CINTRA, A. A. Da Silva, G. J. P. Método Híbrido Projeção Proximal Inercial para Desigualdade Variacional. In: CONGRESSO DE PESQUISA, ENSINO E EXTENSÃO DA UFG - CONPEEX, 4., 2007, Goiânia. Anais eletrônicos do XV Seminário de Iniciação Científica [CD-ROM], Goiânia: UFG, 2007. n.p.

Método Híbrido Projeção Proximal Inercial para Desigualdade Variacional

CINTRA, Adriana Araujo[1]; **Da Silva**, Geci José Pereira[2]

Palavras-chaves: Projeção,Inercial, Algoritmo, Convergência.

1. INTRODUÇÃO

Apresentamos o Método Híbrido Projeção Proximal Inercial para Desigualdade Variacional baseando-nos no trabalho de Alvarez e Attouch [2] para resolver o seguinte problema:

$$\text{Achar } x \in \mathcal{H} \text{ tal que } 0 \in F(x), \tag{1}$$

onde $F(\cdot)$ é um operador monótono maximal (ou uma multifunção) sobre $\mathcal{H}$. Observamos que o problema de programação convexa

$$\min_{x \in C} f(x), \tag{2}$$

onde $f : C \longrightarrow \mathcal{H}$ é uma função convexa e $C \subseteq \mathcal{H}$ é um conjunto convexo pode ser escrito como

$$\min_{x \in \mathbb{H}} f(x) + \delta_C(x), \tag{3}$$

onde

$$\delta_C(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x \in C \\ \infty, & \text{se } x \notin C. \end{cases} \tag{4}$$

E, (3) é equivalente a

$$\text{Achar } x \in \mathcal{H} \text{ tal que } 0 \in \partial f(x) + \mathcal{N}_C(x), \tag{5}$$

onde $\partial f(\cdot)$ é o subdiferencial de f e $\mathcal{N}_C(\cdot) = \partial_C(\cdot)$ é o operador normal.

Assim, tomando $F(\cdot) = \partial(\cdot) + \mathcal{N}_C(\cdot)$, temos como uma aplicação para o problema (1) o problema de programação convexa (2).

Um dos principais algoritmos para resolver o problema (1) é o algoritmo do ponto proximal, proposto inicialmente por Martinet e depois generalizado por Rockafellar.

Especificamente, considerando $x^i \in \mathcal{H}$, uma aproximação para a solução de (1), o algoritmo do ponto proximal gera a próxima iterada resolvendo o subproblema

$$\text{Achar } x \in \mathcal{H} \text{ tal que } 0 \in F(x) + \lambda_i(x - x_i), \tag{6}$$

onde $\lambda_i > 0$ é um parâmetro de regularização. Como resolver (6) exatamente pode ser tão difícil quanto resolver o problema original (1), é interessante do ponto de vista prático (implementação) quando os subproblemas são resolvidos aproximadamente, isto é,

$$\text{Achar } x^{i+1} \in \mathcal{H} \text{ tal que } 0 = v^{i+1} + \lambda_i(x^{i+1} - z^i) + \varepsilon^i, \tag{7}$$

onde $z^i = x^i + \alpha_i(x^i - x^{i-1})$ e $\varepsilon^i \in \mathcal{H}$ é um erro associado com a solução inexato do subproblema (6).

Usamos uma iteração proximal inercial inexata para construir um hiperplano que separa estritamente a iterada atual (x^i) do conjunto solução do problema, então a próxima iterada, do algoritmo que iremos propor, é obtida como uma projeção da

iterada z^i no hiperplano. Assim, a próxima iterada estará mais do conjunto solução do que a iterada atual. Estudaremos as condições a ser imposta no erro ε^i a fim de obter um hiperplano separador apropriado. Observamos, também que ao colocarmos informações de segunda ordem estaremos acelerando a convergência.

2. METODOLOGIA

A abordagem do assunto foi feita através de estudo dos conceitos básicos de espaços vetoriais,espaços vetoriais com produto interno, espaços de Hilbert,convergência fraca e forte em espaços de Hilbert e por meio de pesquisa bibliográfica, bem como do uso do softwares e seus recursos algébricos e geométricos.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

O Algoritmo proposto para resolver o problema (1), é da seguinte forma:

Algoritmo 1. *Escolha algum* $x_0, x_1 \in \mathcal{H}$ *e* $\sigma \in [0,1)$. *Tendo* x_n *escolha* $\mu > 0$ *e*

$$\textit{Encontre } y_n \in \mathcal{H} \textit{ tal que } 0 = v_n + \mu_n(y_n - z_n) + \varepsilon_n \quad v_n \in A(y_n), \tag{8}$$

onde

$$z_n := x_n + \alpha_n(x_n - x_{n-1}) \textit{ e } \|\varepsilon_n\| \leq \sigma \max\{\|v_n\|, \mu_n\|y_n - z_n\|\} \tag{9}$$

Pare se $v_n = 0$ *ou* $y_n = z_n$. *Caso contrario faça*

$$x_{n+1} = z_n - \frac{\langle v_n, z_n - y_n\rangle}{\|v_n\|^2} v_n \tag{10}$$

Note que esta última equação resulta em

$$x_{n+1} = proj_{H_n}(z_n)$$

onde $H_n := \{z \in \mathcal{H}, \langle v_n, z - y_n\rangle\}$.

Provamos convergência do Algoritmo 1, escolhendo os parâmetros μ_k e α_k de forma que $\sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \|x_{n-1} - x_n\|^2 < \infty$, o que torna o algoritmo totalmente implementável.

Exemplo 1. *Aplicaremos o Algoritmo Híbrido Ponto Proximal - Projeção resolver o seguinte problema*

$$\min_{x \in \mathbb{R}^2} f(x,y) \tag{11}$$

onde $f(x,y) = x^2 + y^2$. *Seja* $T = \nabla f(x,y) = (2x, 2y)$. *Vamos considerar* $\varepsilon_i = 0$ *Seja* $\sigma \in [0,1)$ *e* $\mu_i = \sqrt{i}$.

Primeiramente vamos escolher $x^1 = (3,4)$, *então* $\mu_1 = 1$. *Agora temos que achar* y^1 *tal que* $0 = v^1 + (y^1 + x^1)$, *onde* $v^1 = T(y^1)$. *Logo* $y^1 = (1, \frac{4}{3})$ *e portanto* $v^1 = (2, \frac{8}{3})$. *Como* $v^1 \neq 0$ *e* $x^1 \neq y^1$ *então pelo algoritmo*

$$x^2 = x^1 - \frac{\langle v^1, x^1 - y^1\rangle}{\|v^1\|^2} v^1 = (1, \frac{4}{3}) = y^1 \tag{12}$$

Observe que $5 = \|x^1\| > \|x^2\| = 1,666$.

Temos agora que $\mu_2 = \sqrt{2}$. *Analogamente achamos* $y^2 = (\frac{\sqrt{2}}{2+\sqrt{2}}, \frac{4\sqrt{2}}{3(2+\sqrt{2})})$. *Portanto* $v^2 = (\frac{2\sqrt{2}}{2+\sqrt{2}}, \frac{8\sqrt{2}}{3(2+\sqrt{2})})$ *Como* $v^2 \neq 0$ *e* $x^2 \neq y^2$ *então:*

$$x^3 = x^2 - \frac{\langle v^2, x^2 - y^2\rangle}{\|v^2\|^2} v^2 = (\frac{\sqrt{2}}{2+\sqrt{2}}, \frac{4\sqrt{2}}{3(2+\sqrt{2})}) = y^2 \tag{13}$$

Observe novamnente que $\|x^1\| > \|x^2\| = 1,666 > \|x^3\| = 0,4978$.

Fazendo os mesmos calculos obtemos

$$x^4 = (\frac{\sqrt{6}}{(2+\sqrt{2})(2+\sqrt{3})}, \frac{4\sqrt{6}}{(2+\sqrt{2})(2+\sqrt{3})}) = y^3 \tag{14}$$

$$x^5 = (\frac{\sqrt{6}}{2(2+\sqrt{2})(2+\sqrt{3})}, \frac{2\sqrt{6}}{3(2+\sqrt{2})(2+\sqrt{3})}) = y^4 \tag{15}$$

Observe novamente que $\|x^1\| > \|x^2\| > \|x^3\| = 0,4978 > \|x^4\| = 0,4880 > \|x^5\| = 0,1601$

Portanto o algoritmo gera a sequência $\{x^1, x^2, x^3, x^4, x^5, ...\}$ *que converge para* $(0,0)$ *que é a solução do problema* (11).

Exemplo 2. *Aplicaremos o algoritmo* (1) *para resolver o seguinte problema*

$$\min_{x \in \mathbb{R}^2} f(x,y) \tag{16}$$

onde $f(x,y) = x^2 + y^2$. *Seja* $T = \nabla f(x,y) = (2x, 2y)$. *Vamos considerar* $\varepsilon_n = 0$ *Seja* $\sigma \in [0,1)$ *e* $\mu_n = \sqrt{n}$ *e* $\alpha_n = \frac{1}{n}$.

Primeiramente vamos escolher $x^1 = (3,4)$ *e* $x^2 = (1, \frac{4}{3})$, *então* $\mu_2 = \sqrt{2}$*e* $\alpha_2 = \frac{1}{2}$. *Agora temos que achar* y^2 *tal que* $0 = v^2 + (y^2 - z^2)$, *onde* $v^2 = T(y^2)$ *e* $z_2 = x_2 + \alpha_2(x_2 - x - 1) = 0$.

Portanto $y_2 = 0$. *Logo* $y_2 = z_2$.

4. CONCLUSÃO

Neste trabalho propomos um novo algoritmo proximal obtido pela união do método híbrido proximal com o método inercial proximal. A principal vantagem deste algoritmo é que permite um critério mais construtivo da tolerância do erro para resolver subproblemas inerciais proximais. Além disso, a informação de segunda ordem pode ser explorada a fim de acelerar a convergencia. É importante mencionar que se $\sigma = 0$, o algoritmo proposto reduz ao método clássico ponto proximal inercial exato. De fato, $\sigma = 0$ implica que $\varepsilon_n = 0$, e consequetemente $x_{n+1} = y_n$. Neste caso, a analise presente provém de uma prova alternativa da convergencia do método proximal inercial exato que permite uma interpretação geométrica.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Moudafi, A. A hybrid inertial projection-proximal methods for variational inequalities, JIPAM, vol. 5, n. 3, article 63,

2.Rockfellar, R. T. Monotono operators and the proximal point algorithm, SIAM Journal on Control and Optimization 14 (1976) 877-898.

[1] Bolsista de Iniciação Científica. Instituto de Matemática e Estatística, drickynha_mat@hotmail.com

[2] Orientador Instituto de Matemática e Estatística, geci@mat.ufg.br

IMPUREZA DOADORA EM UM POÇO QUÂNTICO DE GaAs SOB EFEITO DE CAMPOS MAGNÉTICOS

OLIVEIRA, Alexandre Miranda de[1], **BORGES**, Antônio Newton[2].

Palavras-chave: Semicondutores, Impureza, GaAs, Campo Magnético, Poço Quântico

1. INTRODUÇÃO

A fabricação de estruturas semicondutoras compostas de camadas alternadas de dois materiais semicondutores com diferentes perfis de dopagem por impurezas e interfaces abruptas, tornou-se possível graças aos avanços nas técnicas de crescimento de cristais principalmente ao desenvolvimento de máquinas tais como a de epitaxia por fluxo molecular (MBE) e a de deposição de vapor químico organo-metálico (MOCVD). O arseneto de gálio (GaAs) e o arseneto de gálio dopado com alumínio (AlGaAs), têm sido os materiais mais usados na fabricação de heteroestruturas por apresentarem características muito interessantes, a começar pela constante de rede que é praticamente a mesma, o que produz interfaces de grande qualidade na junção (interfaces abruptas). Além disso a energia de gap do GaAs é menor que a energia de gap do AlGaAs, de modo que na junção há uma diferença abrupta de gap, criando um perfil de potencial conhecido por potencial degrau. Um poço quântico é formado através do crescimento de três camadas consecutivas de semicondutores sobrepostas umas às outras, sendo a camada do meio composta por um material diferente daquele das camadas laterais. Por exemplo, AlGaAs-GaAs-AlGaAs forma um poço quântico retangular de confinamento eletrônico no GaAs. Esse poço de potencial tem alturas das barreiras de potencial finita e delimitadas pela concentração de alumínio na liga AlGaAs, o material da barreira. O elétron confinado no poço quântico apresenta níveis de energia discretos como previstos pela Mecânica Quântica (RESNICK e EISBERG, 1971, COHEN, 1977). Um aspecto fundamental da física de semicondutores é o estudo do efeito de impurezas sobre as propriedades de transporte eletrônico nos dispositivos. Tais impurezas limitam a mobilidade dos elétrons e são impossíveis de serem eliminadas dos processos de crescimento. Sendo assim poços quânticos dopados com impurezas são crescidos em laboratório, justamente para a avaliação de seus efeitos.

2. METODOLOGIA

Escreveremos a equação de Schroedinger para a impureza confinada em um poço quântico de GaAs e verificaremos os efeitos do campo magnético sobre os níveis de energia da impureza. Como tais problemas não têm solução analítica serão tratados com o auxílio do método variacional (OSÓRIO et al.,1997), escolhendo uma função de onda tentativa gaussiana, com um parâmetro variacional.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A diferença total de intervalo de banda entre GaAs e $Ga_{1-x}Al_xAs$ é dada pela seguinte expressão (LEE et al.,1980)

$$\Delta E_g = 1.155x + 0.37x^2 \text{eV}. \tag{1}$$

Nós assumimos que a descontinuidade da banda de condução ou a altura V_0 da barreira

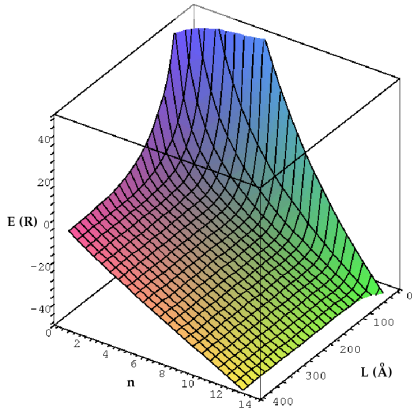


Figura 1: Variação da energia $E = \langle \mathcal{H} \rangle$ com n e o comprimento do poço.

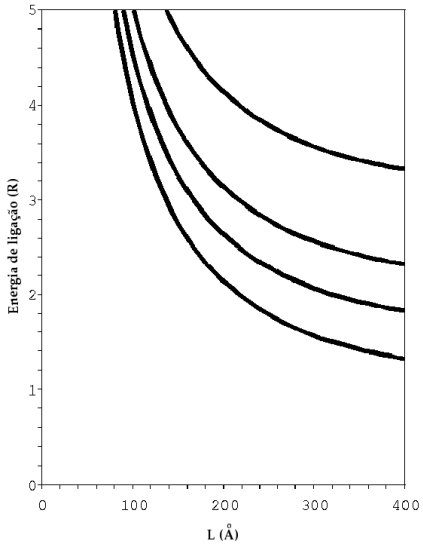


Figura 2: Variação da energia de ligação do estado fundamental para uma impureza no centro do poço quântico do GaAs como função do comprimento do poço. A concentração de Al é $x = 0.3$.

