipe do LNLS pelo apoio prestado durante a realização deste trabalho.

[1] M. G. P. Homem et al. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 42 235204 (2009).

[2] M. G. P. Homem et al. J. Chem. Phys. 137, 184305 (2012).

[3] P. Limão-Vieira et al. Chemical Physics Letters 366, 343 (2002).

Painel P016

Elastic electron scattering from ethyl acetate

G. H. Davanzo¹, R. T. Sugohara², M. G. P. Homem², I. Iga²

¹ Departamento de Engenharia Química, UFSCar, São Carlos/ SP

² Departamento de Química, UFSCar, São Carlos/ SP

The use of biodiesel (a mixture of alkyl esters) as renewable energy source for auto vehicles and trucks, replacing the tradition fossil fuels, has been of a subject of great interest [1]. They can be easily obtained from the vegetable oils and animal fats. In this sense, investigation on interaction of electrons with biodiesel molecules is interesting which may contribute to the development of engines of better performance.

The present work reports the first experimental absolute elastic differential cross sections (DCS) in the (50-1000)-eV range for the scattering of electrons from ethyl acetate ($C_4H_8O_2$) which is one of the simplest alkyl esters.

Our measurements were carried out using a crossed-beam apparatus [2]. The molecular beam formed by quasi-effusive flow of ethyl acetate vapors through a single tube nozzle is crossed with an electron beam produced by an electron gun. Elastically scattered electrons are filtered by a retarding field analyzer and detected by a set of micro-channel plates, over an angular range between -20° and 130° . The absolute cross sections at each energy and scattering angle were determined by use of the relative flow technique [3].

Acknowledgements: The present work was partially supported by the Brazilian agencies FAPESP, CNPq and CAPES.

[1] G. W. Huber et al. Chem. Rev. 106, 4044 (2006).

[2] R. T. Sugohara et al. Physical Review A 83, 032708 (2011).

[3] M. G. P. Homem et al. Review of Scientific Instruments, 013109 (2011).

Painel P018

Determinação quantitativa de substâncias de interesse biológico, em solução aquosa, através da Espectroscopia Raman.

Elderlei de Jesus Pita Souza¹, Elias Ramos de Souza²,
Paulo Fernando de Almeida¹, Denis Gilbert Francis David³

¹Universidade Federal da Bahia, Instituto de Ciências da Saúde

² Instituto Federal da Bahia

³ Universidade Federal da Bahia, Instituto de Física

Neste trabalho, substâncias de interesse biológico, como nitrato de sódio e glicerol, foram identificadas em solução aquosa e tiveram suas concentrações determinadas, tanto em solução pura, quanto em misturas através da Espectroscopia de Espalhamento Raman. Utilizou-se a Análise de Componentes Principais (PCA) como ferramenta matemática para pré-processamento dos dados espectroscópicos. Verificou-se a adequação do método através da comparação por curvas de calibração, tendo-se confirmado a sua viabilidade para o objetivo citado.

Referências:

Ferraro, J. R., Nakamoto, K., Brown, C. W. *Introductory Raman Spectroscopy*. 2 ed. Elsevier, (2003);

O'Connell, M. et al. Classification of a target analyte in solid mixtures using principal component analysis, support vector machines and Raman spectroscopy. *Proc. SPIE - Int. Soc. Opt eng*, 5826, 340-350, (2005);

Ryder, A. G. et al. Quantitative analysis in solid mixtures using raman spectroscopy and chemometric methods. *Journal of Raman Spectroscopy*, 31 (3), 221-227, (2000).

Painel P020**Desenvolvimento de sistemas luminescentes contendo íons Tb³⁺**

Thaís Meira Menezes¹, Maryene Alves Camargo², Jorge Luiz Neves³

¹ Universidade Federal Rural de Pernambuco

² Universidade de Brasília

³ Universidade Federal de Pernambuco

O estudo das propriedades estruturais de complexos contendo íons lantanídeos e ligantes biologicamente ativos tem recebido sua devida importância nas últimas décadas, uma vez que estes podem atuar como Dispositivos Moleculares Conversores de Luz (DMCL), absorvendo radiação na região espectral do ultravioleta (via ligantes 'efeito antena) e emitindo na região espectral visível. Estes materiais podem atuar como sondas luminescentes e/ou nucleases [1], possibilitando o desenvolvimento de compostos bifuncionais inéditos, rastreando sua ação catalítica a partir de suas propriedades ópticas. O Presente trabalho retrata a preparação e estudo luminescente de um complexo contendo íons térbio Tb(III) coordenado aos ligantes acetoacetanilida (AAA)/ alanina (ALA). O complexo foi preparado adicionando TbCl₃.6H₂O numa mistura de etanol/água contendo os ligantes AAA, ALA e NaOH, (proporção 1:3:2:6), observando-se precipitação de pó em 2 semanas. A caracterização do complexo foi dada por espectroscopia no infravermelho e análise elementar, inferindo-se que o material apresenta estrutura [Tb(AAA)(ALA)]Cl. Quando excitado na região ultravioleta, o complexo emite um pico intenso no comprimento de onda próximo de 546 nm, correspondente à cor verde, característica da transições ⁵D₄ → ⁷F₅ dos íons térbio. Sendo assim, a promissora nuclease também demonstrou propriedades que conferem características de uma sonda luminescente.

[1] Camargo, Maryene A. ; Muxel, A. A. ; Neves, A. ; Castellano, Eduardo E. XV Brazilian Meeting on Inorganic Chemistry, 2010, Angra dos Reis-RJ. and II Latin American Meeting on Biological Inorganic Chemistry, 2010.

Painel P022**Estudo da Influência da Descrição do Alvo na Determinação da Seção de Choque Diferencial para o Espalhamento Elástico de Elétrons por Moléculas Diatômicas**

A. S. Simões¹, I. L. M. Ferreira^{1,2}, M. C. L. Santos^{1,2}, L. C. Santos^{1,3},
A. M. Maniero¹, J. D. M. Vianna^{1,4}, M. G. R. Martins¹

¹ UFBA

² IFBA

³ UFRB

⁴ UnB

Nos últimos anos vem crescendo o interesse em processos de espalhamento de elétrons por alvos moleculares, em virtude da importância de seções de choque que resultam dessas colisões em várias aplicações de interesse científico e tecnológico. Os valores experimentais de seção de choque para várias moléculas de interesse tecnológico e científico, contudo, são em geral escassos. Desta forma, para suprir grande parte das necessidades de aplicações práticas e também científicas, os cálculos teóricos se tornam uma ferramenta indispensável para a produção de dados confiáveis, revelando-se uma alternativa viável para a investigação experimental. Nesta comunicação apresentamos resultados obtidos por nosso grupo em trabalhos relativos ao espalhamento elástico de elétrons por moléculas diatômicas tais como N_2 , CO e AH (A=F,H), para elétrons incidentes com baixa energia. Especificamente, analisamos a dependência do cálculo da seção de choque diferencial (DCS) com a descrição do alvo realizada pelos métodos Hartree-Fock (HF), Interação de Configurações (CI) e Teoria do Funcional Densidade (DFT); como as expressões para o potencial de interação elétron-molécula, derivadas dos métodos em estrutura eletrônica citados dependem diretamente do conjunto de funções atômicas usadas para determinar os orbitais moleculares, também discutimos o desempenho das bases atômicas DZV e 6-31G. O método usado para resolver a equação de espalhamento, equação de Lippmann-Schwinger, é o Método Variacional Iterativo de Schwinger (SVIM). Comparação com dados experimentais e teóricos existentes é realizada.