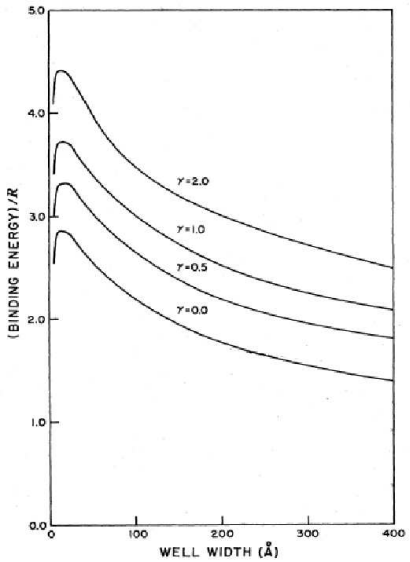


Figura 3: Variação da energia de ligação obtida por GREENE e BAJAJ (1985).

é 85% de ΔE_g. Para $m = 0$ obtivemos a seguinte expressão para a energia $E(\alpha) = \langle \mathcal{H} \rangle$

$$E(\alpha) = \left[\frac{1}{8\alpha} \frac{\gamma^2}{a_0^2} - 3\alpha a_0^2 - 4\sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{\alpha} a_0 + \frac{V_0}{R} \left(1 - \mathrm{erf}\,(L\sqrt{\frac{\alpha}{2}}) \right) \right] \frac{1}{\mathrm{erf}\,(L\sqrt{\frac{\alpha}{2}})} \tag{2}$$

em termos do Rydberg efetivo R. Fazendo $\alpha = n/a_0^2$ podemos reescrever a equação (2) da seguinte forma

$$E(n) = \left[\frac{1}{8n} \gamma^2 - 3n - 4\sqrt{\frac{2n}{\pi}} + \frac{V_0}{R} \left(1 - \mathrm{erf}(\frac{L}{a_0}\sqrt{\frac{n}{2}}) \right) \right] \frac{1}{\mathrm{erf}(\frac{L}{a_0}\sqrt{\frac{n}{2}})} \tag{3}$$

, com n um número real positivo, o que facilita uma análise da energia em função do parâmetro α. Na figura (1) podemos ver o gráfico da energia E em função de n e da lar-

gura L do poço. Devido ao comportamento apresentado pela energia E resolvemos fazer $n = 0.123$, um dos parâmetros utilizados por GREENE e BAJAJ (1985) para a obtenção de sua energia de ligação. Dessa forma obtivemos gráfico de nossa energia de ligação E_{1s} em função de L e comparamos com o resultado obtido por estes autores, mostrado nas figuras (2) e (3).

4. CONCLUSÃO

Verificamos que a função de onda tentativa não foi suficiente para que obtivéssemos uma expressão razoável para $\langle \mathcal{H} \rangle$ que pudesse ser minimizada. Decorre disso que deve-se escolher uma função de onda tentativa mais complexa como já feita pelos autores supracitados. Como esperado, vimos que para um dado valor do campo magnético, a energia de ligação é mais alta que em campo magnético zero. Percebemos que a energia de ligação do estado fundamental obtida por nós tem um comportamento semelhante à de outros pesquisadores para grandes valores do comprimento do poço. Porém verificou-se uma grande divergência á medida que se diminui o valor do comprimento L do poço. Acreditamos que um estudo similar detalhado de impurezas doadoras em estruturas de poços quânticos proverá informações mais ricas sobre seus níveis de energia, e sobre as propriedades das próprias estruturas.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. EISBERG, R., R. RESNICK. Física Quântica, 2.a edição, Editora Campus, 1971.
2. COHEN-TANOUDJI. Quantum Mechanics, 2.a edição, John-Wiley editora, 1977.
3. F. A. P. OSÓRIO, A. N. BORGES, A. A. CAPARICA, J. R. LEITE. Solid State Commun. 103, 375 (1997).
4. LEE, H. J., JURAVEL, L. Y., WOOLEY, J. C. and SPRINGTHORPE, A. J. Phys. Rev. B21, 659 (1980).
5. GREENE, R. L., BAJAJ, K. K. Phys. Rev. B31, 913 (1985).

---

[1]Bolsista de iniciação científica. Instituto de Física.alexandmail@gmail.com.br
[2]Orientador, Instituto de Física, UFG, newton@if.ufg.br

Análise Do Modelo HIV No Contexto Fuzzy

Malaquias, Arianny Grasielly Baião [1]; **Mizukoshi** , Marina Tuyako [2]

Palvras-chave: carga viral, $CD4+$, taxa de tranferência, pertinência.

1 Introdução

Alguns fenômenos biológicos exibem incertezas graduais. Geralmente em estudos de doenças como a AIDS temos apenas informações parciais, onde as informações são dadas por variáveis linguísticas e nestes casos a teoria mais indicada é a de conjuntos fuzzy ([3]).

Neste trabalho faremos a análise de um modelo HIV que considera a dinâmica de conversão assintomático para sintomático. Discutiremos a influência da escolha de conjuntos fuzzy de entrada contínuos ou não no processo de defuzzificação deste modelo.

2 Metodologia

Uso do acervo bibliográfico e de pesquisas na internet para estudo e compreensão dos conceitos e definições envolvidos no sistema baseado em regras fuzzy e nos métodos de inferência para a modelagem lingüística no contexto fuzzy. Utilização do Toolbox Fuzzy do pacote Matlab para o estudo do Modelo HIV utilizando a Teoria de Conjuntos Fuzzy.

3 Resultados e Discussões

O Vírus da Imunodeficiência Humana, conhecido como HIV (sigla originada do inglês: Human Immunodeficiency Virus), é um vírus pertencente à classe dos retrovírus e causador da aids. A infecção por HIV é por via sexual, intravenosa ou mãe-filho. Ao entrar no organismo humano, esse vírus pode ficar silencioso e incubado por muitos anos. Esta fase denomina-se assintomática e relaciona-se ao quadro em que uma pessoa infectada não apresenta nenhum sintoma ou sinal da doença. O período entre a infecção pelo HIV e a manifestação dos primeiros sintomas da aids irá depender, principalmente, do estado de saúde da pessoa.

O HIV age no interior das células do sistema imunológico, responsável pela defesa do corpo. Ao entrar na célula, o HIV passa a fazer parte de seu código genético. As células do sistema imunológico mais atingidas pelo vírus são os linfócitos CD4+, usados pelo HIV para fazer cópias de si mesmo.(fontes: Ministério da Saúde: www.aids.gov.br e www.aidsbrasil.com)

Existe uma relação entre a carga viral de HIV, a quantidade de $CD4+$ e a possibilidade de desenvolver a AIDS. Por exemplo, cargas altas de HIV destroem grandes quantidades de linfócitos $CD4+$ e o sistema imunológico perde sua eficácia. Carga viral baixa não tem condição de afetar substancialmente o sistema imunológico. ([1])

Os parâmetros carga viral V e nível de $CD4+$ não possuem quantificações exatas. Por isso essas variáveis que são tratadas por faixas com fronteiras imprecisas e descritas linguísticamente podem ser modelados por conjuntos fuzzy. Como consequência, λ (taxa de transferência de indivíduos assintomáticos em sintomáticos) deve ser também uma variável linguística. Então obteremos a saída do modelo apartir de simulações feitas no toolbox fuzzy do software matlab utilizando para tanto uma base de regras fuzzy obtida por Jafelice [1]com a ajuda de um especialista(tabela 1), o método

Cd4+/V	baixa	média	alta
muito baixo	forte	forte	forte
baixo	médio	forte	forte
médio	médio	médio	médio
médio alto	médio fraco	médio fraco	médio
alto	fraco	fraco	fraco

Tabela 1: Regras Fuzzy

de inferência de Mamdani e o método de defuzzificação do centro de gravidade. [Veja mais detalhes sobre o método de inferência em [2] e [3]]

As funções de pertinência dos conjuntos fuzzy assumidos por cada uma das variáveis V, $CD4+$ e λ, são do tipo trapezoidais e estão representadas, nas figura 1 e 2. Na figura 2 também podemos ver a saída do modelo.

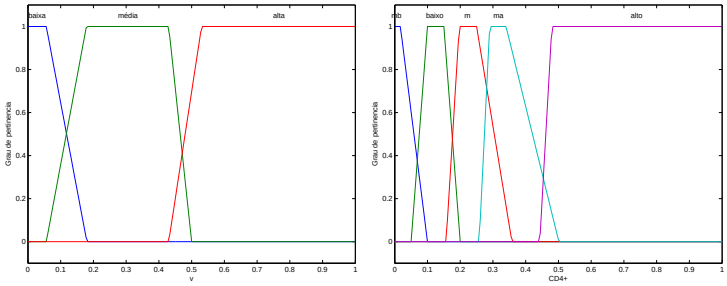


Figura 1: variáveis de entrada: V e CD4+.

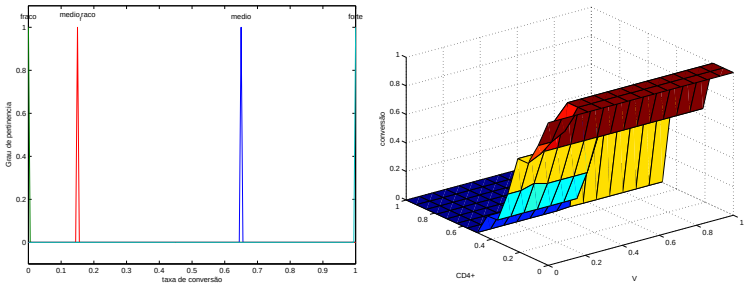


Figura 2: variável de saída: taxa de conversão e superfície de saída do modelo.

Agora consideraremos números fuzzy do tipo gaussianos (que tem forma de sino, veja figura 3) para as funções de pertinência do modelo, usaremos a mesma base de regras fuzzy (tabela1) e mesma variável de saída λ(figura 3). A saída do modelo foi obtida utilizando o método de inferência de Mamdani.

Note que agora as funções de pertinência das variáveis V e $CD4+$ são contínuas ao invés de discretas e portanto não apresentam "bicos". Por exemplo, uma carga viral igual a 0.06 representa um valor de descontínuidade no modelo em que usamos funções de pertinência do tipo trapezoidais e que denotaremos por modelo HIV discreto.(Veja figura 1)

Consideremos tanto no modelo HIV com funções de pertinência com um número finito de pontos de não diferenciabilidade quanto no modelo com funções de pertinência diferenciáveis uma carga viral baixa igual a 0.06 e uma quantidade alta de $CD4+$ igual 0.51 (observe que os dois valores

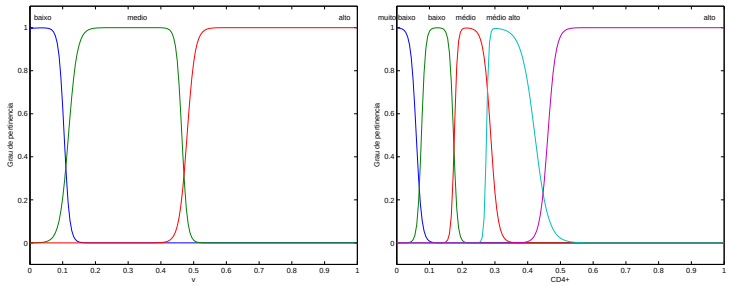


Figura 3: variáveis de entrada: carga viral e nível de $CD4+$.

são pontos de descontinuidade no modelo discreto), utilizando a base de regras fuzzy e o método de Mamdani obtemos uma taxa de conversão de 1.7×10^{-9} para o modelo contínuo enquanto que no modelo discreto obtemos uma taxa de conversão identicamente nula. Neste caso o modelo discreto é mais realístico uma vez que com uma quantidade alta de $CD4+$ e uma carga viral baixa espera-se que não se tenha conversão de indíviduos assintomáticos em sintomáticos. Comparando os demais pontos de descontinuidade do modelo discreto com diferentes quantidades de $CD4+$ e estes mesmos pontos no modelo contínuo obtivemos resultados mais satisfatórios com o modelo discreto. E nos demais valores comparados a diferença, quando existiu entre os dois foi irrelevante para o problema estudado.

4 Conclusão

A patir das considerações feitas acima concluimos que para o modelo estudado as funções de pertinência representadas por funções contínuas, neste caso trapezoidais, definem com maior precisão as variáveis de entrada, cuja inferência com a variável de saída e a base de regas fuzzy nos conduz ao resultado desejado do modelo determinístico estudado por [1] e contempla diagnósticos de especialistas da área.

Referências

[1] Jafalice, R.M., De Barros, L.C., Bassanezi, R.C. e Gomide, F. , *Methodology to Determine the Evolution of Assymptomatic HIV Population Using Fuzzy Set Theory*, International Journal of Uncertainty, Fuzziness and Knowledge-Based Systems, Volume13,N°1,Fevereiro de 2005.

[2] Silva, J.D.M. da, *Análise de Estabilidade de Sistemas Dinâmicos P-fuzzy com Aplicações em Biomatemática*, Ph.D. thesis, Unicamp, Campinas, 2005.

[3] BARROS, L. C., BASSANEZI, R. C. , *Introdução à Teoria Fuzzy - Aplicações em Biomatemática*, Eitora Unicamp, Campinas,201.

FONTE DE FINANCIAMENTO: Ministério da Integração Nacional e CNPq.

[1] Bolsista de Iniciação Científica. Instituto de Matemática e Estatística, ariannybaiao@hotmail.com

[2] Orientadora Instituto de Matemática e Estatística, tuyako@mat.ufg.br

FUNGOS PRODUTORES DE FENOLOXIDASES CAPAZES DE DESCOLORIR CORANTES

BARBOSA, Danielle Rocha[1] **SANTIAGO**, Mariângela Fontes[2]

Palavras-chave: descoloração, fungos, azul n°02 indigotina.

1.INTRODUÇÃO

Os processos industriais são grandes consumidores de água e de corantes sintéticos, geradores de efluentes volumosos e complexos com elevada carga orgânica, aliada ao elevado teor de sais inorgânicos. A grande diversidade e complexidade desses efluentes, aliadas a imposições de legislação que exigem tratamentos eficientes, têm levado ao desenvolvimento de novas tecnologias que buscam o tratamento melhor e mais adequado, considerando custos, tempo e eficiência dos processos existentes na reciclagem e eliminação de toxicidade (BUMPUS, *et al*, 1986; SEMPLE *et al,*1995).

Grandes quantidades de diferentes corantes químicos são usados em várias aplicações industriais, sendo que uma significante proporção destes aparece na forma de resíduos. Neste contexto, os diversos corantes utilizados em vários segmentos industriais aparecem como um grande problema ambiental. Adicionalmente, o descarte de corantes em rios e lagos prejudica a absorção de energia luminosa, alterando os ecossistemas aquáticos (FERREIRA *et al*, 2000), afetam também o efluente quanto à estética e a solubilidade do gás na água (FU & VIRARAGHAVAN, 2001).

Como uma vasta série de corantes estruturalmente diferentes podem ser usados em curto tempo em um processo de fabricação, o efluente pode ser altamente variável em sua composição. Isso realça a necessidade de um processo de tratamento inespecífico para o efluente com corante.

Os caminhos atuais da biotecnologia indicam fungos basidiomicetos degradadores de lignina, como eficientes na degradação de grande variedade de compostos e de corantes, com alto potencial de ação na recuperação de ambientes contaminados (BARR *et al*, 1994).