Painel P024

Photostability studies of prebiotic molecules at the VUV region

H. Tanaka, A. Medina, M. G. P. Homem,
L. A. V. Mendes, F. V. Prudente, R. R. T. Marinho

The space between stars, the interstellar media (ISM), is a vast source of raw material that can originate stars and planetary systems. It also can be a reservoir of remaining particles from extinct stellar systems. This tenuous distribution of matter, consisting of grains and molecular gases, corresponds to about 10% of the Milky Way material. The photodissociation of simple molecules and their subsequent recombination with free radicals, resulting in new complex species, is an important process in the chemical evolution of molecules formed in space.

In this context, we have studied some astrophysical interesting species exposed to vacuum ultraviolet radiation (VUV). Their photoexcitation and photoionization processes can improve the knowledge of photodegradation, and consequently, of photo stability.

It will be presented the absorption, photoionization and neutral decay cross sections of prebiotic molecules like formaldehyde, formic acid and others, in the VUV region, from 13.5 eV to 19.0 eV, that corresponds to the vacuum ultraviolet radiation coming from the Sun.

Our measurements were performed at D05ATGM beamline of Brazilian Synchrotron Light Laboratory (LNLS). For cross section measurements we have used a dual ionization chambre [1]. Furthermore, we have measured the partial ion yield spectra of these molecules with a time-of-flight mass spectrometer (TOF) [2].

References:

[1] M. G. P. Homem, A. Lopez-Castillo, M. Barbatti, L. F. S. Rosa, P. Iza, R. L. Cavasso-Filho, L. S. Farenzena, M. T. Lee, and I. Iga, 2012 J. Chem. Phys. 137, 184305

[2] F. Burmeister, L. H. Coutinho, R. R. T. Marinho, M. G. P. Homem, M. A. A. de Moraes, A. Mocellin, O. Bjrneholm, S. L. Sorensen, P. T. Fonseca, A. Lindgren, A. Naves de Brito, 2010 J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. 180, 6

Painel P026

**PROJETO DE UM ESPECTRÔMETRO DE TEMPO DE VOO DO TIPO GARRAFA
MAGNÉTICA PARA MEDIDAS EM COINCIDÊNCIA**

J. A. S. Pereira, L. A. V. Mendes, F. V. Prudente, R. T. Marinho, A. Medina

Acompanhando a expansão das linhas de pesquisa experimentais e o fortalecimento do programa de pós-graduação em Física da UFBA, estamos implementando o Laboratório de Espectroscopia Molecular e Filmes Finos (LEMFF). O projeto inicial é intitulado Excitação, dissociação e ionização de moléculas de interesse biológico por fótons, elétrons e íons. Nosso objetivo científico no presente projeto é a investigação da interação da radiação ionizante (fótons, elétrons e íons) com moléculas de interesse biológico e prebióticas através de diferentes espectroscopias como, por exemplo, a espectroscopia de infravermelho, a espectroscopia de fotoelétrons e espectrometria de massa, entre outros. Moléculas podem ser excitadas, e posteriormente ionizadas ou fragmentadas, por radiação eletromagnética ou através de colisões com elétrons ou íons. Dentro deste tema, está sendo projetado um espectrômetro de tempo de voo (TOF) para análise de partículas carregadas. Nesse sistema, a radiação ionizante irá cruzar e ionizar um feixe molecular, produzindo íons positivos e elétrons, que serão acelerados em direções opostas. Em cada direção teremos um arranjo de campos elétricos e magnéticos de forma a direcionar os íons e os elétrons até os sistemas de detecção. O desenho final do aparato foi obtido a partir de simulações com o software SIMION. Foi realizado um estudo sistemático para determinar a geometria (número de eletrodos, ímãs, solenóide, lentes e grades) e os valores ideais dos campos que devem ser aplicados a esse espectrômetro de tempo de voo.

Painel P028**A Utilização das Álgebras de Lie na Determinação de Espectros Moleculares de Moléculas Diatômicas.**

Marivaldo Mendonça de Jesus, Frederico Vasconcellos Prudente

UFBA

As álgebras de Lie formam o aparato básico que é conhecido genericamente por Teoria de Lie. Essa teoria teve suas origens por volta de 1870 a partir da ideia, aparentemente singela, de abordar as equações diferenciais sob o mesmo ponto de vista que o adotado por Galois para equações algébricas. O programa lançado por Sophus Lie e Felix Klein, consistia em estudar as equações diferenciais via seus grupos de simetria. Esse programa colocou em evidência os grupos contínuos de transformações, para os quais foi criada uma teoria com ramificações nas mais diversas áreas da matemática e de suas aplicações. Como exemplo de aplicação das álgebras de Lie está a teoria do momento angular desenvolvida em Mecânica Quântica. Uma aplicação elegante desta teoria envolve a utilização dos operadores escada, também conhecidos como operadores de criação e aniquilação, na discussão do oscilador harmônico quântico. Este tipo de aplicação utilizando a estrutura das álgebras de Lie, ficou conhecida como Método Algébrico. Em Física Atômica e Molecular, podemos utilizar este conhecimento para determinar o espectro das energias rovibracionais de moléculas, através da estrutura algébrica. Neste trabalho, apresentaremos alguns resultados dos espectros das energias rovibracionais de moléculas diatômicas alcalinas mistas, especificamente as moléculas NaLi e RbCs, utilizando a estrutura das álgebras de Lie. Neste sentido, determinamos nosso espectro de energia vibracional e rovibracional utilizando álgebras de Lie associadas aos grupos de simetria $U(2)$ e $U(4)$, respectivamente para os casos vibracional (unidimensional) e rovibracional (tridimensional). Essas realizações são feitas utilizando operadores de criação e aniquilação através da simetria dinâmica de uma álgebra de Lie associada a um dos grupos acima especificados.

Painel P030**Theoretical Study of the Infrared, Raman and VCD Spectra of Thiophene Using Ab Initio**Marcello Ferreira da Costa (PQ), Poliane Cristina de Farias (PG)

Universidade Estadual de Londrina (UEL)

Organic semiconductors have similar physical characteristics to inorganic semiconductors, so they can also be used in the manufacture of OLEDs [1], photovoltaic cells [2], lasers [3] and transistors [4,5]. Furthermore, organic materials with semiconductor properties have some advantages when compared to inorganic materials, such as greater flexibility, adaptability, simplicity in manufacturing techniques, low cost of production and the possibility of easily make small structural changes to modify its physical and chemical properties. Among the organic semiconductors most interesting currently are the thiophene based polymers and thiophene together with its derivatives are the main constituents of *organic conductors* [6]. In this work we made the calculation of the molecular parameters, infrared and Raman spectra with HF and MP2 ab initio methods, and B3LYP and B3PW91 DFT functional packages. We also compare the results with experimental data found in the literature [7-9] and calculated the VCD spectrum before the good agreement of the calculations performed.

- [1] Y. Li, Y. Cao, J. Gao, D. Wang, G. Yu, A.J. Heeger, *Synthetic Met.* 99 (1999) 243.
- [2] C.J. Brabec, N.S. Sariciftci, J.C. Hummelen, *Adv. Func. Mater.* 11 (2001) 15.
- [3] F. Hide, M. Diaz-Garcia, B. Schwartz, M. Andersson, P. Qibing, A.J. Heeger, *Science* 273 (1996) 1833.
- [4] Y. Yang, A.J. Heeger, *Nature* 372 (1994) 344.
- [5] Z. Bao, A. Dodabalapur, A.J. Lovinger, *Appl. Phys. Lett.* 69 (1996) 4108.
- [6] J.H. Schon, A. Dodabalapur, Z. Bao, C. Kloc, O. Schenker, B. Batlogg, *Nature* 410 (2001) 189.
- [7] T. Kupka, R. Wrzalik, G. Pasterna, K. Pasterny, *J. Mol. Struct.* 616 (2002) 17.
- [8] J.S. Kwiatkowski, J. Leszczynski, I. Teca, *J. Mol. Struct.* 436-437 (1997) 451.
- [9] K. Pasterny, R. Wrzalik, T. Kupka, G. Pasterna, *J. Mol. Spectrosc.* 614 (2002) 297.

Painel P032

Síntese e caracterização óptica de nanopartículas de ouro para o estudo da supressão de fluorescência de macromoléculas biológicas.

Ernando Silva Ferreira, Juan Alberto Leyva Cruz

Departamento de Física, Universidade Estadual de Feira de Santana

A adsorção de proteínas em superfícies de implantes médicos é um aspecto essencial da cascata de reações biológicas que acontecem na interface entre materiais sintéticos e o ambiente biológico. Atualmente, pesquisadores de todo o mundo buscam melhor entendimento dos aspectos fundamentais da biointegração de materiais utilizados em implantes médicos, visando sintetizar materiais completamente biocompatíveis ou, num caso ideal, materiais verdadeiramente bioativos para a substituição dos atuais materiais empregados nesta área. Nos últimos anos, nanopartículas metálicas de ouro tem se destacado por suas peculiares propriedades físicas e químicas peculiares, o que as tornam biocompatíveis e potenciais sistemas de entrega de droga. Assim, o desenvolvimento de nanoestruturas e/ou a modificação de suas superfícies podem trazer condições inéditas e propícias ao desenvolvimento de novas interfaces entre materiais biológicos e substratos sintéticos, além de contribuir para o entendimento de questões ainda em aberto sobre os mecanismos envolvidos no processo de biointegração de materiais. Vários métodos de fabricação de nanopartículas vêm sendo desenvolvidos, ao mesmo tempo em que um polissacarídeo extraído do exoesqueleto de crustáceos, conhecido como quitosana, tem sido largamente usado em cicatrização de ferimentos, engenharia de tecido, remoção de proteínas alergênicas de alimentos, liberação controlada de drogas (nanopartículas), e como suplemento alimentar de efeito hipocolesterômico. Neste trabalho, visando a biocompatibilidade das nanopartículas de ouro, modificamos o método desenvolvido por Huang et al. na síntese de nanopartículas de ouro estabilizadas com quitosana. A caracterização das nanopartículas foi realizada por espectroscopia UV-Vis e de fluorescência estática. As nanopartículas apresentaram pico de absorção da banda plasmônica situada em 530 nm, e fluorescência em 489 nm, quando excitadas em 316 nm, e o pH da solução final foi 3,1. Após a síntese, as nanopartículas foram utilizadas como supressoras da fluorescência da albumina do soro bovino para o estudo das constantes de interação de Stern-Volmer.

Painel P034

Biological effects of permanent magnetic field gradient

Mirco Ragni¹, Tamara Posati², Emanuele Persichetti³

¹ Departamento de Física, Universidade Estadual de Feira de Santana, Bahia, Brazil.

² Laboratory MIST E-R, Bologna, Italy. Consiglio Nazionale delle Ricerche, Istituto per lo Studio dei Materiali Nanostrutturati, Bologna, Italy.

³ D.S.E.E.A. - Section of Applied Biochemistry, University of Perugia, Italy.

In this work, we present some preliminary results concerning the effects of the exposition of biological systems (cells and enzymes) to permanent magnetic field gradients (PMFG). These effects are firstly predicted using the quantum theory of electromagnetism, which permits to estimate the forces induced by typical PMFG on ferromagnetic compounds. By comparison with the forces involved in chemical bonds, a distortion of ferromagnetic molecular structures can be expected.

The modification of the molecular configurations is substantiated by the analysis of the activity of several enzymes, obtained experimentally, when exposed to PMFG. A correlation between the “magnetic” properties of the enzyme and the intensity of the gradient was found. Another experimental evidence of the influence of PMFG on biological systems was obtained exposing normal human fibroblast to strong PMFG. Loss of cellular vitality was observed after six hours of exposition. Interestingly, we observed that the cell mortality follows the lines of the magnetic field, and it is higher where the PMFG is stronger. This is a further confirmation of the interaction between biological systems and PMFG.

Painel P036**HOMO and LUMO orbitals for the ground state of the CaSi, CaSi⁺ e CaSi⁻ molecule**

Júlia Wotzasek Pereira^{1,2} (ICJ), Robson A. Simões³ (PG),
 Vládir W. Ribas^{2,3} (PQ), Patrícia Regina P. Barreto² (PQ)

¹ Colégio Poliedro - SJC

² Laboratório Associado de Plasma (LAP) – Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE)

³ Departamento de Física, Instituto Tecnológico de Aeronáutica (ITA)

In this work is presented, for the first time, an accurate identification of the HOMO and LUMO orbitals of the ground state for the CaSi, CaSi⁺ and CaSi⁻. HOMO and LUMO are sometimes referred to as frontier orbitals [1]. We also are mainly concerned with an accurate spectroscopic characterization of the lowest-lying states of CaSi molecule. These states correlate with the four lowest dissociation channels. The electronic states of studied triplet symmetry of the CaSi molecule are those that if correlate with the first and the third channels of dissociation, or either, Ca (¹*Sg*) + Si (³*Pg*) and Ca (³*Pu*) + Si (³*Pg*). Results for species like MgSi, BeSi [2] and CaC [3-6] have been previously reported. The electronic calculations basically involved two steps. The first step consisted of state-averaged complete active space self-consistent field (CASSCF) calculations separately for each set of singlet and triplet spin symmetries. Within each spin symmetry, averaged natural orbitals were computed using the CASSCF (6,8) wavefunctions. The final multireference configuration interaction wavefunction (MRCI) was generated as all single and double excitations from the reference set formed by the all CASSCF configurations. The core orbitals were kept frozen in all calculations. The atomic basis functions used is the cc-pV5Z type developed by Dunning and collaborators. The MRCI wavefunction was constructed by the internally contracted approach implemented in the MOLPRO suite of programs.

References:

- [1] <http://goldbook.iupac.org/F02533.html>.
- [2] A. I. Boldyrev, J. Simons, J. Phys.Chem. 97 (1993) 1526.
- [3] M. Pelegrini, O. Roberto-Neto, F.R. Ornellas, F.B.C. Machado, Chem. Phys. Lett. 383 (2004) 143.
- [3] D.T. Halfen, A.J. Apponi, L.M. Ziurys, Astrophys. J. Lett. 577 (2002) L67.
- [5] H.H. Takada, M. Pelegrini, O. Roberto-Neto, F.B.C. Machado, Chem. Phys. Lett. 363 (2002) 283.
- [6] I.S.K. Kerkines et al., J. Chem. Phys. 117 (2002) 9733.