2. METODOLOGIA

Microrganismos – *Trametes versicolor, Lentinus edodes, Ganoderma applanatum, Phanerochaete chrysosporium*. Os fungos foram cedidos pela Fundação Tropical André Tosello (Campinas, SP) e mantidos em meio de extrato de malte 2% (P/V) a 4°C.

Corante – FD&C Azul N°02 Indigotina.

Meios de cultura (Jarosz-wilkolazka *et al*, 2002): Meio ágar batata (BDA) e Meio ágar básico composto de 0,25g de extrato de levedura; 2g KH_2PO_4; 0,5 g $MgSO_4x7H_2O$; 0,1g de $CaCl_2$; 0,5 g de tartarato de amônia; 1,8g de 2,2-dimetilsucinato; 0,2; 0,4; 0,8;1,6; 2,4 g de corante; 20g de agar e água destilada para completar 1 litro.

Condições de cultura - O meio líquido utilizado foi o meio de cultura citado acima sem ágar e em cada erlenmeyer foi colocado 5 discos de fungo com idade de 7 dias de crescimento no meio ágar batata. Os erlenmeyers foram incubados em shaker com agitação de 180rpm a uma temperatura de 28°C durante 20 dias. A descoloração foi monitorada através de leitura espectrofotométrica em 610nm. Cada fungo foi testado em duplicata.

Determinação do comprimento de onda - Para determinar-se o comprimento de onda a ser realizada a leitura do meio contendo o corante FD&C Azul N°02 Indigotina, preparou-se uma solução de corante à 0,02% e realizou-se uma varredura espectrofotométrica, de 190 até 730nm, mudando o comprimento de onda de 15 em 15nm.
Determinação do pH do meio de cultura – No período final de incubação, o meio de cultura foi filtrado e este foi submetido à análise pH.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Após a realização da varredura da solução do corante Azul N°02 Indigotina a 0,02%, observou-se que o pico máximo de absorção se dá em λ=610nm.
Observou-se que em seis dias de cultivo, haviam mudanças da coloração do meio com o corante, que inicialmente é azul, e em alguns cultivos tornava-se verde, em outros amarelo-alaranjado. De acordo com Paschoal *et al*, o corante índigo blue (azul), é reduzido a forma leucoíndigo em solução alcalina. E de acordo com Bond *et al* e Roessler *et al*, a forma leucoíndigo deste corante é de coloração verde, enquanto que o seu correspondente ânion índigo radical é de cor amarelada.
Pode-se observar visualmente que no sexto dia de cultivo o meio contendo o corante, onde foram inoculados cinco discos do fungo *Trametes versicolor*, apresentava-se com coloração amarelo-alaranjada em todas as concentrações analisadas. Realizou-se então uma varredura do filtrado do meio de cultura, após os vinte dias de cultivo e notou-se que a maior absorbância se dá em λ = 550nm.
Nos inócuos do fungo *Lentinus edodes*, notou-se que ao oitavo dia de descoloração o meio assumia uma coloração amarelo, nas concentrações de 0,02; 0,04; 0,08% e uma coloração amarelo-alaranjada nas concentrações de 0,16 e 0,24%. Realizou-se também uma varredura espectrofotométrica do filtrado do meio de cultura, e notou-se que a maior absorbância se dá em λ=600.
Já nos erlenmeyers contendo o meio com os discos do fungo *Phanerochaete chrysosporium*, notou-se que ao sexto dia de incubação o meio de tornava verde. Da mesma forma foi realizada uma varredura espectrofotométrica do filtrado do meio de cultura, e notou-se que a maior absorbância se dá em λ= 550nm.
Para os inócuos com o fungo *Ganoderma applanatum* não se observou mudança visuais na coloração do meio de cultura. Ocorre a descoloração do corante, porém de forma mais lenta daquela observada nos outros fungos.
Notou-se que não foi possível determinar significativamente a diminuição da absorbância dos meios contendo o corante e os fungos inoculados, a diminuição da absorbância não se mostrou gradual, este fato provavelmente deve-se a uma modificação da estrutura do corante pelo fungo, ou devido a mudanças do pH do meio.
Após os vinte dias de cultivo determinou-se o pH dos filtrados dos meios de cultura e os resultados estão dispostos no quadro 1.

FUNGO	pH na Conc. 0,02	pH na Conc. 0,04	pH na Conc. 0,08	pH na Conc. 0,16	pH na Conc. 0,24
Trametes versicolor	5,2	4,52	5,46	5,2	4,0
Lentinus edodes	6,58	5,94	5,84	5,29	4,35
Ganoderma applanatum	4,62	4,51	4,27	4,17	4,90
Phanerochaete chrysosporium	4,99	3,27	4,55	3,53	4,10

Quadro 1 – Valores de pH dos filtrados dos meios de cultura contendo o corante FD&C Azul N°02 Indigotina, após vinte dias de incubação.

4. CONCLUSÃO

Não foi possível estabelecer uma coerência entre os resultados encontrados, pois não se observou a descoloração do corante FD&C Azul N°02 Indigotina pelo fungos analisados. Observou-se apenas uma modificação na estrutura deste corante, alterando sua coloração visual, o que não implicou em absorbâncias significativas no comprimento de onda analisado, visto que estas apresentam pico máximos de absorção em comprimentos de onda distintos.

Ainda não é possível relatar o motivo desta alteração estrutural, provavelmente deve-se a metabolização pelo fungo de algum componente do meio de cultura, ainda não identificado, ou pode dever-se a outro fator ainda não determinado.

Tentativas, sem sucesso, de determinar uma real mudança no pH do meio, passando este de ácido para alcalino, corroboram com a hipótese de que o fungo modifica a estrutura do corante utilizando-se de algum componente do meio de cultura, sem alterar significativamente pH do meio. Deve-se testar outros meios de cultura líquidos, para corroborar esta hipótese.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BARR, D.P.; AUST, S.D.; **Environment Science Technology**, 28:78, 1994.

BOND, A. M.; MARKEN, F.; HILL, E.; COMPTON, R. G.; HÜGEL, H.; *J. Chem.*

BUMPUS, J.A.; AUST, S.D.; **Bioassay,** 6: 170, 1986.

FERREIRA V. S., MAGALHÃES D. B., KLING S.H, DA SILVA J. G., BON E. P. S., N-demethylation of methylene Blue by Lignin peroxidase from Phanerochaete chrysosporium. **Applied Biochemical Biotechnology** 84-86: 255-65, 2000.

FU, Y. & VIRARAGHAVAN, T. Fungal descolorization of dye wastwaters: e review. **Bioresourse technology**, 79: 251-262, 2001.

JAROSZ-WILKOLAZKA A, KOCHMANSKA-RDEST J, MALARCZYK E, WARDAS W., LEONOWICZ A. Fungi and their ability to decolourize azo and anthraquinonic dyes. **Enzyme and Microbial Technology** 30: 566-572, 2002.

PASCHOAL,F. M. M.; FILHO, G. T; Aplicacão da tecnologia de eletrofloculação na recuperação do corante índigo blue a partir de efluentes industriais. **Química Nova**, 28: 766-772, 2005.

ROESSLER, A.; CRETTENAND, D.; DOSSENBACH, O.; MARTE, W.; RYS, P.; ***Electrochim. Acta***, *47*, 2002.

SEMPLE,K.T.; FEMOR,T.R.; **Proceedings of the 14th International Congress on the Science and Cultivation of Edible Fungi**, 17: 917, 1995.

Soc. Perkin Trans. 2,1735, 1997.

1. Bolsista Iniciação Científica. Faculdade de Farmácia. UFG. danisrb@gmail.com
2. Orientadora. Faculdade de Farmácia. UFG. mfs@farmacia.ufg.br

ESTRUTURA ELETRÔNICA E ANÁLISE DA DIMENSIONALIDADE DE SUPER-REDES SEMIMAGNÉTICAS

OLIVEIRA, David Marçal Machado de*; LEÃO, Salviano Araújo†; SOUZA, Márcio Adriano Rodrigues‡
Instituto de Física-UFG

Palavras-Chaves: Densidade de Estados, Super-redes de spin, Semicondutores Semimagnéticos

I. INTRODUÇÃO

Investigamos as propriedades eletrônicas das super-redes de spin na presença de um campo magnético aplicado ao longo da direção de crescimento calculando a estrutura eletrônica e a densidade de estados. Nossos resultados nos permitiu analisar a dimensionalidade dos estados do sistema em função do campo magnético aplicado e do spin dos portadores. As heteroestruturas formados pela alternância periódica de materias do tipo $A_{1-x}Mn_xB/A_{1-y}Mn_yB$, são conhecidas como super-redes semimagnéticas.

As super-redes de spin (*Spin Superlattices - SSL*), baseadas em semicondutores semimagnéticos, foram propostas teoricamente por von Ortenberg[1] e realizadas experimentalmente por Dai *et al.*[2] e por Chou *et al*[3]. O potencial da super-rede pode ser aproximado por um poço quadrado, facilitando assim simulações teóricas. A super-rede de spin consiste em camadas de compostos magnéticos e não-magnéticos com mesmo *gap*, não tendo assim diferença de energia entre banda de valência e condução. Na ausência de campo magnético, nenhuma variação na banda de condução ou de valência é vista quando se move entre as camadas da super-rede. Entretanto, quando um campo magnético é aplicado, o alinhamento das bandas é completamente alterado devido à grande separação de spin nos níveis da camada magnética, e agora, o *band offset* visto pelo portador depende do spin. Para portadores de *spin-down*, as camadas de materiais magnéticos se tornam poços e, para as camadas de não-magnéticos, barreiras. Já para *spin-up*, as camadas magnéticas se tornam barreiras e as não-magnéticas poços. Isso ocorre por que o manganês possui a camada 3d semipreenchida, possuindo propriedades magnéticas. Devido a essa propriedade esses materiais tem se mostrado promissores para a aplicação em dispositivos optoeletrônicos. Nesses sistemas, a influência do campo magnético aplicado faz surgir um efeito Zeeman gigante que não é observado nos semicondutores convencionais. Na presença de um campo magnético, o hamiltoniano de Heisenberg (H_{ex}) descreve a interação de troca entre os elétrons 3d e os portadores das bandas. Como os portadores possuem funções de onda espacialmente estendidas, isto nos permite usar as seguintes aproximações:

- Cristal Virtual

$$H_{ex} = \sum_{\vec{R}_i} J(\vec{r} - \vec{R}_i)\vec{S}_i \cdot \vec{\sigma} \Rightarrow H_{ex} = x\langle \vec{S_B} \rangle \cdot \vec{\sigma} \sum_{\vec{R}} \vec{J}(\vec{r} - \vec{R})$$

- Campo Médio

$$\langle S_B \rangle = -\frac{5}{2}\mathcal{B}_{5/2}\left(\frac{5}{2} g M_n \mu_B B / k_B T\right)$$

- Modelo de Gaj

$$S = 5/2 \rightarrow S_0 = S_0(x) \quad ; \quad T \rightarrow T_{ef} = T + T_0(x)$$

II. MODELO TEÓRICO

Para se obter a evolução temporal da função de onda, devemos resolver:

$$\Psi(z, t + \Delta t) = exp\left[-\frac{iV(z)\Delta t}{2\hbar}\right] exp\left[-\frac{ip^2\Delta t}{2m\hbar}\right] exp\left[-\frac{iV(z)\Delta t}{2\hbar}\right] \Psi(z, t). \quad (1)$$

* Bolsisita. davidufg@gmail.com
† Coorientador. salviano@if.ufg.br
‡ Orientador. marcio@if.ufg.br

Numericamente isto é feito discretizando o espaço em uma rede não uniforme. A função de onda inicial e o potencial $V(x)$ são então calculados em cada ponto.

$$\xi(z, t + \Delta t) = exp\left[-\frac{iV(z)\Delta t}{2\hbar}\right]\Psi(z, t) \tag{2}$$

$$\eta(z, t + \Delta t) = exp\left[-\frac{ip^2\Delta t}{2m\hbar}\right]\xi(z, t + \Delta t). \tag{3}$$

Devido à periodicidade da super-rede consideramos condições de contorno periódicas, com a célula unitária contendo o poço de potencial. A equação (3) é então resolvida calculando-se sua transformada de Fourier, o que nos fornece os valores da funçao $\eta(z, t + \Delta t)$ em cada ponto da rede. Então:

$$\Psi(z, t + \Delta t) = exp\left(-\frac{iV(z)\Delta t}{2\hbar}\right)\eta(z, t + \Delta t) \tag{4}$$

A evolução da função de onda em tempo imaginário nos fornece os auto-estados do sistema.

III. RESULTADOS E DISCUSSÕES

O sistema estudado é constituído de uma repetição periódica de uma célula unitária de tamanho 200Å . Adotamos interfaces abruptas e efeitos de tensão devido às diferenças entre os parâmetros de rede em cada camada não foram considerados. Nossos resultados foram obtidos variando alguns parâmetros, tais como, a espessura da barreira e do poço, a concentração de manganês e o campo magnético.

Pela figura 1-Direita e 1-Meio podemos ver que a primeira minibanda encontra-se totalmente dentro do poço. Alguns estados da segunda minibanda também estão nos poços entre -11 e 8 meV (figura 1-Esquerda).

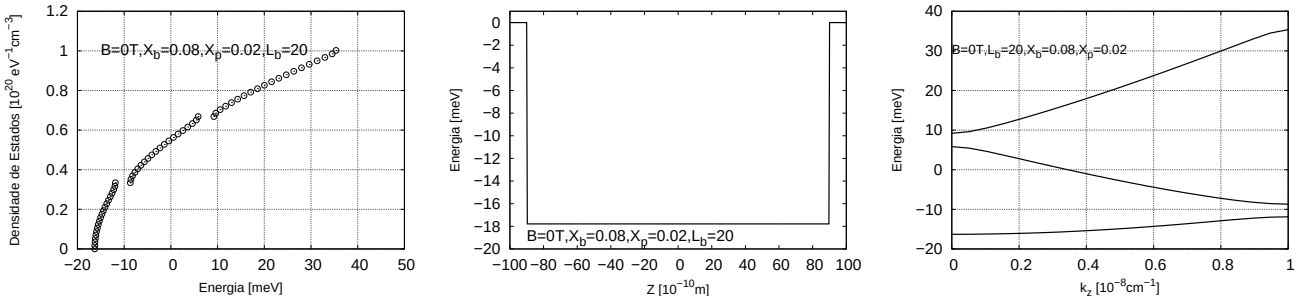


Figura 1: Gráficos da densidade de estados (Esquerda), do perfil de potencial (Meio) e relação de dispersão (Direita) para campo e concentração nulos de uma super-rede de $Zn_{0.92}Mn_{0.08}Se/Zn_{0.98}Mn_{0.02}Se$ com poços de largura $L_p = 180$ Å, barreira $L_b = 20$ Å.

Como podemos observar pela figura 2-Esquerda, os portadores de spin-down movem-se livremente pelo DMS (*Diluted Magnetic Semiconductor*). Na relação de dispersão, figura 2-Direita, percebemos a forma parabólica das minibandas de energia retratadas no esquema de zona reduzida. Se conseguíssemos rearranjar os parâmetros, tal que os portadores de spin-up ficassem mais confinados, esta heteroestrutura serviria de filtro de spin, onde somente portadores de spin-down se movimentariam pelo material.

Desses dois casos verificamos que o confinamento dos estados estão relacionados com a largura dos poços e das barreiras e com a concentração de Mn, a qual permite aumentar a profundidade dos poços ou o aumento das barreiras.

Para obter estes resultados utilizamos o $S_0(x)$ e $T_0(x)$ que são o spin efetivo e a temperatura efetiva obtidos experimentalmente[4].

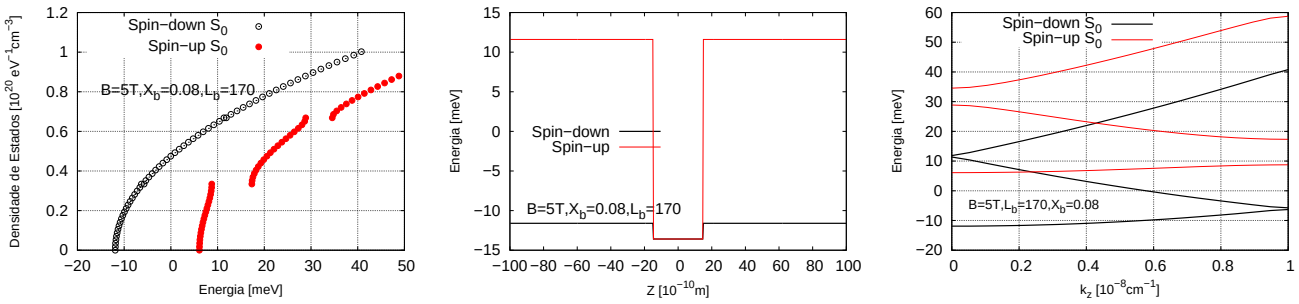


Figura 2: Gráficos da densidade de estados (Esquerda), do perfil de potencial (Meio) e relação de dispersão (Direita) para campo igual a 5 T de uma super-rede de $ZnSe/Zn_{0.98}Mn_{0.02}Se$ com poços de largura $L_p = 30$ Å e barreiras $L_b = 170$ Å.

IV. CONCLUSÃO

Calculamos a estrutura eletrônica em super-redes de $ZnSe/Zn_{1-x}Mn_xSe$ e $Zn_{1-x}Mn_xSe/Zn_{1-y}Mn_ySe$ $(x \neq y)$ na presença de campo magnéticos externos. Para isso, utilizamos o modelo de Gaj, no qual a função de Brillouin descreve as interações entre os spins.

Uma possível formação de uma heteroestrutura com utilidade de filtro de spin foi encontrada ao utilizar o DMS $ZnSe/Zn_{0.98}Mn_{0.02}Se$ com poços de largura $L_p = 30$ Å e barreiras $L_b = 170$ Å.

Observando os gráficos da DOS percebemos que esta nos permite determinar o número de minibandas, assim como, a dimensiolidade da super-rede. Quanto mais próximo estiver seu comportamento com $\sqrt{E}$, menos confinado é o nosso sistema e mais próximo estará do comportamento de elétron livre.

Vimos também que a DOS muda com a fração de íons magnéticos na heteroestrutura e, consequentemente, com a força de interação do acoplamento antiferromagnético.

V. AGRADECIMENTOS

Ao CNPq pela concessão da bolsa de iniciação cientifica, a UFG por todo o suporte ao projeto.

---

[1] M. von Ortenberg, Phys. Rev. Lett. **49**, 1041 (1982).
[2] N. Dai, H. Luo, F. C. Zhang, N. Samarth, M. Dobrowolska, and J. K. Furdyna, Phys. Rev. Lett **67**, 3824 (1991).
[3] J. W. B. T. J. W. C. Chou, A. Petrou, Phys. Rev. Lett. **67**, 3820 (1991).
[4] D. Keller, D. R. Yakovlev, B. König, W. Ossau, T. Gruber, A. Waag, and L. W. Molenkamp, Phys. Rev. B **65**, 035313 (2001).

Polinômios não comutativos e o Teorema de Vieta

Aluna: **BARROS,** Dylene Agda Souza de (dyagda@gmail.com)
Orientadora: **SERCONEK,** Shirlei (shirlei@mat.ufg.br)
Unidade Acadêmica: Instituto de Matemática e Estatística - UFG

Palavras Chaves: Polinômios não comutativos, Quasideterminantes, Teorema de Vieta, Álgebras

1. Introdução

Dado um polinômio $p(x) = (x-x_1)(x-x_2)...(x-x_n)$ definido sobre um corpo $\mathbb{F}$, o Teorema de Vieta, expressa seus coeficientes em função de $x_1, x_2, ..., x_n$. Mais precisamente temos que $p(x) = x^n - a_1x^{n-1} + ... + (-1)^n a_n$ onde $a_1, ..., a_n$ são funções simétricas elementares em $x_1, x_2, ..., x_n$. Este trabalho consiste em investigar propriedades análogas às descritas acima quando $p(x)$ está definido sobre um anel de divisão R. Concluiremos que, no caso não comutativo, os coeficientes $a_i's$ serão dados por funções racionais nas pseudoraízes, que por sua vez, são conjugadas das raízes por quasideterminantes de Vandermonde. Também faremos uma introdução ao estudo das álgebras geradas por pseudoraízes e suas relações quadráticas-lineares.

2. Metodologia

Todo trabalho foi realizado através da análise e discussão dos conceitos e propriedades principais, de seminários semanais com a orientadora, da discussão de problemas com colegas da pós-graduação do IME-UFG e da participação nos seminários de álgebra da pós-graduação do IME-UFG.

3. Resultados e Discussões

Sejam $R[t]$ o anel dos polinômios na variável t e $p(t) = b_0 + b_1t + ... + b_nt^n \in R[t]$. Vamos assumir que t é uma variável central, isto é, $tb = bt$ para todo $b \in R$. Temos que

$$\sum_{i=1}^{n} b_i t^i = \sum_{i=1}^{n} t^i b_i.$$

Se $r \in R$ definimos $p(r) = b_0 + b_1r + ... + b_nr^n$, pois em geral temos

$$\sum_{i=1}^{n} b_i r^i \neq \sum_{i=1}^{n} r^i b_i.$$

Exemplo 1. *Consideremos o anel dos quatérnios reais* $\mathbb{H}$

$$\mathbb{H} = \{a + bi + cj + dk \quad com \quad a, b, c, d \in \mathbb{R} \quad tal\ que \quad i^2 = j^2 = k^2 = -1$$

$$e \quad ij = k, \quad ki = j, \quad jk = i, \quad ji = -k, \quad ik = -j \quad kj = -i\}.$$

Tomemos $p(t) = i.t \in \mathbb{H}[t]$. *Notemos que* $i.t = t.i$ *mas* $p(j) = ij = k \neq ji = -k$.

Teorema 1. *Sejam* $p(t) \in R[t]$ *e* $r \in R$. *Então* r *é uma raiz de* $p(t)$ *se e somente se* $p(t) = q(t)(t-r)$ *onde* $q(t) \in R$.

Exemplo 2. *Seja* $p(t) = (t-i)(t-j) = t^2 - (i+j)t + k \in \mathbb{H}[t]$. *Temos que* $p(j) = 0$ *mas* $p(i) = 2k \neq 0$.

O exemplo 2 mostra que $p(t) = f(t)g(t)$ não implica em $p(r) = f(r)g(r)$.

Definição: Dizemos que $a \in R$ é uma *pseudo-raiz* de $p(t) \in R[t]$ se existirem $r(t), l(t) \in R[t]$ tais que $p(t) = l(t)(t-a)r(t)$.

Teorema 2. *Seja* $p(t) = f(t)g(t) \in R[t]$. *Se* $d \in R$ *é tal que* $a = g(d) \neq 0$ *então* $p(d) = f(ada^{-1})g(d)$.

Corolário 1. *Se* d *é uma raiz de* $p(t)$ *mas não é raiz de* $g(t)$ *então* d *é conjugado de uma raiz de* $f(t)$.

É importante também notar que, diferentemente do caso comutativo, a fatoração

$$p(t) = (t-x_1)(t-x_2)...(t-x_n)$$

pode não ser única.

Exemplo 3. *Consideremos* $p(t) = t^2 - a_1 t + a_2$ *um polinômio de grau 2 sobre* R. *Suponhamos que* $x_1, x_2 \in R$ *são raízes distintas de* $p(t)$. *Fazendo* $y_1 = x_1$ *e* $y_2 = (x_2 - x_1)x_2(x_2 - x_1)^{-1}$ *temos* $a_1 = y_1 + y_2$ *e* $a_2 = y_2 y_1$ *e então*

$$p(t) = (t - y_2)(t - y_1) \tag{1}$$

De maneira análoga, fazendo $y_1^{'} = x_2$ *e* $y_2^{'} = (x_1 - x_2)x_1(x_1 - x_2)^{-1}$ *temos* $a_1 = y_1^{'} + y_2^{'}$ *e* $a_2 = y_2^{'} y_1^{'}$ *e então*

$$p(t) = (t - y_2^{'})(t - y_1^{'}) \tag{2}$$

Notemos que (1) e (2) são duas fatorações distintas de $p(t)$.

Outro importante conceito introduzido por Gelfand e Retakh (1992) relacionado com polinômios não comutativos é de quasideterminantes. Sejam I e J dois conjuntos não vazios de ordem $n \in \mathbb{N}$. Consideremos o conjunto

$$X = \{x_{ij} \quad ; \quad i \in I, j \in J\}$$

$\mathbb{Q} < X >$ o anel de divisão livre gerado por X sobre $\mathbb{Q}$. Seja $A = (a_{ij}) \in Mat_n(\mathbb{Q} < X >)$ onde $a_{ij} \neq 0$. A^{pq} indica a matriz qua se obtem suprimindo-se a p-ésima linha e a q-ésima coluna de A

Definição:O quasideterminante de índice pq da matriz A de ordem $n \in \mathbb{N}$, que será denotado por $|A|_{pq}$, é definido por:

$$|A|_{pq} = a_{pq}, \quad \text{se} \quad n = 1,$$
$$|A|_{pq} = a_{pq} - \sum_{i \neq p, j \neq q} a_{pj} |A^{pq}|_{ij}^{-1} a_{iq}, \quad \text{se} \quad n > 1.$$

Exemplo 4. *Quasideterminate de Vandermonde.*

$$V[x_1, x_2] = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ x_1 & x_2 \end{pmatrix}$$

Obeserve que

$$|V[x_1, x_2]|_{21} = x_1 - x_2 \quad \text{e}$$

$$|V[x_1, x_2]|_{22} = x_2 - x_1.$$

Assim vemos que as pseudoraízes de $p(t)$, são conjugadas das raízes por quasideterminante de Vandermonde. Portanto ilustramos que, para o caso não comutativo, podemos fatorar um polinômio em função de suas raízes e de conjugados de suas raízes por quasideterminantes de Vandermonde.

Teorema 3 (Teorema de Vieta para o caso não comutativo). *Sejam $p(t) = t^n - a_1 t^{n-1} + ... + (-1)^n a_n$ um polinômio sobre um anel de divisão R, onde t é uma variável central e $x_1, ..., x_n$ um conjunto de soluções para $p(t) = 0$. Seja $(i_1, ..., i_n)$ uma ordenação qualquer de $1, ..., n$. Então podemos formar pseudoraízes y_k, com $k \in \{1, ..., n\}$, funções racionais em $x_{i_1}, ..., x_{i_n}$, dependendo da ordenação $(i_1, ..., i_n)$, de modo que*

$$a_1 = y_1 + ... + y_n;$$

$$a_2 = \sum_{j<k} y_k y_j;$$

$$\vdots$$

$$a_k = \sum_{j_1 < ... < j_k} y_{j_k} ... y_{j_1};$$

$$\vdots$$

$$a_n = y_n y_{n-1} ... y_1.$$

E ainda obtemos $p(t) = (t - y_n)(t - y_{n-1})(t - y_1)$.

Sejam o conjunto $I_n = \{1, 2, ..., n\}$, $A \subset I_n$ um subconjunto não ordenado (A pode até ser vazio), $i, j \in I_n \backslash A$ e K um corpo. F_n denota a K-álgebra associativa livre gerada pelos elementos formais $z_{A,i}$, $A \cup i$ denota $A \cup \{i\}$ e J_n denota o ideal de F_n gerado pelos elementos

1. $z_{A \cup i,j} + z_{A,i} - z_{A \cup j,i} - z_{A,j}$
2. $z_{A \cup i,j} z_{A,i} - z_{A \cup j,i} z_{A,j}$,

Definição: $Q_n = F_n / J_n$.

Exemplo 5. *Caso $n = 2$. Seja $p(t) = t^2 - a_1 t + a_2$ um polinômio definido em um anel de divisão R onde t é uma variável central. Suponhamos $x_1 \neq x_2$ tais que $p(x_1) = p(x_2) = 0$. Denotando por*

$$y_1 = x_1 \quad , \quad y_2 = x_{1,2} \quad , \quad y_1^{'} = x_2 \quad e \quad y_2^{'} = x_{2,1}$$

temos

$$p(t) = (t - y_2^{'})(t - y_1^{'}) = (t - y_2)(t - y_1).$$

Como

$$a_1 = y_2^{'} = y_1^{'} = y_2 + y_1 = x_{2,1} + x_2 = x_{1,2} + x_1 \tag{3}$$

e

$$a_2 = y_2^{'} y_1^{'} = y_2 y_1 = x_{2,1} x_2 = x_{1,2} x_1 \tag{4}$$

temos que a álgebra Q_2 é então gerada por $S = \{x_1, x_{1,2}, x_2, x_{2,1}\}$. De fato pela equação (3) temos que Q_2 é gerada por qualquer subconjunto de três elementos de S e é uma álgebra quadrática linear.

4. Conclusão

No presente trabalho mostramos que as diferenças básicas entre polinômios com coeficientes em anéis comutativos e não comutativos têm conseqüências bastante relevantes, como o Teorema de Vieta expressa claramente. Também temos uma classe de álgebras quadráticas geradas por raízes e pseudoraízes de polinômios não comutativos. Tais álgebras têm propriedades importantes, merecendo um estudo mais aprofundado. E temos também que, relacionado com as raízes e pseudoraízes desses polinômios, temos uma importante generalização de funções racionais de determinantes, a noção de quasideterminantes.

5. Referências Bibliográficas

1.Gelfand I., Retakh V., *Quasideterminants I*, Selecta Mathematica. (N.S.) **3** (1997) 517-546

2.Gelfand I., Gelfand S., Retakh V. e Wilson R., *Quasideterminants*, Advances in Math. **193** (2005), 56-141

3.Herstein, I. N., *Topics in Algebra,* 2a. edição, Xerox College Publ. Lexington, Mass., 1975

4.Serconek, S., Wilson R., *Quadratic algebras associated with decompositions of noncommutative polynomials are Koszul algebras*, J. Algebra 278 (2004)473-493

5.Nacin, D., *An introduction to Q_n and its graph related quotients*, To appear.

6.Lam, T. Y., *A first course in noncommutative rings,* 2a. edição, Springer, N.Y., 2000

7.Gelfand, I. M., Retakh, V., Wilson, R., *Quadratic linear algebras associated with factorizations of noncommutative polynomials and noncommutative differential polynomials*, Selecta Mathematics New Series, vol. 07 no. 04 (2001)493-523

AS ESTRATÉGIAS DE RESISTÊNCIA CAMPONESA CONTRA A EXPROPRIAÇÃO: O CASO DOS ATINGIDOS PELA BARRAGEM SERRA DO FACÃO - RIO SÃO MARCOS, SUDESTE GOIANO.