Painel P038**HOMO and LUMO orbitals for the ground state of the BeGe₂ molecule.**

Henrique Ken S. Iwamoto (ICJ)¹, Robson A. Simões (PG)²,
Vladir W. Ribas (PQ)^{1,2}, Bogos N. Sismanoglu (PQ)²

¹Laboratório Associado de Plasma (LAP), Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE)

² Departamento de Física, Instituto Tecnológico de Aeronáutica (ITA)

In this work is presented, for the first time, an accurate identification of the HOMO and LUMO orbitals of the ground state for the BeGe₂ molecule. We also are mainly concerned with an accurate spectroscopic characterization of the fourteen low-lying doublet and quartet electronic states of the BeGe molecule. These states correlate with the three lowest dissociation channels. The first two states (X)³Σ⁻ and (1)³Π correlating with the first dissociation channel, Be (¹Sg) + Ge (³Pg), and the four states ¹Π(1), ¹Σ⁺(2) and ¹Δ(1) correlating with the second and third channels, Be (¹Sg) + Ge (¹Dg) and Be (¹Sg) + Ge (¹Sg), respectively. The electronic calculations basically involved two steps. The first step consisted of state-averaged complete active space self-consistent field (CASSCF) calculations separately for each set of singlet and triplet spin symmetries. Within each spin symmetry, averaged natural orbitals were computed using the CASSCF wavefunctions. The final multireference configuration interaction wavefunction (MRCI) was generated as all single and double excitations from the reference set formed by the all CASSCF configurations. The core orbitals were kept frozen in all calculations. The atomic basis functions used is the cc-pV5Z type developed by Dunning and collaborators. The MRCI wavefunction was constructed by the internally contracted approach implemented in the MOLPRO suite of programs. This study provides a characterization of a manifold of potential energy curves, excitation and dissociation energies

Painel P040**HOMO and LUMO orbitals for the ground state of the MgCl molecule.**

João V. A. Fernandes (ICJ)¹, Robson A. Simões (PG)²,
Vladimir W. Ribas (PQ)^{1,3}, Patrícia Regina P. Barreto (PQ)¹

¹ Laboratório Associado de Plasma (LAP) - Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE)

² Departamento de Física, Instituto Tecnológico de Aeronáutica (ITA)

³ Departamento de Física (IEF) - Instituto Tecnológico de Aeronáutica (ITA)

In this work is presented, for the first time, an accurate identification of the HOMO and LUMO orbitals of the ground state $X^2\Sigma^+$. HOMO and LUMO are sometimes referred to as frontier orbitals [1]. We also are mainly concerned with an accurate spectroscopic characterization of the lowest-lying states of MgCl molecule. These states correlate with the two lowest dissociation channels, or either, Mg (1Sg) + Cl (2Pu) and Mg (3Pu) + Cl (2Pu). The MgCl molecule has received attentions from theoretical investigations such as Bauschlicher et al. [2], Parlant et al. [3] and Drakes et al. [4]. As far as we know, there are spectroscopic studies of $^{24}\text{Mg } ^{35}\text{Cl}$ and $^{24}\text{Mg } ^{37}\text{Cl}$ by means of high resolution Fourier Transform Spectroscopy (FTS) of Fellows et al. [5] for the ground state ($X^2\Sigma^+$) and the first excited state ($1^2\Pi$). The electronic calculations basically involved two steps. The first step consisted of state-averaged complete active space self-consistent field (CASSCF) calculations separately for each set of doublet and quartet spin symmetries. Within each spin symmetry, averaged natural orbitals were computed using the CASSCF (9,8) wavefunctions. The final multireference configuration interaction wavefunction (MRCI) was generated as all single and double excitations from the reference set formed by the all CASSCF configurations. The core orbitals were kept frozen in all calculations. The atomic basis functions used is the cc-pVQZ type developed by Dunning and collaborators.

REFERENCES

- [1] <http://goldbook.iupac.org/F02533.html>;
- [2] S. R. Langhoff, C. W. Bauschlicher, Jr, H. Partridge, R. Ahlrichs, J. Phys.Chem. 84 (1986) 5025.
- [3] G. Parlant, J. Rostas, G. Taieb, D. R. Yarkony, J. Chem. Phys. 93 (1990) 6403.
- [4] J.A. Drakes, J. Quant. Spectrosc. Radiat. 54 (1995) 1039.
- [5] T. Hirao, P. F. Bernath, C. E. Fellows, R. F. Gutterres, M. Vervloet, J. Mol. Spect.212 (2002) 53.

Painel P042

Estudo de Sistemas Quânticos Confinados com dois Elétrons usando o método Monte Carlo Quântico com Funções Correlacionadas

Thiago Nascimento Barbosa^{1,2}, Frederico Vasconcellos Prudente¹

¹ IF-UFBA

² IFBA

Em diversas situações o movimento das partículas constituintes dos sistemas quânticos pode ter seu movimento restringido devido a algum tipo de confinamento espacial. Com isso, as quantidades de interesse como a energia, o momento de dipolo, dentre outras, são modificadas quando comparadas com a situação livre. O que atrai a atenção especial aos pontos quânticos é a possibilidade de controlar suas formas, suas dimensões, suas estruturas de níveis de energia e o número de elétrons confinados. Tendo em vista a absorção e emissão de luz em uma faixa espectral muito estreita, eles podem ter aplicações na construção de lasers semicondutores controláveis mais eficientes e precisos. Também é bastante promissora a possibilidade do ponto quântico ser usado como *qubit* quântico numa nova geração de computadores. Um exemplo de sistema quântico confinado é o ponto quântico com dois elétrons, onde esses elétrons tem seu movimento limitado por um potencial confinante. Por outro lado, métodos estocásticos têm sido frequentemente utilizados para a solução dos mais diversos problemas de natureza microscópica ou macroscópica da matéria. Dentre estes encontra-se o método Monte Carlo Quântico com Funções Correlacionadas (MCQFC) que é empregado para a solução da equação de Schrödinger independente do tempo. O que caracteriza o método MCQFC é que encontramos diferentes estados excitados com uma única caminhada aleatória, diferindo, assim, dos métodos Monte Carlo usuais. No presente trabalho apresentaremos os resultados para os estados excitados do átomo de hélio artificial (ou ponto quântico com dois elétrons), e alguns outros sistemas isoeletrônicos.