SILVA , Jaqueline Vaz[1]; **REINALDO**, Helen Cássia[2]; **MESQUITA**, Helena Angélica[3]

Palavras-chave: Atingidos por barragens, expropriação, campesinato, barragens Serra do Facão

1. INTRODUÇÃO

Este subprojeto é um desdobramento do projeto de pesquisa "Expropriados da Barragem Serra do Facão – Rio São Marcos: uma trajetória de incertezas" que vem sendo desenvolvido desde 2002 e tem como proposta acompanhar o processo de implantação da Barragem Serra do Facão no Rio São Marcos, sudeste goiano.

A luta pela terra no Brasil é secular e institucional. São os índios em luta por território, são os escravos em luta por liberdade expressa no acesso a terra, a luta dos imigrantes europeus em busca da terra de trabalho, e a luta dos excluídos da terra explicitada nos movimentos sociais. Os trabalhadores da terra estão em constante processo de deslocamento em busca de terras e de trabalho. O deslocamento compulsório de população é muitas vezes um processo doloroso e no caso dos atingidos por barragens, tal deslocamento tem provocado grandes transtornos, pois causam alterações radicais no modo de vida, na cultura e nas relações sociais, especialmente pela dificuldade que a maioria dos atingidos encontra para recompor suas vidas nos padrões anteriores. A implantação do AHE Serra do Facão atinge famílias que residem às margens do rio São Marcos a várias gerações, sendo a maioria composta de pequenos agricultores/camponeses. A iminência da construção da barragem está preocupando as famílias, não só pela questão da (in)justiça das indenizações, mas porque sabem que nada poderá ressarcir os prejuízos emocionais, psicológicos, culturais e a mudança radical, ao serem arrancados de suas terras, de suas raízes. Somam-se a isso os impactos ambientais, pois quilômetros de matas, pastagens, roças, quintais, hortas, pomares, caminhos e veredas serão inundados para gerar energia, dentro de um modelo arcaico e predador que, se é altamente compensatório para os empreendedores, é extremamente pernicioso para todo o ambiente e ainda mais para o ambiente do homem.

Queremos, ao desenvolver esse subprojeto, conhecer mais um exemplo de luta pela sobrevivência na terra. A grande maioria das famílias atingidas diretamente pela barragem está vivendo hoje numa situação de incertezas. Este estado de ânimo é justificado e justificável, pois a perda da propriedade, da identidade local, dos valores culturais é iminente e se apresenta trágica.

Os pequenos e médios proprietários atingidos estão se organizando para que não tenham os seus direitos dilacerados. A única possibilidade que têm é de se unirem e aumentarem as forças. A entrada em cena da Comissão Pastoral da

Terra (CPT), do Movimento dos Atingidos por Barragens (MAB), do Sindicato dos Trabalhadores Rurais de Catalão (STR), Associação dos Geógrafos Brasileiros – (AGB - Sessão Catalão) tem dado um suporte institucional, com informações, esclarecendo direitos, enfim, juntando forças em mais um embate na grande questão da luta por terra, na terra e pela cidadania. Os camponeses do vale do rio São Marcos se negam a sucumbir diante do grande capital que se territorializa na forma dos AHE.

Oliveira (1996) ressalta:

> (...) a negação à expropriação não é mais exclusividade do retirante posseiro distante. Agora ela é pensada, articulada e executada a partir da cidade, com a presença dos retirantes a quem a cidade/sociedade insiste em negar o direito à cidadania. Direito agora construído e conquistado na luta pela recaptura do espaço/tempo perdidos na trajetória histórica dos expropriados.

Estamos chamando os moradores do vale do São Marcos de atingidos porque desde que se anunciaram as obras da barragem, as suas vidas já sofreram profundas alterações. E os camponeses se organizam e lutam na construção de um movimento popular contra a expropriação da terra, da cidadania, da cultura e do modo de vida.
Pesquisar, estudar e compreender esse movimento como estratégia da resistência camponesa é que justifica esse subprojeto.

2. METODOLOGIA

Na maioria dos estudos que abordam populações atingidas por barragem, são abordadas as conseqüências destas migrações compulsórias quando a população já fora removida. Estes estudos são unânimes em mostrar que o modelo de geração de energia, a partir das grandes barragens, é predatório e custa muito caro para milhares de pessoas, em especial, para os pequenos proprietários que são atingidos de forma direta pelas represas, considerando o caso da Serra do Facão como a explicitação deste modelo, e a resistência dos camponeses como mais um exemplo de luta pela terra, ou seja, pela permanência na terra.
Ao optar pelo estudo do caso do AHE Serra do Facão, não se pretende estudar o caso por ele mesmo, é um exercício de multidisciplinaridade e interdisciplinaridade tão necessários para que a Geografia possa contribuir na compreensão da produção/reprodução e apropriação do espaço. Nesse sentido ensina Milton Santos:

> O conhecimento de uma fração da realidade exige a análise de sua estrutura interna das diversas articulações concretas que regem sua existência, seu funcionamento e sua estrutura. A estrutura interna, assim considerada, permite verificar as articulações do fenômeno estudado com outros fenômenos. É, por isso um bom método de trabalho. (SANTOS, 1988, p. 71).

Para dar conta de tal opção teórico-metodológica se faz necessário os seguintes procedimentos:
- Leituras e debates sobre:

Movimentos Sociais em geral; Movimentos dos Atingidos por Barragens; Migrações e deslocamento de população em geral; Geopolítica e Cultura.
- Pesquisa de campo**:**
As atividades de campo serão: aplicação de questionários, fotografar/filmar, entrevistas formais e informais, visitando as propriedades e procurando investigar as estratégias que estão desenvolvendo para evitar a expropriação.
Continuação das pesquisas junto ao MAB, CPT e demais órgãos e/ou instituições relacionadas á questão, procurando subsídios para sustentar o movimento dos atingidos na luta pela preservação dos direitos.

3- RESULTADOS E DIRCUSSÃO

Apesar de todos os avanços no que tange aos procedimentos a serem seguidos pelas empresas construtoras de barragens para conseguirem Licença Prévia (LP), Licença de Instalação (LI), e mesmo Licença de Operação (LO), ocorrem ainda muitas infrações e muitas negligências, deixando sem solução vários problemas ambientais. A população residente nas áreas alagadas e nos áreas de influência é vista apenas como um empecilho, como obstáculo a ser removido. Obstáculo que "atrasa" o "progresso". Progresso esse que beneficia, por sua vez, á alguns, socializado os prejuízos ao ambiente e a população local que tem seu modo de vida desestruturado, perdem o trabalho, comprometendo sua qualidade de vida. Além disso, a energia que deveria atender a todos, não está ao alcance de milhões de cidadãos, pois as altas taxas cobradas, deixam parte da população sem atendimento, porém os lucros de poucos continuam sendo garantidos.
A barragem Serra do Facão é apenas mais um caso que demonstra os problemas advindos da implantação de um empreendimento deste tipo, que traz drásticas transformações no espaço, ou melhor, uma destruição do ambiente, destruindo também fontes de sobrevivência, já que população atingida se mantém através do trabalho, essa tem que migrar, mesmo contra sua vontade, em nome de um progresso e um desenvolvimento que de modo algum é social, pois socializados são apenas os prejuízos tanto para o meio como para as pessoas que vivem desse/neste meio. Assim os atingidos desenvolvem suas estratégias de resistências, se organizando no Movimento dos Atingidos por Barragens, fazendo boletins, trazem o debate para a sociedade, participam de programas de rádio, seminários, dentre outros eventos, buscando reunir mais apoiadores, tentando mostrar o outro lado da moeda, já que, pelos políticos que se locupletam e os empreendedores privados do setor elétrico, apenas são apresentados os pontos positivos da questão.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

FERNADES, B. M. **MST.** Formação e territorialização em São Paulo. São Paulo: HUCITEC, 1996.

_____. **Movimento social como categoria geográfica**. In Terra Livre, São Paulo. n.15, p.59-85, 2000.

GERMANI. G. I. **Expropriados terra e água:** o conflito de Itaipu. Salvador: EDUFBA/ULBRA, 2003.

GOHN, M. G. **Teoria dos movimentos sociais.** Paradigmas clássicos e contemporâneos. 4.ed. São Paulo: Loyola, 2004.

GRZYBOWSKI, Cândido**. Caminhos e descaminhos dos movimentos sociais no campo.** São Paulo: Vozes, 1995.

MARTINS, J. de S. **Os camponeses e a política no Brasil.** As lutas sociais no campo e seu lugar no processo político. 3. ed. Petrópolis: Vozes, 1986.

MENDONÇA, M. R. **A urdidura do trabalho e do capital no Cerrado do Sudeste Goiano.** 2004. 457 f. Tese (Doutorado em Geografia) – Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Estadual Paulista, Presidente Prudente. 2004.

MESQUITA, H. A. As barragens para Aproveitamento Hidrelétrico (AHE): a mais recente ameaça ao bioma cerrado. **UFG Revista** Goiânia, Ano VII, n. 1, p. 21-24, Junho, 2005.

OLIVEIRA, A. U. de. **A geografia das lutas no campo**. São Paulo: Contexto, 1996.

REIS, M. J.; BLOEMER, N. M. S. (orgs.). **Hidrelétricas e populações locais.** Florianópolis: Cidade Futura: Ed. da UFSC: Programa de Pós-Graduação em Antropologia Social da UFSC, 2001. p. 200.

RODRIGUES, C. M. C. **Águas aos olhos de Santa Luzia**. Um estudo de memória sobre o deslocamento compulsório de sitiantes em Nazaré Paulista (SP). Campinas: Editora da UNICAMP, 1999.

SANTOS, M. **Espaço e método**. São Paulo: Nobel, 1988.

---

[1] Bolsista PIBIC 2006-2007
[2] Bolsista PIBIC 2007-2008
[3] Professora orientadora

CARACTERIZAÇÃO MAGNETOÓPTICA DE FLUIDOS MAGNÉTICOS ULTRATRANSPARENTES

CAMPELLO, José Carlos[1]; **BAKUZIS**, Andris Figueiroa; **SILVA**, Osni

Palavras-Chave: Fluidos Magnéticos, Caracterização Magnetoóptica, Birrefringência Magnética.

Introdução

Nanoestruturas magnéticas têm atraído a atenção da comunidade científica não somente por suas diversas aplicações tecnológicas, como em sensores de campo magnético (baseados no fenômeno de magnetoresistência gigante [BAIBICH et al. (1988)]) e dispositivos magnetoópticos [BAKUZIS et al. (2004)], mas também na sua possível aplicação biomédica no diagnóstico e tratamento de câncer [HAFELLI et al. (1997)]. O estudo desses sistemas abrange a área da nanociência e pode ter importância significativa no futuro nas áreas de spintrônica e computação quântica [BALL (2000); LOSS et al. (1998)]. Um exemplo desses sistemas são nanodots magnéticos imersos numa matriz líquida usualmente denominados fluidos magnéticos (FM).

Em geral os FM possuem baixa transmissividade deixando de ser transparentes a uma fração volumétrica em torno de 1%. Recentemente, o orientador do presente projeto sintetizou um fluido magnético com nanopartículas de ferrita de cádmio ($CdFe_2O_4$), que se mostrou o FM mais transparente da literatura até a presente data. Esse novo fluido magnético é um excelente candidato para aplicações magnetoópticas, e por isso teve suas propriedades investigadas utilizando a técnica de birrefringência magnética.

Metodologia

Caracterização de amostras: O fluido magnético estudado foi previamente caracterizado por meio de microscopia eletrônica de transmissão (TEM, em um microscópio eletrônico JEOL JEM-1010) e absorção atômica. Esses dados experimentais permitiram determinar a distribuição dos diâmetros das nanopartículas (figura 1), assim como obter o diâmetro modal ($\langle D_m \rangle = 9.2nm$) e sua dispersão ($\sigma = 0.26$).

Procedimento Experimental: No arranjo para aplicação da técnica de birrefringência magnética montado de acordo com a figura 2, desconsiderando possíveis efeitos de dicroismo, a intensidade do sinal que atinge o analisador varia com a birrefringência da amostra na forma

$$I = I_o sen^2(2\nu) sen^2(\frac{\pi l}{\lambda}\Delta\eta) \tag{1}$$

onde I_o é a intensidade do sinal incidente (luz), l a espessura do porta amostras, λ o comprimento de onda do laser, $\Delta\eta$ a birrefringência do material em análise e ν o ângulo entre o analisador e o campo magnético aplicado (no caso, $\nu = 45°$)

Modelo Teórico: Calculando a polarizabilidade média sobre todas as N partículas do fluido magnético ($\langle\alpha\rangle$), determina-se o índice de refração do sistema como

$$\eta^2 = \eta_0^2(1 + N\langle\alpha\rangle) \tag{2}$$

a birrefringência $\Delta\eta$ fica

$$\Delta\eta(\theta,\varphi) = \eta_z - \eta_x \approx \frac{1}{2}n_0 N(\alpha_\parallel - \alpha_\perp)\left(\langle cos^2\theta - sen^2\theta sen^2\varphi\rangle\right) \tag{3}$$

Calculando a média considerando o fator de Boltzmann, tem-se

$$\Delta\eta = \frac{1}{2}n_0\phi(\alpha_\parallel - \alpha_\perp)\left(1 - \frac{3}{\xi tanh(\xi)} + \frac{3}{\xi^2}\right) = \frac{1}{2}n_0\phi(\alpha_\parallel - \alpha_\perp)L_2(\xi) \tag{4}$$

em que ϕ é a fração volumétrica de partículas no fluido ($\phi = \frac{\pi}{6}N_v\langle D^3\rangle$), $L_2(\xi)$ a conhecida

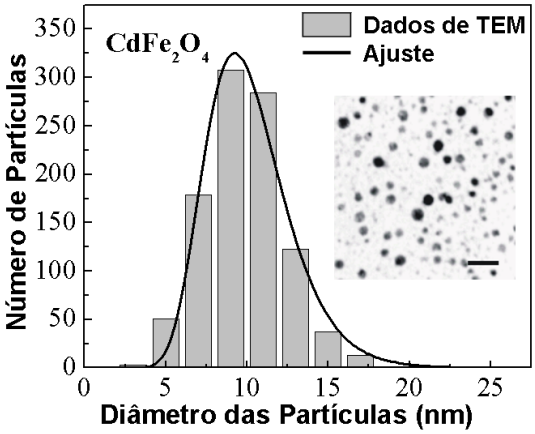


Figura 1: Distribuição dos diâmetros das nanopartículas de ferrita de cádmio ($CdFe_2O_4$) obtido por TEM. A linha no gráfico representa o melhor ajuste para o histograma, utilizando uma função log-normal. Em anexo, encontra-se uma foto da amostra.

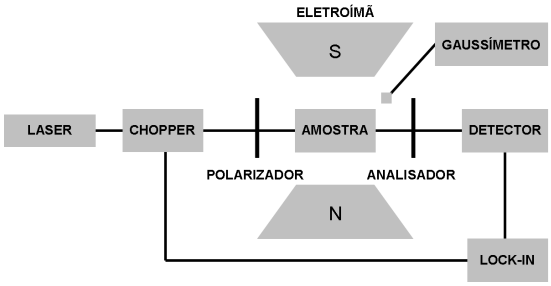


Figura 2: Montagem experimental para medidas de birrefringência. Basicamente, a luz (proveniente de um laser, com comprimento de onda $\lambda = 632nm$) passa por um modulador (*chopper*), atravessando posteriormente um polarizador, a amostra em estudo, um analisador, alcançando enfim um detector, que envia um sinal ao amplificador *lock-in* (tal amplificador usa a frequência do *chopper* como referência). Em algumas situações pode ser necessário adicionar um filtro após o laser, afim de evitar o chamado efeito de Soret.

função de Langevin de segunda ordem e

$$\xi = \mu_o \frac{\mu H}{kT} = \frac{\pi \mu_o}{6} \frac{\mu H D^3 M_s}{kT} \tag{5}$$

sendo μ_o a permissividade magnética no vácuo, H o campo magnético aplicado, M_s a magnetização de saturação do material da nanopartícula, e D o seu diâmetro. Levando em conta o sinal de estrutura dos aglomerados ($\xi_Q = Q\xi$onde Q é o número médio de partículas), encontra-se [BENICIO et al. (2007)]

$$\Delta\eta = \frac{1}{2} n_0 \frac{\pi N_v}{6} (\overline{\alpha_{\parallel} - \alpha_{\perp}})_Q \int_0^{\infty} L_2(\xi) D^3 = \Delta\eta_s \int_0^{\infty} \Delta\eta_Q(H, D) D^3 P(D) dD \tag{6}$$

em que $\Delta\eta_s$ é a birrefringência de saturação da amostra e N_v o número total de partículas por unidade de volume.

Resultados e Discussão

A partir de uma amostra caracterizada ($\langle D_m \rangle = 9.2$nm, $\sigma = 0.26$, $\phi_0 \simeq 3.8\%$), preparamos outras por meio de diluição, obtendo quatro diferentes concentrações de fluidos magnéticos. A análise de seus comportamentos em função da variação do campo aplicado é apresentada na figura 3.

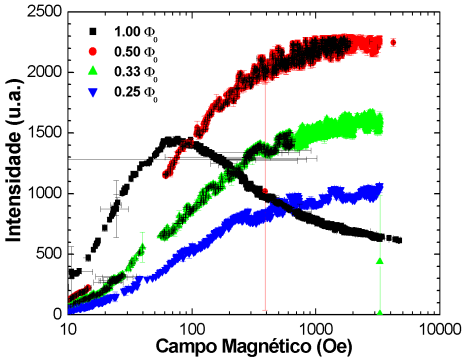


Figura 3: Análise das amostras para diferentes concentrações. Na faixa de campo avaliada, apenas a mais concentrada satura ($H \simeq 65$Oe).

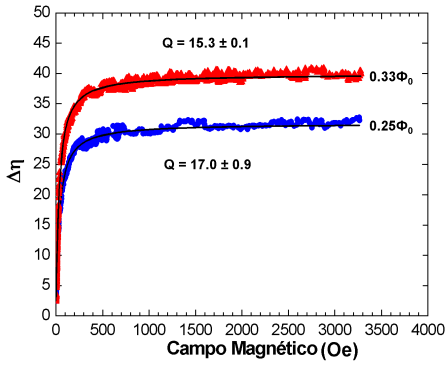


Figura 4: Ajuste para concentrações $0.33\phi_0$, $0.25\phi_0$. Note que a birrefringência é maior para a amostra com maiores aglomerados.

Para a concentração mais elevada ($1.00\phi_0$), nota-se a presença de um pico ($H \simeq 65$Oe). Isso deve-se ao fato da intensidade do sinal da amostra variar como função de um sen^2 (equação 1). Nesse ponto, tem-se

$$sen^2(\frac{\pi l}{\lambda}\Delta\eta) = 1 \rightarrow \frac{\pi l}{\lambda}\Delta\eta = \frac{\pi}{2} \rightarrow \Delta\eta = 2\frac{\lambda}{l} \tag{7}$$

Como $\Delta\eta$ também pode ser determinado de acordo com o modelo proposto (equação 6), encontramos

$$\begin{aligned} 2\frac{\lambda}{l} &= \Delta\eta_s \int_0^\infty \Delta\eta_Q(H,D)D^3P(D)dD \\ (\overline{\alpha_\parallel - \alpha_\perp})_Q &= \frac{24\lambda}{l\pi\eta_0 N}\frac{1}{\int_0^\infty \Delta\eta_Q(H,D)D^3P(D)dD} \end{aligned} \tag{8}$$

Dessa maneira, com o ajuste adequado dos parâmetros, é possível determinar $(\overline{\alpha_\parallel - \alpha_\perp})_Q$

Já para concentrações menores, note que ocorre queda na birrefringência (figura 3). Para $\Delta\eta$ suficientemente pequeno, é usual fazer a aproximação

$$sen^2(\frac{\pi l}{\lambda}\Delta\eta) \simeq \frac{\pi l}{\lambda}\Delta\eta^2 \tag{9}$$

Partindo disso, a relação entre o sinal captado pelo analisador e $\Delta\eta$ sofre significativa simplificação e, consequentemente, o ajuste para definição dos parâmetros também. Assim, fizemos a análise para as duas amostras de menor concentração ($0.33\phi_0$, $0.25\phi_0$). O resultado está apresentado na figura 4

Conclusões

Investigamos um tipo especial de fluido magnético, muito cotado para uso em óptica devido sua alta transmissividade. O estudo de amostras em diferentes concentrações, permitiu-nos examinar a formação de aglomerados nesses colóides e suas consequências para possíveis aplicações em dispositivos magnetoópticos. Em particular, um fluido magnético ultratransparente e estável com um número maior de aglomerados, é grande candidato a uso, por exemplo, em moduladores ópticos. Tais dispositivos, qualitativamente, recebem feixes luminosos e agem sobre sua intensidade de forma que essa possa ser usada para transportar dados digitalizados (fluxo de valores codificados interpretados como conjuntos de algarismos do sistema binário, que consistem nos dígitos zero e um).

Referências

[1] BAIBICH, M.N. et al., Phys. Rev. Lett. **61**, 2472 (1988).

[2] BAKUZIS, A.F. et al., Appl. Phys. Lett. **84**, 2355 (2004).

[3] BALL, P., Nature **404** 918 (2000).

[4] BENICIO, G.D. et al., Jour. Appl. Phys. **101**, 09J106-1 (2007)

[5] HAFELLI, U., et al., Plenum Press (1997).

[6] LOSS, D. et al., Phys. Rev. A **57**, 120 (1998).

[7] PAPELL, S.S.; **US Patent 3 215 572** (1965).

FONTES DE FINANCIAMENTO - CNPq e Funape

1. Bolsista de Iniciação Científica. Instituto de Física, UFG. jotacampello@yahoo.com.br
2. Coorientador. Instituto de Física, UFG. bakuzis@if.ufg.br
3. Orientador. Instituto de Física, UFG. osni@if.ufg.br

Classes de Exemplos de Trajetória Central em Programação Semidefinida

Canella, J. S.

Palavras-chave: Programação Semidefinida, Trajetória Central, Estrita Complementaridade, Teorema da Dualidade Forte.

Introdução

Seja S^n o espaço das matrizes simétricas de ordem n com o produto interno $\langle\, ,\, \rangle$ definido por $\langle U\, ,\, V\rangle =$ traço(UV), S^n_+ o cone das matrizes simétricas positivas semidefinidas e S^n_{++} seu interior. Dados $A_1, ..., A_m \in S^n$, defina o operador linear $\mathcal{A} : S^n \to I\!R^m$ por:

$$\mathcal{A}X = \big(\langle A_1\, ,\, X\rangle, ..., \langle A_m\, ,\, X\rangle\big)^T,$$

e seja $\mathcal{A}^* : I\!R^m \to S^n$ o operador adjunto de $\mathcal{A}$, o qual é dado por $\mathcal{A}^*v = \sum_{i=1}^m v_i A_i$. Os problemas de programação semidefinida na forma primal e dual são definidos, respectivamente, por:

$$(P)\begin{cases} \min_X \langle C\, ,\, X\rangle \\ s.t.\ \mathcal{A}X = b \\ \quad X \in S^n_+ \end{cases} \qquad\qquad (D)\begin{cases} \max_y b^T y \\ s.t.\ \mathcal{A}^*y + S = C \\ \quad S \in S^n_+ \end{cases}$$

onde $C \in S^n$, $b \in I\!R^m$, $A_1, ..., A_m \in S^n$ são dados e $X \in S^n_+$, $y \in I\!R^m$ e $S \in S^n_+$ são as variáveis. A trajetória central primal $\{X(\mu) : \mu > 0\}$ associada ao problema (P) e a trajetória central dual $\{S(\mu) : \mu > 0\}$ associada ao problema (D) com respeito à barreira $f(X) = -\ln\det\big(X\big)$ são definidas, respectivamente, por:

$$X(\mu) = \text{argmin}_X\{\langle C\, ,\, X\rangle + \mu f(X) : \mathcal{A}X = b\}, \mu \in I\!R_+$$

$$S(\mu) = \text{argmin}_y\{b^t y + \mu f(S) : \mathcal{A}^*y + S = C\}, \mu \in I\!R_+$$

ou equivalentemente, pelo sistema de equações primal-dual,

$$(PD)\begin{cases} \mathcal{A}X = b, \quad X \in S^n_{++} \\ \mathcal{A}^*y + S = C, \quad S \in S^n_{++} \\ XS = \mu I, \quad \mu \in I\!R_+ \end{cases}$$

É bem conhecido que se, $A_1, ..., A_m \in S^n$ são linearmente independente, o conjunto de pontos interiores viáveis primal.

$$\mathcal{F}^o(P) = \big\{X \in S^n : \mathcal{A}X = b, X \in S^n_{++}\big\}$$

e o conjunto de pontos interiores viáveis dual

$$\mathcal{F}^o(D) = \big\{(y, S) \in I\!R^m \times S^n : \mathcal{A}^*y + S = C, S \in S^n_{++}\big\}$$

são não vazios. Então os problemas (P) e (D) tem conjunto solução compacto e não vazio e, as trajetórias centrais estão bem definidas. E, mais do que isso, se o problema (D) é viável (não-vazio) e (P) é estritamente viável (ponto interior) então, os valores ótimos primal e dual são iguais, segundo o "Teorema da Dualidade Forte". Na presença de estrita complementaridade temos a seguinte decomposição:

$$X = \begin{pmatrix} X_B & X_{BN} \\ X^t_{BN} & X_N \end{pmatrix}, \qquad S = \begin{pmatrix} S_B & S_{BN} \\ S^t_{BN} & S_N \end{pmatrix}.$$

A ordem de convegência dos blocos ao longo da trajetória central, quando μ tende a zero, são iguais a

$$X_B(\mu) = \mathcal{O}(1), \quad X_{BN}(\mu) = \mathcal{O}(\mu), \quad X_N(\mu) = \mathcal{O}(\mu),$$

$$S_B(\mu) = \mathcal{O}(\mu), \quad S_{BN}(\mu) = \mathcal{O}(\mu), \quad S_N(\mu) = \mathcal{O}(1).$$

Na ausência de estrita complementaridade temos na decomposição acima o surgimento de mais um bloco, a saber, o bloco T onde a estrita complementaridade falha. Resultando assim, a seguinte decomposição:

$$X = \begin{pmatrix} X_B & X_{BT} & X_{BN} \\ X_{BT}^t & X_T & X_{TN} \\ X_{BN}^t & X_{TN}^t & X_N \end{pmatrix}, \qquad S = \begin{pmatrix} S_B & S_{BT} & S_{BN} \\ S_{BT}^t & S_T & S_{TN} \\ S_{BN}^t & S_{TN}^t & S_N \end{pmatrix}.$$

Neste caso, quando a complementaridade estrita falha, não se sabe a ordem exata de convergência ao longo da trajetória central, dos blocos X_T, X_{BT}, X_{TN}, S_T, S_{BT} e S_{TN}. Mais especificamente, alguns problemas que se colocam são obter os seguintes resultados:

1. a velocidade de convergência dos blocos onde a estrita complementaridade falha e
2. o comportamento limite da derivada das trajetórias primal e dual.

As respostas para estes problemas são importantes, por exemplo, para obtenção de algoritmos de convergência superlinear para programação semidefinida. O problema foi estudado por Cruz Neto, Ferreira e Monteiro (2005) quando a ordem de convergência do bloco T é da ordem $\mu^{1/2}$. Porém, existem exemplos de trajetória em que a ordem de convergência não é $\mu^{1/2}$.

Metodologia

• Encontros semanais com o orientador;
• Apresetações de seminários;
• Elaboração de exemplos de tragetória central a partir da teoria e de exemplos aleatórios;
• Exposição e apresentação de pôster no 26o Colóquio Brasileiro de Matemática realizado no IMPA no período de 29/07 a 03/08 deste ano.

Resultados e Discussão

$$n = 6,\ m = 4,\ b = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^T$$

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad A_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad A_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$A_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad A_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Então o problema primal é dado por:

$$\min\left\{X_{55}+X_{66}:\begin{pmatrix}1-X_{22} & X_{12} & X_{13} & X_{14} & X_{15} & -1/2X_{44}\\ X_{12} & X_{22} & X_{23} & -1/2X_{33} & X_{25} & X_{26}\\ X_{13} & X_{23} & X_{33} & X_{34} & X_{35} & X_{36}\\ X_{14} & -1/2X_{33} & X_{34} & X_{44} & X_{45} & X_{46}\\ X_{15} & X_{25} & X_{35} & X_{45} & X_{55} & -1/2X_{55}\\ -1/2X_{44} & X_{26} & X_{36} & X_{46} & -1/2X_{55} & X_{66}\end{pmatrix}\succeq 0\right\},$$

e o problema dual é dado por:

$$\max\left\{y_1+y_2:\begin{pmatrix}-y_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -y_3\\ 0 & -y_1 & 0 & -y_2 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -y_2 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -y_2 & 0 & -y_3 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1-y_4 & -y_4\\ -y_3 & 0 & 0 & 0 & -y_4 & 1\end{pmatrix}\succeq 0\right\}.$$

As soluções dos problemas primal e dual têm, respectivamente, as seguintes forma:

$$X^*=\begin{pmatrix}1-X_{22} & X_{12} & 0 & 0 & 0 & 0\\ X_{12} & X_{22} & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\succeq 0,\qquad S^*=\begin{pmatrix}0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1-y_4 & -y_4\\ 0 & 0 & 0 & 0 & -y_4 & 1\end{pmatrix}\succeq 0.$$

Os pontos das trajetórias central primal e dual, são dados, respectivamente, por:

$$X(\mu)=\begin{pmatrix}a & 0 & 0 & 0 & b\mu^{1/2} & c\mu^{1/2}\\ 0 & d & 0 & e\mu^{1/4} & 0 & 0\\ 0 & 0 & f\mu^{1/4} & 0 & 0 & 0\\ 0 & e\mu^{1/4} & 0 & g\mu^{1/2} & 0 & 0\\ b\mu^{1/2} & 0 & 0 & 0 & h\mu & i\mu\\ c\mu^{1/2} & 0 & 0 & 0 & i\mu & j\mu\end{pmatrix},$$

$$S(\mu)=\begin{pmatrix}k\mu & 0 & 0 & 0 & 0 & m\mu^{1/2}\\ 0 & k\mu & 0 & l\mu^{3/4} & 0 & 0\\ 0 & 0 & l\mu^{3/4} & 0 & 0 & 0\\ 0 & l\mu^{3/4} & 0 & m\mu^{1/2} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & o & n\\ m\mu^{1/2} & 0 & 0 & 0 & n & 1\end{pmatrix}.$$

Conclusão

A importância desse exemplo é que a ordem de convergência da trajetória central dual é diferente de $\sqrt{2}$. Também, note que as trajetórias primal e dual não convergem para o centro analítico da face ótima.