Painel P044**Estados eletrônicos de mais baixa energia da molécula CI**

Tiago Vinicius Alves, Fernando Rei Ornellas

Instituto de Química – Universidade de São de Paulo

Neste estudo, investigamos os estados de mais baixa energia da molécula CI que se correlacionam com o primeiro canal de dissociação $C(^3P) + I(^2P)$. A escolha da base atômica recaiu sobre os conjuntos (aug-cc-pV5Z) para o carbono e aug-cc-pV5Z-PP para o átomo de iodo. No caso do iodo, um conjunto de 28 elétrons mais internos (1s a 4d) foram substituídos por um pseudo-potencial relativístico, chamado de ECP28MDF, otimizado em um cálculo multiconfiguracional de Dirac-Hartree-Fock. Cálculos do tipo *Complete Active Space Self Consistent Field* - CASSCF (11,9), ou seja, 11 elétrons distribuídos entre 9 orbitais (3,3,3,0), foram realizados para a inclusão de correlação estática. Para a inclusão de efeitos de correlação dinâmica, foram realizados cálculos do tipo Interação de Configurações Multirreferencial com Excitações Simples e Duplas com Correção de Davidson (MRCISD+Q), utilizando as funções CASSCF como referência. Como resultado desses cálculos, identificamos todos os estados de mais baixa energia que se correlacionam com o primeiro canal de dissociação, sendo que $X^2\Pi$ é o estado fundamental ($R_e=3,856 a_0$, $D_e=23762,0$, $\omega_e=631,8 \text{ cm}^{-1}$), seguido de $1^4\Sigma^-$ ($R_e=3,836 a_0$, $D_e=9662,2$, $\omega_e=610,9 \text{ cm}^{-1}$), separados por uma diferença energética (T_e) de 14136 cm^{-1} . Além disso, determinamos os parâmetros espectroscópicos dos estados eletronicamente excitados $1^2\Sigma^+$ ($\omega_e=246,5 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_e x_e=-5,652 \text{ cm}^{-1}$) e $1^2\Delta$ ($\omega_e=567,8 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_e x_e=-13,682 \text{ cm}^{-1}$).

Painel P046

Estudo da estrutura eletrônica das moléculas de Benzeno, Anilina e Nitroanilinas em suas formas neutras e dicatiônica

Maria Suely P. Mundim¹, Carlos X. de Oliveira¹, Daví A. C. Ferreira²

¹ Universidade de Brasília, Instituto de Física, Campus Darcy Ribeiro, Asa Norte - Brasília - DF

² Universidade de Brasília, Instituto de Química, Campus Darcy Ribeiro, Asa Norte - Brasília - DF

Moléculas duplamente ionizadas em fase gasosa possuem propriedades distintas de íons de carga única e moléculas neutras, pois esses íons são instáveis e na maioria das vezes, o sistema se dissocia em íons monocarregados. Dicátions moleculares estão presentes na ionosfera terrestre e de outros planetas, são observados em nuvens interestelares e em material quente entorno da região de formação estrelar[1]. Em alguns casos, os acoplamentos entre diferentes processos de transferência de cargas podem dar surgimento a estados metaestáveis[1-4].

Substâncias químicas como Benzeno, Anilina e as Nitroanilinas têm sido extensivamente estudadas, em abordagens experimentais e teóricas. Evidências experimentais e teóricas mostram a existência de estados metaestáveis na molécula de Benzeno[5]. No sentido de investigar a metaestabilidade dessas substâncias foram realizados cálculos teóricos de estrutura eletrônica das moléculas neutras e catiônicas, usando a Teoria do Funcional da Densidade. O potencial e nível cálculo foram UB3LYP/aug-cc-pVDZ utilizando o programa Gaussian09w[6]. Obtivemos após a otimização de geometria, os índices de ligação do tipo dicentros de Mayer[7], os mapas de potenciais eletrostáticos e analisamos as populações eletrônicas.

Neste trabalho, apresentamos um estudo sobre o efeito do grupo NO[2] sobre a estrutura eletrônica das nitroanilinas, em suas diferentes estruturas conformacionais, orto meta e para, visando obter informações sobre os processos de transferência de carga e dinâmica de fragmentação.

Referências:

- [1] L. Pauling, J. Chem. Phys. 1 (1933) 56.
- [2] P. Candori, et al Chem.Phys. Lett.436 (2007) 322.
- [3] M. Alagia, et al, J. Chem. Phys. 120 (2004) 6985.
- [4] S.S. Prasad, D.R. Furman, J. Geophys. Res. 80 (1975) 1360.
- [5] M. Alagia, et al, J. Chem. Phys. 135 (2011) 144304.
- [6] Gaussian 09, Revision A.01, (2012). Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.
- [7] I. Mayer Chem. Phys. Lett. 97 (1983) 270.

Painel P048

Estudo Teórico-Experimental da Fotofragmentação da Molécula da Etanolamina na Região de Valência

Mabele de Jesus Santos^{1,2}, Aline Medina², Manuela Sousa Arruda²,
Josenilton do Nascimento de Souza², Luiz Antonio Vieira Mendes²,
Ricardo dos Reis Teixeira Marinho², Frederico Vasconcellos Prudente²

¹ IF. SERTÃO-PE, Campus Ouricuri - PE.

² Instituto de Física na Universidade Federal da Bahia

Moléculas podem ser excitadas, e posteriormente ionizadas ou fragmentadas, por radiação eletromagnética ou através de colisões com elétrons ou íons. Cada uma dessas formas de excitação molecular tem vantagens e desvantagens. Por exemplo, a excitação de moléculas por radiação eletromagnética sintonizável (radiação síncrotron ou laser) permite estabelecer com precisão a energia absorvida, mas as regras de seleção podem dificultar ou impossibilitar a obtenção de alguns estados; ocasionalmente, a excitação multifotônica pode ser necessária, mas nem sempre ela é possível. Colisões de fótons, elétrons e íons com moléculas podem ter diversas aplicações como, por exemplo: na astrofísica, em estudos relacionados à evolução físico-química de espécies moleculares presentes nos primórdios da existência do universo; na radiobiologia, em estudos relacionados com a compreensão dos efeitos de radiações ionizantes na matéria viva; entre vários outros. Neste trabalho realizamos experimental que visa ampliar o entendimento do processo de fotofragmentação de moléculas pré-bióticas, a molécula da Etanolamina (C_2H_7NO) a partir da ionização de elétrons da valência. Medimos experimentalmente a produção total e parcial dos íons da Etanolamina em fase gasosa, em função da energia dos fótons, na região do ultravioleta de vácuo, entre 8,7 e 21,6 eV. Tais medidas foram realizadas inicialmente utilizando um espectrômetro de massa por tempo voo que é montado em uma câmara rotativa, montado no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS). Além disso, fizemos o emprego de métodos teórico-computacionais de estrutura eletrônica como o DFT e o TD-DFT que levam em conta efeitos de correlação eletrônica como auxílio de interpretação dos dados experimentais.

Painel P050

Study of the confinement potential of two electrons in a double quantum dots

Angelo Marconi Maniero¹, Frederico V. Prudente¹,
L. S. F. Olavo², Carlos Renato de Carvalho³, Ginette Jalbert³

¹ Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia

² Instituto de Física, Universidade Brasília

³ Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro

We have developed a computational code which allows the study of the electronic structures of several confined quantum systems. In normal atoms and molecules the Schrödinger equation is solved with the help of methods of electronic structure: Hartree-Fock and Configuration Interactions. We have employed these methods to a pair of coupled quantum dots containing two electrons with the addition of a phenomenological three-dimensional confinement potential. In this work, we present a study of the effect of this kind of potential on the energy spectra.

Painel P052

Potenciais geradores de autofunções específicas

Adna E. C. Silva, Ana C. P. Bitencourt, Mirco Ragni

Universidade Estadual de Feira de Santana

O escopo da aplicação da equação de Schrödinger independente do tempo é a obtenção dos autovalores e das autofunções da energia para o sistema físico sob investigação, com o intuito de estudar estabilidade, espectro de absorção e emissão, reatividade e outras propriedades.