Referência Bibliográfica

J. X. da Cruz Neto, O. P. Ferreira and R. D. C. Monteiro,*Asymptotic behavior of the central path for a special class of degenerate SDP problems*, Mathematical Programming, 103, no. 3, 487-514 (2005).
M. Halická, E. de Klerk, and C. Roos, *Limiting behavior of the central path in semidefinite optimization*, preprint, Faculty of Technical Mathematics and Informatics, TU Delft, NL–2628 CD Delft, The Netherlands, June 2002.

MAGNETOMETRIA ÓPTICA POR EFEITO KERR DE NANOCOMPÓSITOS MAGNÉTICOS

SANTOS JUNIOR, Juracy Leandro dos [1]; **Bakuzis**, Andris Figueiroa [2]

Palavras-chave: MOKE, magneto-ópticos,

1. INTRODUÇÃO (justificativa e objetivos)

Nanoestruturas magnéticas tem atraído à atenção da comunidade científica devido não apenas as suas diversas aplicações tecnológicas, como em sensores de campo magnético (baseados no fenômeno de magnetoresistência gigante [1]), gravação magnética de alta densidade, dispositivos magneto-ópticos [2], transdutor de pressão, lubrificantes, e alto-falantes, mas também na sua possível aplicação biomédica no diagnóstico (via agentes de contraste na imagem por ressonância magnética nuclear) e tratamento de câncer (via a magnetohipertermia) [3]. O estudo desses sistemas abrange a área da nanociência sendo um exemplo dos mesmos nanodots magnéticos imersos numa matriz (nanocompósito magnético). No intuito de investigar as propriedades desses sistemas a técnica de Magnetometria Óptica por Efeito Kerr (MOKE) foi implantada no Instituto de Física da UFG e permitirá obter propriedades magnéticas de diversos sistemas nanoestruturados sintetizados na UFG. È importante ressaltar que essa é a primeira montagem experimental de MOKE feita na região Centro-Oeste do Brasil.

O MOKE é um modo conveniente para obter curvas de histerese de sistemas de filmes finos. Quando a luz linearmente polarizada reflete em um filme magnético sua polarização fica elíptica, também denominada elipticidade Kerr (vide figura 1(a)), sendo seu eixo principal girado (rotação Kerr). O ângulo de rotação e a elipticidade são proporcionais a uma componente da magnetização do filme. Qual componente está sendo medida depende da configuração óptica usada. Nas figuras 1(b) e 1(c) apresentamos as configurações polar e transversal, respectivamente.

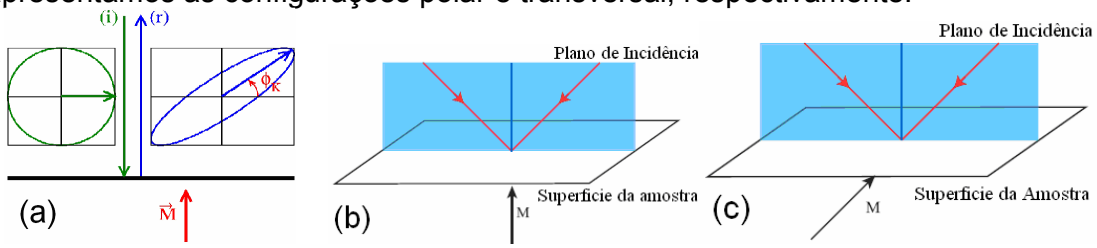


Figura 1(a) Eliptcidade Kerr, (b) MOKE polar, (c) MOKE Transversal.

2. METODOLOGIA

2.1 – Montagem experimental

A metodologia empregada pela equipe consistiu da montagem experimental da magnetometria óptica por efeito Kerr (MOKE) [4-8]. Posteriormente investimos na automatização dos dados experimentais obtidos pela técnica MOKE. A figura 2(a) representa o arranjo experimental da configuração Longitudinal enquanto na figura 2(b) temos a configuração Polar. Durante esta etapa o aluno encontrou diversos problemas para efetuar a montagem do experimento.

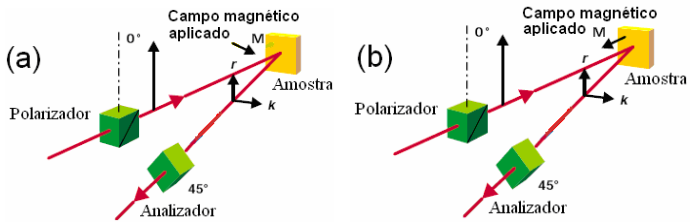


Figura 2(a) Montagem do MOKE Longitudinal, 2(b) MOKE polar.

2.2 – Soluções de problemas

Soluções apresentadas pelo aluno para solucionar os problemas encontrados:

I. Construção de um sistema de inversão de campo controlado pela placa de controle.
II. Foram projetadas e construídas duas placas com controle de ganho digital e offset de tensão de saída muito baixo (75μV máx.) para aquisição de dados.
III. Foi projetado e construído um novo eletroímã (vide figura 3) que possibilitou efetuar duas das configurações mais usadas de MOKE (Longitudinal e a Polar).
IV. Foi projetada e construída uma placa que possibilita a interface com o PC.

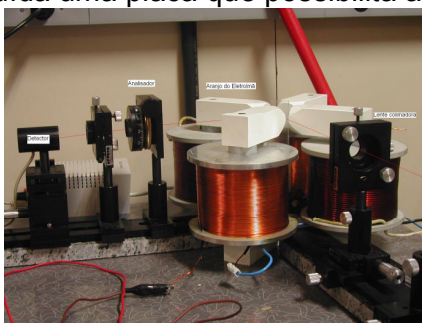
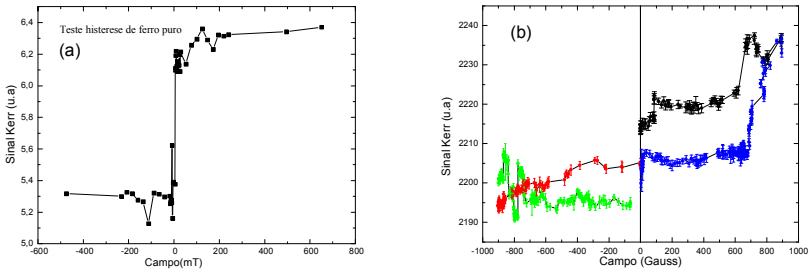


Figura 3. Arranjo experimental.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

3.1 – Resultados experimentais

Nosso objetivo é estudar propriedades magnéticas de diversos sistemas nanoestruturados. No entanto para saber o real funcionamento de nossa montagem temos que testar em algo já conhecido como, por exemplo, um filme de ferro. Com os equipamentos disponíveis inicialmente obtivemos o gráfico da Histerese de Ferro puro (figura 3(a)). Posteriormente com as soluções apresentadas obtivemos o segundo gráfico (figura3(b)) do mesmo filme de ferro.



Figuras 4(a). Primeira histerese de Ferro puro. 3(b) Nova curva de histerese

3.2 – Curva de magnetização do nanocompósito magnético

Um programa foi criado para controlar a nova placa de interface com o PC. Este controla totalmente a medida além de fazer uma média dos pontos coletados em um intervalo de tempo pré-determinado retornando assim o desvio da mesma. Portanto

obtém-se informação do erro estatístico dos dados experimentais. A figura 4 representa uma curva de magnetização de um nanocompósito magnético constituído de nanopartículas magnéticas imersas em um polímero obtidas utilizando esse novo sistema.

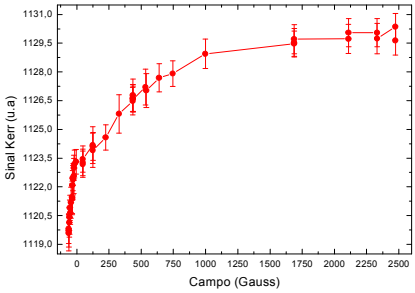


Figura 5. Curva de magnetização do nanocompósito magnético.

4. CONCLUSÃO

Neste trabalho apresentamos as primeiras medidas experimentais da técnica de Magnetometria Óptica por efeito Kerr (MOKE) obtidas na região Centro-Oeste do Brasil. Fomos capazes de entender o efeito Kerr fazendo assim a montagem experimental do MOKE e obter resultados repetitivos. Adicionalmente desenvolvemos uma placa de controle que permitiu que o sistema de medida MOKE fosse automatizado. E ainda um novo software foi desenvolvido para controle e análise desses dados experimentais. Finalmente o novo hardware de interface com o PC foi montado e calibrado em uma caixa adequada como pode ser visto na figura 6.

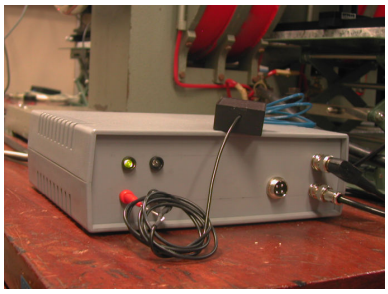


Figura 6. Caixa contendo o novo hardware de interface com o PC.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] M.N. Baibich et al., Phys. Rev. Lett. 61, 2472 (1988).
[2] A.F. Bakuzis et al., Appl. Phys. Lett. 84, 2355 (2004).
[3] U. Hafelli, W. Schutt, J. Teller, M Zborowski, "Scientific and Clinical Applications on Magnetic Carriers", Plenum Press, New York (1997).
[4] M.R. Scheinfein et al. Phys. Rev. Lett. 76, 541 (1996).
[5] S.D. Bader, C.Liu, E.R. Moog, Phys. Rev. Lett. 23, 2422 (1988).
[6] S.D. Bader et al., J. Magn Magn Mater. 200, 664 (1999).
[7] S. Dokupil et al., J. Magn Magn Mater. 316, 223 (2007).
[8] H.B. Yuen, Tese de doutorado,University of California at Berkeley (2000).

[1]Bolsista de iniciação científica. Instituto de Física – Laboratório de magnetoóptica, juracyleandro@gmail.com.
[2]Orientador/Instituto de Física/UFG, bakuzis@if.ufg.br.

Teoria e método numérico para sistemas não lineares de leis de conservação.

LIMA, Lidiane dos Santos Monteiro[1]; **Da MOTA**, Jesus Carlos[2]

Palavras-chaves: Sistemas de leis de conservação, ondas de choque

1 introdução

Neste trabalho estudamos as ondas de choque e as ondas de rarefação para um sistama de leis de conservação não lineares. O sistema modela a dinâmica de gases em uma dimensão espacial. Estudamos ainda as soluções do problema de Riemann (dados iniciais constantes por partes) para este sistema.

2 Metodologia

Uso do acervo bibliográfico para estudo e compreensão das equações bem como das suas soluções exatas e apoio computacional para melhor visualização dos resultados.

3 Resultados e discussão

Nesta seção descrevemos o modelo, considerando apenas as equações do volume específico e da velocidade, e determinamos a solução do problema de Riemann para este sistema. Neste caso o problema de Riemann em $\mathbb{R}^2$ é escrito na forma

$$\begin{cases} v_t - u_x = 0 \;\; x \in \mathbb{R}, \; t \geq 0 \\ u_t + p(v)_x = 0, \;\; x \in \mathbb{R}, \; t \geq 0. \end{cases} \tag{1}$$

$$U(x,0) = U_0(x) = \begin{cases} U_L = (v_L, u_L), \;\; se \;\; x < 0, \\ U_R = (v_R, u_R), \;\; se \;\; x > 0, \end{cases} \tag{2}$$

onde $p' < 0$, $p'' > 0$. Este sistema é conhecido como sistema p.
Note que o sistema (1) é hiperbólico pois a matriz jacobiana da função fluxo, F(v,u)=(-u,p(v)), tem os autovalores reais e distintos, a saber $\lambda_1 = -\sqrt{-p'(v)} < 0 < \sqrt{-p'(v)} = \lambda_2$.

Definição 1. *Uma descontinuidade $s = x'(t_p)$ do problema* (1)-(2) *é dito um $k-$choque de Lax, se*

$$\begin{cases} \lambda_k(U_R) < s < \lambda_k(U_L) \\ \lambda_{k-1}(U_L) < s < \lambda_{k+1}(U_R) \end{cases}$$

para $k = 1, 2$.

Para o sistema (1) temos o $1-$choque de Lax, que satisfaz $-\sqrt{-p'(v_R)} < 0 < -\sqrt{-p'(v_L)}$, e o $2-$choque de Lax que satisfaz $\sqrt{-p'(v_R)} < 0 < \sqrt{-p'(v_L)}$. Fixado U_L encontramos

o seguinte conjunto de estados $U = U(v, u)$ que pode ser conectado a U_L à direita por $1-$choque,

$$S_1 : u - u_L = -\sqrt{(v - v_L)(p(v_L) - p(v))} \equiv s_1(v, U_L), \quad v_L > v \tag{3}$$

Analogamente fixado U_L encontramos o seguinte conjunto de $U = U(v, u)$ que pode ser conectado a U_L à direita por $2-$choque,

$$S_2 : u - u_L = -\sqrt{(v - v_L)(p(v_L) - p(v))} \equiv s_2(v, U_L), \quad v_L < v, \tag{4}$$

As curva S_k são ditas curvas $k-$choque, $k = 1, 2$ e estão descritas na figura (3) abaixo.

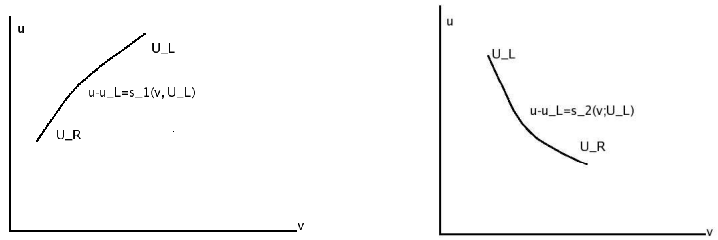


Figura 1: Curvas S_1 e S_2 respectivamente.

Definição 2. *Definimos uma* $k-$onda de rarefação *como uma solução contínua do problema* (1) *da forma* $U{=}U(\frac{x}{t})$.

Para o problema (1)-(2) encotramos uma $1-$onda de rarefação e uma $2-$onda de rarefação que são dadas respectivamente por

$$R_1 : u - u_L = \int_{v_L}^{v} \sqrt{-p'(y)}dy \equiv r_1(v, U_L), \quad v > v_L, \tag{5}$$

$$R_2 : u - u_L = \int_{v_L}^{v} \sqrt{-p'(y)}dy \equiv r_2(v, U_L), \quad v < v_L. \tag{6}$$

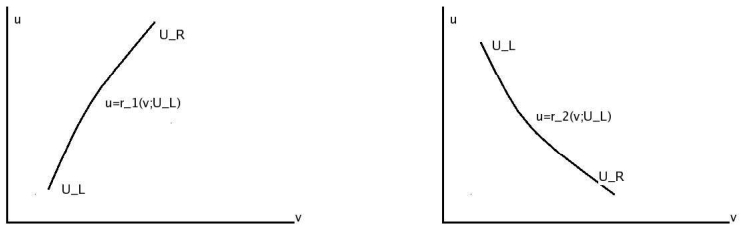


Figura 2: Curvas R_1 e R_2 respectivamente.