Neste trabalho invertemos o paradigma que leva aos conjuntos de autofunções-autovalores a partir de um potencial de interação dado. O nosso ponto de partida é representado por autofunções específicas, cujas formas funcionais são capazes de codificar informações, definir geometria de equilíbrio do sistema e estabilidade, reatividade, etc. O objetivo deste trabalho consiste na obtenção dos potenciais que geram as autofunções desejadas.

Painel P054**Sobre os Potenciais Efetivos no Espalhamento Elástico Elétron-Molécula Usando o Método de Interação de Configurações para Descrever o Alvo.**

Mônica C. Lemos^{1,2}, A. S. Simões², I. L. M. Ferreira^{1,2},
A. M. Maniero², J. D. M. Vianna^{2,3}, M. G. R. Martins²

¹ IFBA

² UFBA

³ UnB

A teoria de espalhamento é um domínio de pesquisa bem estabelecido na mecânica quântica tanto do ponto de vista teórico como de aplicação a problemas específicos, sendo um dos capítulos de interesse a determinação de seções de choque (diferencial e integral) do processo elétron-molécula. Nas versões usuais dos métodos teóricos o potencial de interação elétron-molécula composto por contribuições estática, de troca é obtido considerando funções de estado do alvo do tipo Hartree-Fock (HF); em consequência, tais formulações não incluem todos os efeitos da correlação eletrônica, dificuldade a que se juntam a existência da não-esfericidade e da não-localidade do potencial, da multiplicidade de canais e a não consideração da polarização, por exemplo. Uma das formas de aprimorar os resultados mantendo a aproximação HF é usar potenciais efetivos capazes de simular efeitos não considerados, sendo exemplos as propostas de Padial e Norcross, Gibson e Morrison referentes á correlação e á polarização. Por outro lado, dois dos autores (MGRM, JDMV) propuseram um método que possibilita determinar as contribuições do potencial de interação elétron-molécula, no espalhamento elástico, diretamente de uma função CI (Interação de Configurações) que descreve o alvo. Neste contexto é de interesse analisar se, com a nova descrição do alvo usando função CI, ainda faz sentido o uso de tais potenciais efetivos. Esta comunicação trata desta análise e nossos resultados, considerando as expressões usuais dos potenciais efetivos do tipo correlação e polarização, indicam que sua inclusão não melhora os valores da Seção de Choque Diferencial (SCD) oriundos da descrição do alvo feita pelo método CI. Considerando que tal resultado negativo pode ser devido ás expressões usadas na literatura terem sido determinadas para aprimorar resultados Hartree-Fock, nesta etapa do trabalho estamos analisando se é possível e, neste caso, como modificar essas expressões de forma a aprimorar os resultados das Seções de Choque Diferenciais calculadas usando o método CI para descrição do alvo; nossos resultados, considerando as moléculas lineares CO e N₂, são apresentados. A equação de Lipmann-Schwinger é resolvida usando o método SVIM (Método Variacional Iterativo de Schwinger) e diferentes valores de energia do elétron incidente são considerados.

Painel P056**Caracterização dos Espectros de Fônons e Morfologia dos Compostos $RE_2(MoO_4)_3$ e $RE_2(MoWO_4)_3$**

Glaydson Francisco Barros de Oliveira¹,
Ilde Guedes da Silva², Flávia Oliveira Monteiro da Silva Abreu³

¹ Universidade Federal Rural do Semi-Árido - UFERSA

² UFC - Departamento de Física

³ Universidade de Fortaleza - CCT - Laboratório de Materiais.

e-mail: glaydson.barros@ufersa.edu.br

Cristais da família dos molibdatos são materiais que tem sido investigados devido às suas propriedades piezoelétricas, ferroelásticas e ferroelétricas, podendo ser utilizados como matrizes hospedeiras na fabricação de lasers e como materiais de memória de computador entre outras aplicações. Neste estudo, preparou-se três diferentes cristais da família dos molibdatos de terras-raras, $Gd_2(Mo_{0.9}W_{0.1}O_4)_3$, $Gd_2(MoO_4)_3$ e $Gd_{1.8}Er_{0.2}(MoO_4)_3$. Estes foram obtidos pela mistura do óxido dos metais de terras-raras (RE_4O_7) com MoO_3 de 99,99% de pureza em proporção estequiométrica ($RE_4O_7:MoO_3 = 1:6$). Caracterizou-se os cristais $RE_2(MoO_4)_3$ usando as técnicas de difração de raio-X, microscopia de força atômica e espectroscopia Raman. Os compostos apresentaram uma estrutura ortorrômbica pertencente ao grupo espacial $Pba2 (C8_{2v})$ com quatro fórmulas por célula unitária ($Z = 4$), sendo um número bem inferior de modos de vibração comparados aos 201 previstos pela Teoria de Grupos. A morfologia mostrou-se composta de partículas nanoestruturadas com diferentes graus de dispersão e diferentes tamanhos em função do elemento de terras-raras inserido. Dentre eles, o cristal $Gd_2(Mo_{0.9}W_{0.1}O_4)_3$ apresentou morfologia diferenciada, podendo ser atribuída à inserção de tungstênio nos sítios do íon MoO_4^- , indicando que houve uma diminuição na ligação Mo–O com aumento na frequência de vibração. Constatou-se pela técnica de espectroscopia Raman o surgimento de um novo modo vibracional na região de altas frequências nesta estrutura, possivelmente devido ao efeito de contração lantanídica.

Colóquio – 10/12/2013

A molécula de N_2O^+ através de Espectroscopia de Fourier em alta resolução

Carlos Eduardo Fellows

Instituto de Física, UFF

O radical molecular N_2O^+ é estudado através de espectroscopia por transformação de Fourier em alta resolução. Serão mostradas as formas como foram obtidos os espectros do radical em dois sistemas diferentes, possibilitando a confecção de espectros em duas temperaturas diferente, em 30 e 340 K. Desta forma a atribuição das transições pode ser realizada sem ambiguidade. Serão mostrados os resultados obtidos, assim como os futuros resultados a serem obtidos.

Palestras Convidadas – 11/12/2013

Palestra Convidada PC09

Ionização de moléculas por feixes de femtosegundo e fótons

A. C. F. Santos, K. F. Alcantara, A. H. A. Gomes

Instituto de Física, UFRJ

O momento transferido em uma colisão é um parâmetro chave em colisões atômicas e moleculares. Neste trabalho investigamos a importância do momento transferido para a compreensão da fragmentação de moléculas de interesse atmosférico por fótons de UVV, e por partículas carregadas (H^+ , O^+ e O^{2+}).

A ionização simples de átomos e moléculas por partículas carregadas rápidas (de carga q e velocidade v) é teoricamente descrita em teorias perturbativas semiclássicas ou quânticas pelo elemento de matriz de primeira ordem da expansão da perturbação em q/v , entre eles destaca-se a aproximação de Bethe-Born, a qual se tornou referência em colisões inelásticas de partículas rápidas com átomos e moléculas. Este elemento de matriz torna-se idêntico ao de fotoionização simples por um único fóton no limite de altas velocidades. Então, dependendo da magnitude do momento transferido, a ionização por partículas carregadas pode se relacionar com os dois principais mecanismos de fotoionização: efeito fotoelétrico, onde o fóton incidente é totalmente absorvido, ou espalhamento Compton, onde o fóton incidente é inelasticamente espalhado.

Para momentos transferidos pequenos, se aproximando do valor $Q = DE/v$, onde DE é a energia perdida pelo projétil, o processo torna-se idêntico à fotoabsorção de um fóton de momento DE/c . O padrão dos elétrons emitidos se aproxima da distribuição dipolar ao redor do vetor momentum transferido (que no caso da fotoabsorção, corresponde à direção do campo elétrico do fóton – vetor de polarização da luz síncrotron). Para grandes momentos transferidos, o elemento de matriz para a ionização simples é equivalente ao do espalhamento Compton. Neste caso, a conservação da energia e momentum é garantida principalmente pelo fóton espalhado e pelo elétron emitido, onde o(s) núcleo(s) atua(m) meramente como espectadores passivos.

Palestra Convidada PC10

Explorando estados eletrônicos excitados de sistemas diatômicos

Fernando R. Ornellas

Departamento de Química Fundamental, Instituto de Química, Universidade de São Paulo

Nesta apresentação estaremos mostrando como métodos de estrutura eletrônica de alto nível se tornaram uma ferramenta de grande utilidade no estudo espectroscópico de sistemas diatômicos, complementando e mesmo guiando a investigação espectroscópica experimental desses sistemas. Basicamente, dados dois fragmentos (átomos ou íons), iremos mostrar como a partir deles podemos obter uma caracterização acurada de seus possíveis estados eletrônicos obtendo curvas de energia potencial e conjuntos de parâmetros espectroscópicos a elas associados, inclusive levando em consideração a interação spin-órbita. Esses mesmos cálculos também nos fornecem funções momento de dipolo que nos possibilitam estudar transições vibro-rotacionais num dado estado eletrônico e funções momento de transição que nos permitem estimar probabilidades de transição eletrônicas e dessa forma obter dados relevantes sobre seus espectros eletrônicos, entre eles tempos de vida radiativa. Serão abordados alguns aspectos fundamentais da teoria que fundamenta esses cálculos e apresentados vários exemplos ilustrativos do potencial desses estudos.

Comunicações Orais – 11/12/2013

Comunicação Oral CO15

Microespectroscopia de FTIR como ferramenta de análise patológica de lesões cancerosas e inflamatórias

Fabício Augusto de Lima¹, Luciano Bachmann¹, Cyril Gobinet², Olivier Piot²

¹ Universidade de São Paulo

² Université de Reims Champagne-Ardenne

Técnicas de espectroscopia vibracional como micro-FTIR têm se mostrado promissoras no diagnóstico precoce de lesões cancerosas. A maior dificuldade encontrada para solidificar esta técnica em laboratórios de patologia consiste em obter um procedimento com alto grau de sensibilidade e especificidade, sendo a presença de processos inflamatórios a principal fonte de falsos positivos no diagnóstico de câncer.

Neste trabalho, foi elaborada uma metodologia associando-se micro-FTIR à ferramentas estatísticas como Análise de Componentes Principais (PCA) e Análise de Agrupamentos, visando a classificação de lesões inflamatórias de cólon e o diagnóstico de lesões cancerosas em presença de processos inflamatórios. Para tal, foi necessário desenvolver um algoritmo para cancelar matematicamente o sinal da parafina nas amostras.

Até o presente momento, foram coletadas 32 imagens de 18 amostras de cólon humano (tecidos saudáveis, cancerosos e com lesões inflamatórias). As amostras foram preparadas em janelas ópticas de CaF₂, cortes com 5 μm de espessura e nenhum tipo de desparafinização química. As imagens foram coletadas na Université de Reims Champagne-Ardenne (França) em um espectrômetro acoplado a um microscópio (Spotlight 400 FT-IR, PerkinElmer, USA), com resolução espacial de 6,25 μm e resolução espectral de 4 cm⁻¹.

A parafina presente nas amostras foi modelada por meio de PCA. O algoritmo “Extended Multiplicative Signal Correction (EMSC)” foi utilizado para cancelar a interferência das bandas de parafina e para remover a linha de base espectral. A partir da Análise de Agrupamentos (K-Means, inicialização randômica) foram construídas imagens bioquímicas capazes de revelar estruturas histológicas dos tecidos. Com estes resultados preliminares, foi possível avaliar a efetividade do algoritmo EMSC para tratamento do sinal da parafina e também diferenciar com sucesso os três grupos experimentais estudados (tecidos saudáveis, inflamados e cancerosos).

Nas próximas etapas do trabalho, pretende-se finalizar a coleta das imagens (total de 63 amostras) e calcular os coeficientes de especificidade e sensibilidade.

Comunicação Oral CO16**Cálculo bidimensional dos níveis de energia da molécula de amônia usando coordenadas hiperesféricas e representações adiabáticas e diabáticas**

Wanderson S. Jesus¹, Frederico V. Prudente¹
Ana C. P. Bitencourt², Mirco Ragni²

¹ Universidade Federal da Bahia

² Universidade Estadual de Feira de Santana

A amônia (NH₃) é um sistema benchmark com configuração piramidal e seu estudo teórico possibilita o desenvolvimento de metodologias acuradas para a descrição do processo de inversão de configuração. O objetivo deste trabalho é o cálculo dos níveis de energia vibracionais da amônia, que são obtidos através do estudo da dinâmica dos núcleos na Superfície de Energia Potencial Eletrônica fundamental. Para tratar esse problema usamos coordenadas hiperesféricas obtidas pela parametrização dos vetores de Radau-Smith. Devido a simetria piramidal (C_{3v}) consideramos dois graus de liberdade, o hiperângulo de inversão e o hiperraios. Para separação das coordenadas usamos as representações adiabáticas e diabáticas. Nos dois casos, a equação radial é resolvida inicialmente e fornece os potenciais (adiabáticos ou diabáticos) em função do hiperângulo que, por sua vez, são usados na parte angular da equação de Schrödinger. Essa equação possui termos de acoplamento, que envolvem a autofunção radial. Os níveis de inversão e do estiramento foram obtidos pela equação angular com as curvas de energia adiabática fundamental e excitadas. Os mesmos cálculos foram repetidos usando as curvas diabáticas. No caso da representação diabática, os termos de acoplamento também foram considerados. Todas as equações foram resolvidas empregando o Método da Representação da Variável Discreta (DVR) igualmente espaçada. Os resultados obtidos são então comparados com outros valores da literatura, quando disponíveis.

Comunicação Oral CO17

Brazilian effective impact factor of physics journals: The third side of the coin.

José Rachid Mohallem¹, Norma Eduarda da Fonseca²

¹ Departamento de Física, ICEx, Universidade Federal de Minas Gerais, MG, Brasil

² Mestrado Profissional em Administração, Fundação Pedro Leopoldo, Pe. Leopoldo, MG, Brasil
e-mail: rachid@fisica.ufmg.br

After about two decades of apogee, the use of the impact factor of scientific journals to judge scientific work is being subject of severe criticism in the first world. The main reason is the alleged bad influence of the impact factor *fever* on young scientists.

This coin has a third side however, namely the distortions yielded by applying an international index to a particular subset of scientists in a developing country.

In this work we develop statistical and graphical analysis involving physics journals, which show that:

i) The most cited papers with origin in Brazil are not necessarily published in journals of higher impact factor. Particularly, for a same number of citations, a Brazilian paper is, in average, published in a journal of smaller impact factor than a UK paper.

ii) In consequence, there are effective Brazilian impact factors for the journals, which differ from the international ones in variable and surprising amounts.

These findings could potentially change the government's ranking of scientific journals presently into effect in Brazil, namely the Qualis-Capes index.

Índice Remissivo

Courteille, Ph. W. , 41

Abreu, F. O. M. S., 78
Alcantara, K. F., 7, 15, 80
Alijah, A., 3
Almeida, G. C., 46
Almeida, P. F., 59
Alves, B. X., 8, 12
Alves, R. T., 25
Alves, T. V., 72
Amaral, P. H. R., 28
Ambrósio, C., 11
Andrade M. D., 39
Araújo, D. M. S., 24, 48
Araújo, W. R., 11
Arapicara, A. F. C., 23
Arretche, F., 52, 53, 56
Arruda, M., 54
Arruda, M. S., 49, 74
Azevedo, S., 32

Bachmann, L., 82
Barbosa, T. N., 71
Barreto, P. R. P., 51, 68, 70
Behunin, R. O., 5
Bettega, M. H. F., 42
Bitencourt, A. C. P., 76, 83
Boechat-Roberly, H., 46
Brandão, P., 29
Brito, G. K. S., 37

Caires, A. R. L., 31, 43
Camarga, M. A., 60
Campestrini, I. M., 56
Campos, B. S., 21
Canuto, S., 33
Carvalho, C., 1
Carvalho, C. R., 75
Cesar, C. L., 8, 12
Cezar, J. C., 11
Chaves, D. S., 11
Conceição, A. L. C., 26
Cornetta, L. M., 55
Costa, M. F., 65
Costa, R. F., 42
Cruz, A. C. P. S., 51
Cruz, C. S. C., 29
Cruz, J. A. L., 66
Czasch, A., 10

d'A Sanchez, S., 42
Dörner, R., 10

Damasceno, E. M., 21
Davanzo, G. H., 58
David, D. G. F., 59
Denyak, V., 26
Dourado, R., 32
Dulieu, O., 1
Duque, H. V., 13

Esteves, D., 29
Euclides, H. O., 51

Falco, W. F., 31, 43
Farenzena, L. S., 57
Faria, M. V. C., 54
Faria, N. V. C., 1
Farias, P. C., 65
Fellows, C. E., 79
Ferandes, J., 43
Fernandes, J., 31
Fernandes, J. V. A., 70
Ferreira, D. A. C., 73
Ferreira, E. S., 66
Ferreira, I. L. M., 61, 77
Fonseca, N. E., 84
Fonseca, P. T., 11
Formiga, A. L. B., 18
Frota, E., 17

Galante, D., 11
Giehl, L. K., 44
Gobinet, C., 82
Gomes, A. H. A., 7, 15, 80
Gomes, W. R., 24
Gonçalves, C. P., 20
Gonçalves, P. F. B., 34, 35
Guedes, G. P., 25

Homem, M. G. P., 57, 58, 62

Iga, I., 57, 58
Impens, F., 5
Iwamoto, H. K. S., 69

Jagutzki, O., 10
Jahnke, T., 10
Jalbert, G., 1, 75
Jesus, M. M., 64
Jesus, W. S., 83
Jorge, F. E., 16, 38
Jorge, S. S., 38

Lee, M. T., 57
Leite, D. C., 34, 35

- Lemos, M. C., 77
 Li, M. S., 8, 12
 Lima, F. A., 82
 Lima, M. A. P., 42
 Lopes, M. C. A., 13, 19, 30
 Luna, H., 9
- Machado, A. E. H., 24, 48
 Malbousson, L. A. C., 39
 Malta, C. A. O., 21
 Maniero, A. M., 61, 75, 77
 Marinho, R., 17
 Marinho, R. R. T., 49, 62, 74
 Marinho, R. T., 63
 Marques, J. B., 11
 Martins, M. G. R., 6, 22, 36, 61, 77
 Matos, H. L. L., 45
 Medina, A., 1, 49, 54, 62, 63, 74
 Mendes, L., 17, 21
 Mendes, L. A. V., 49, 62, 63, 74
 Menezes, H. G. C., 18
 Menezes, T. M., 60
 Miranda, M. H. G., 47
 Mohallem, J. R., 4, 23, 28, 84
 Montenegro, E. C., 9
 Moraes, H. R., 11
 Moreno, R. R., 6
 Mundim, M. S. P., 73
- Nascimento, M. A. C., 39
 Nascimento, R. F., 1
 Nascimento, W. S., 14
 Neto, A. C., 16
 Neto, P. A. M., 5
 Neves, J. L., 60
 Neves, R. F. C., 13
- Olavo, L. S. F., 75
 Oliveira, A. L., 56
 Oliveira, A. N., 8, 12
 Oliveira, C. X., 73
 Oliveira, E. M., 42
 Oliveira, G. F. B., 78
 Oliveira, P. J. P., 37
 Oliveira, S. L., 43
 Oliveira, Y. R. A., 45
 Ornellas, F. R., 72, 81
- Paschuk, S. A., 26
 Patrocínio, A. O. T., 48
 Pedro, S. S., 29
 Pereira, J. A. S., 63
 Pereira, J. C. C., 22
 Pereira, J. W., 68
 Persichetti, E., 67
 Piot, O., 82
 Ponciano, C., 17
 Pontim, B. C. A., 31
 Poppe, P. C. R., 40
 Posati, T., 67
 Poveda, L. A., 4
 Prazeres, I., 54
- Prudente, F. V., 14, 27, 49, 54, 62–64, 71, 74, 75, 83
- Ragni, M., 27, 67, 76, 83
 Ramos, T., 33
 Reis, M., 29
 Resmer, P., 26
 Ressureição, C. G., 36
 Ribas, V. W., 68–70
 Ribeiro, F. A., 46
 Robert, J., 1
 Rocco, M. L., 46
 Rocha, H. B., 8, 12
 Rodrigues, G. L. P. M., 11
- Sacramento, R. L., 8, 12
 Santana, W. S., 27
 Santos, A. C. F., 15
 Santos, A. C. F., 7, 54, 80
 Santos, J. S., 50
 Santos, L. C., 6, 61
 Santos, L. S., 21
 Santos, M. A. C., 45
 Santos, M. C. L., 61
 Santos, M. J., 74
 Santos, R. R., 13
 Schmidt-Böcking, H., 10
 Seidel, E. P., 53
 Sigaud, L., 7, 9
 Silva, A. E. C., 76
 Silva, D. G. M., 19
 Silva, I. G., 78
 Silveira, N. P., 34, 35
 Silveira, T., 17
 Simões, A. S., 61
 Simões, R. A., 68–70
 Simas, A. M., 2
 Sismanoglu, B. N., 69
 Sobrinho, A. M. C., 39
 Souza, A. N., 30
 Souza, A. S., 45
 Souza, E. J. P., 59
 Souza, E. R., 59
 Souza, J. N., 49, 74
 Souza, L., 11
 Suave, R. N., 38
 Sugohara, R. T., 58
- Tanaka, H., 62
 Tavares, A. C., 9
 Tedesco, J. C. G., 29
 Tenfen, W., 44
 Tiedt, R., 57
 Trimeche, A., 1
- Varella, M. T., 50
 Varella, M. T. N., 42, 55
 Vargas, D. E., 37
 Ventura, F. O., 20
 Vianna, J. D. M., 6, 22, 36, 61, 77
- Wolff, W., 7–9, 12

Zanin, G. L., 52
Zanon, R. A. S., 53, 56
Zappa, F., 1