Consideremos U_L fixo e U_R variável. Se U_R está em alguma das curvas S_i, R_i, $i = 1, 2$ vimos como encontrar a solução do problema (1)- (2). Se U_R esta em alguma das regiões I, II, III (observe na figura (3) abaixo) podemos encontrar a solução do problema (1)- (2) da seguinte maneira; conectamos U_L a um ponto $\overline{U}$ a por um $k-$choque ou por uma $k-$onda

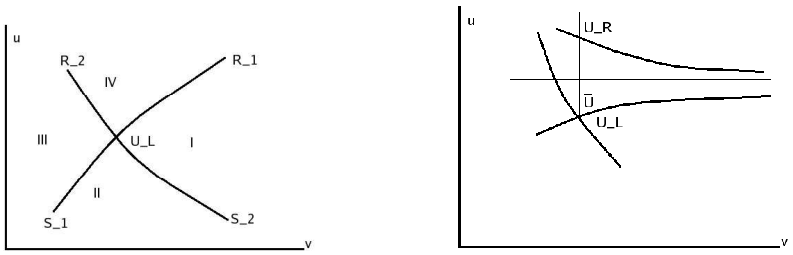


Figura 3: Curvas S_k e R_k em um mesmo plano U_R na região 4 respectivamente.

de rarefação, $k = 1, 2$ e então conectamos U_R a U_L por um $k-$choque ou por uma $k-$onda de rarefação, $k = 1, 2$. O tipo de conecção ocorre dependo da posição de U_R.
Na região IV nem todo ponto U_R pode ser conectado a U_L, ou seja não é para toda condição inicial (U_L, U_R) que o problema de Riemann (1)- (2) tem solução. Observemos na segunda figura acima que dado um estado U_R na região IV não vai existir uma curva de choque ou uma curva de rarefação que encontra a curva que contém U_L, e portanto o problema (1)-(2) não tem solução.

4 Conclusão

Para o sistema p encontramos regiões em que um problema de Riemann tem solução, contudo encontramos uma região em que não se pode encontrar a solução por onda de choque ou por onda de rarefação.
A teoria de onda de choque e onda de rarefação aplicada para o sistema p foi de suma importância e pode ser aplicada a outros sistemas de leis de conservação hiperbólico em uma dimensão, porém cada sistema tem sua particularidade e dificuldade.

Referências

[1] Da MOTA, J. C., DANTAS W., e MARCHESIN, D.,*Combustion Fronts in Porous Media* SIAM J. Appl. Math. 62, 2175-2198, 2002.

[2] LEVEQUE, RAndall J., *Numerical Methods for Conservation Laws*, 2.ed,Basel, Boston, Berlin, 1992.

[3] SMOLLER, Joel, *Shock Waves Reaction-Diffusion Equation*, 2.ed,Basel, Boston, Berlin, 1992.

[1] Bolsista de Iniciação Científica. Instituto de Matemática e Estatítica, lidynet@hotmail.com

[2] Orientador Instituto de Matemática e Estatítica, jesus@mat.ufg.br

Magnetopolaron Ressonante Em Estruturas Semicondutoras

LEITE, Liomar de Miranda[1]; **OSÓRIO,** Francisco Aparecido Pinto[2]

Palvras-chave: Magnetopolaron, impurezas, GaN, Semicondutores

1. INTRODUÇÃO

O grande avanço da ciência de nanoestruturas tem proporcionado um grande impacto em Física. Essas estruturas apresentam qualitativamente novos fenômenos, e uma nova forma de engenharia, a engenharia de band-gap. Essas estruturas estão cada vez mais presentes em dispositivos usuais da sociedade, um exemplo clássico dessas aplicações está no compactdisk (CD-player). Semicondutores viraram referência para essas estruturas, principalmente depois do melhoramento das técnicas de crescimento de cristais semicondutores iniciado na década 60. Epitaxia por Feixe Molecular (MBE), e deposição de Vapor Químico Organometálico (MOCVD) possibilitaram o desenvolvimento de sistemas eletrônicos de baixa dimensionalidade, que consiste na fabricação de heteroestruturas compostas de camadas alternadas de dois materiais semicondutores com interfaces abruptas entre materiais diferentes. Vários estudos de estruturas são baseados em compostos da família III-V que são fracamente polares. Os semicondutores que tem essas propriedades e quando desenvolvido como bulk com uma impureza hidrogenóide verifica-se propriedades interessantes entre os níveis de energia quando um campo magnético uniforme está aplicado. Nos níveis de energia nota-se uma interação elétron-fônons longitudinais ópticos LO, formando assim uma quase- partícula chamada de polaron. Daí a importância da discussão acerca desse tema, seja na procura por novos resultados ou pelo entendimento quântico funcional.

2. METODOLOGIA

A uma impureza doadora hidrogenóide presente no volume de um material semicondutor, aplica-se um campo magnético **B** orientado ao longo do eixo z. Na aproximação da massa efetiva, a hamiltoniana de um elétron ligado a esta impureza e interagindo com os fônons logitudinais ópticos (LO), pode ser escrita da seguinte forma

$$H = H_0 + H_1 + H_2$$

onde, H_0 é a hamiltoniana de um elétron em um campo magnético ligado a impureza doadora, H_1 é a energia cinética dos fônons LO e H_2 a hamitoniana de Frölich, que descreve a interação elétron-fônon LO.

Para o cálculo das energias dos níveis da impureza hidrogenóide associada ao estado fundamental (1s) e aos estados excitados ($2p^+$ e $2p^-$) trata-se H_2 como uma perturbação em relação à $(H_0 + H_1)$. Escolhendo uma função de onda tentativa da forma

$$\Psi_i = A_i \rho^{|m|} e^{im\varphi} e^{-\eta_i \rho^2} e^{\frac{-\beta_i z^2}{2}}$$

onde η e β são os parâmetros variacionais a serem determinados. Normalizando a função de onda, ou seja, determinar A_i, podemos em diante determinar as contribuições das energias em todos os níveis que são: Cinética na direção do campo, cinética na direção perpendicular ao campo, energia com termos dependente do campo e energia coulombiana. Somando todas as energias para cada nível em questão, necessita-se considerar o efeito polarônico para sobre os níveis de energias do doador

que é obtido via teoria de pertubação de segunda ordem de Wigner-Brillouin mellhorada (IWBPT) modificada por Cohn, Larsen e Lax [3]. Que considera H_2como uma pertubação, para daí verificar a energia do i-ésimo nível $\mathcal{E}_i = E_i + \Delta E_i$, onde ΔE_i é o deslocamento de energia provocado pela interação elétron-fônon. Cohn e co-autores [3] que estudaram com mais detalhes essa aproximação obtiveram bons resultados no caso de doadores no CdTe, pois estão em boa concordância com os dados experimentais. Os autores mostraram também que limitar a soma diretamente aos três primeiros níveis conhecidos não produz bons resultados.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Submetido ao trabalho de Almeida [1] analisamos os resultados para o material semicondutor GaN dos efeitos do magnetopolaron ressonante sobre as energias de transição de uma impureza doadora. Os parâmetros utilizados constam na tabela abaixo.

Parâmetros	**Massa de Banda**	**Constante dielétrica estática $\mathcal{E}_0$**	**Constante de acoplamento (α)**	**Campo Magnético (B)**
Sem NP	$0{,}22m_e$, $0{,}24m_e$, $0{,}23m_e$	9,5	0,49	$0\ até\ 10T$
Com NP	$0{,}23m_e$	9,5	0,49	$0\ até\ 60T$

Tabela 1- Parâmetros usados para obtenção dos valores teóricos, escolhidos sob medida para efeito de comparação com os resultados experimentais disponíveis na literatura para o GaN.

Analisamos os resultados gerados por um programa FORTRAN que tem a propriedade de minimizar as energias do sistema proporcionando encontrar as energias de transição entre os níveis propostos.
Sem considerar o efeito polarônico (Sem NP), os resultados foram distorcidos em relação aos dados experimentais de Moore e co-autores [2], ou seja, as energias de transição em função do campo magnético foram consideravelmente irregulares. Deve-se esse fato a importância da interação elétron-fônon no GaN. Já com o efeito polarônico (NP) os resultados analisados tiveram boa concordância com os dados experimentais gerados por Moore e co-autores [2]. Notam-se pequenas variações devido efeito da não parabolicidade, deve-se esse fato a grande energia de band gap do material GaN $(E_g = 3390meV)$, fazendo com que os efeitos da não parabolicidade das bandas de condução não sejam relevantes. Como a constante de acoplamento de Frölich possui um valor para o GaN igual $\alpha = 0{,}49$ que é considerado um valor alto em comparação com os outros materiais semicondutores, e segundo a literatura e os resultados analisados, para esse valor de α há uma maior interação dos elétrons fônons LO, proporcionando uma contribuição polarônica mesmo para campos magnéticos baixos. Nos resultados para NP há um forte "pinning" da energia de transição à medida que a separação entre os níveis aproxima-se da energia dos fônons longitudinais ópticos do GaN $(\hbar\omega_L = 92{,}6meV)$, e a separação ressonante dos níveis ocorre a campos magnéticos altos, da ordem de $140T$, como previsto por Moore e co-autores [2]. Os dados experimentais que existem atualmente dão suporte apenas para os resultados teóricos na região de campos magnéticos baixos $(B \leq 10T)$. Para materiais de gap largo e constante de acoplamento elétron-fonon grande como o GaN, é esperado que os resultados experimentais na região de grandes campos magnéticos devam concordar com os resultados analisados gerados por Almeida [1].

4. CONCLUSÃO

O trabalho consistiu como foi proposto na compreensão da interação elétron-fônon longitudinais ópticos LO em um bulk do material semicondutor GaN entre os níveis de energia de transição $1s - 2p_{-}^{+}$ de uma impureza doadora hidrogenóide levando-se em conta os efeitos da não parabolicidade nas bandas de condução. Consideramos como parte fundamental a verificação da importância da interação elétron-fônon, pois como verificamos nos cálculos com a interação e sem interação e comparando-os com os resultados experimentais contidos na literatura percebemos a importância da interação elétron-fônon, pois os cálculos com o efeito elétron-fônon tiveram boa concordância com esses dados experimentais referenciados, já sem o efeito elétron-fônon houve uma discrepância com os dados experimentais utilizados. Os resultados teóricos para $B < 10T$ também foram importantes, pois eles tiveram boa concordância com os outros resultados teóricos e com os resultados experimentais presentes na literatura. Para $B > 10T$ mesmo não havendo dados experimentais para comparação, por se tratar de uma primeira aproximação para o problema, eles foram satisfatórios, pois verificamos o que foi previsto por Moore e co-autores [2]. Já que conhecemos pouco das propriedades das estruturas à base de GaN e estudos ainda estão sendo feitos para determinar a real influência das interfaces nos resultados; tal conhecimento é fundamental para elaboração de um modelo teórico adequado para esses sistemas eletrônicos.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] Almeida, R. B.; Efeitos do magnetoolaron ressonante sobre as energias de transição de um doador em estrtuturas de um doador em estruturas semicondutoras. Dissertação, Goiânia: UFG (2003).

[2] [16] Moore, W. J.; Freitas Jr.; J. A. e Molnar, R. J., Zeeman sectroscopy of shallow donors in GaN, Phys. Rev. **B56**, 12073 (1997).

[3] Cohn, D. R.; Larsen, D. M. e Lax, B., Polaron Zeeman effect in CdTe, Phys. Ver. **B6,** 1367 (1972).

[4] Almeida, R. B.; Borges, A. N.; Machado, P. C. M.; Leite, J. R.; Osório, F. A. P., Solid State communication 130, 95-99 (2004).

FONTE DE FINANCIAMENTO – Ministério da Integração Nacional e CNPq

---

1. Bolsa de iniciação Científica. Instituto de Física. UFG. lmyork@gmail.com
2. Orientador. IF/UFG. Bolsista CNPq. fosorio@ufg.if.br

DINÂMICA MOLECULAR DE CRISTAIS IMPERFEITOS

COSTA, Lucas Modesto da[1]; **SILVA**, Ladir Cândido da[2];
RABELO, José Nicodemos Teixeira[3]

Palavras-chave: defeitos em cristais, transição de fase - fusão, Dinâmica Molecular

1. INTRODUÇÃO

O estudo de defeitos pontuais em cristais, não obstante sua longa história, continua a atrair grande interesse. Diversas discordâncias entre os autores a respeito dos valores teóricos e experimentais são responsáveis por ainda ser um tópico estudado. Neste trabalho, damos sequência a um estudo por Dinâmica Molecular das características estruturais, dinâmicas e termodinâmicas de cristais de Argônio com vacâncias. Simulamos um sistema de N partículas confinadas em duas dimensões numa rede triangular e interagindo aos pares segundo o potencial de Lennard-Jones. Para aproximar a nossa simulação da realidade, adicionamos defeitos que sempre estão presentes nos sólidos reais. Propriedades importantes dependem destes defeitos, tais como condutividade, cor, luminescência, entre outras. Teoricamente, os defeitos podem ajudar a compreender melhor o mecanismo geral de fusão. Calculamos a energia de formação da vacância para diferentes amostras e estudamos a concentração, a interação, a difusão e o comportamento da rede na presença destes defeitos.

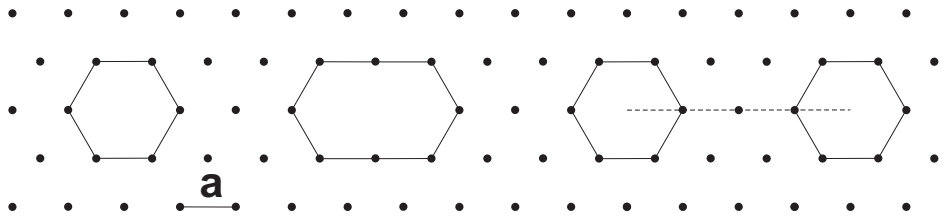


Figura 1: vacância, divacância e duas vacâncias separadas por 4 parâmetros de rede.

2. METODOLOGIA

O método da dinâmica molecular baseia-se na descrição microscópica de um sistema físico, fornecendo trajetórias de fases clássicas de um sistema de partículas interagentes via um potencial bem conhecido. Em nossas simulações, utilizamos o algoritmo *Predictor-Corrector* de acordo com ALLEN e TILDESLEY (1987) para calcular as posições e velocidades após cada incremento de tempo. Usamos condições periódicas de contorno e, para visualizar a mudança de estado da amostra, implementamos a função de distribuição radial e o deslocamento quadrático médio. A temperatura é controlada pelo termostato de *Berendsen*, conforme BERENDSEN, POSTMA, GUNSTEREN et al. (1984), que define o acoplamento do sistema a um reservatório térmico. Criamos uma função que descreve exatamente a posição das vacâncias verificando quais os são sítios ocupados. Os valores encontrados neste trabalho estão em unidades reduzidas. Semelhante ao experimento real, selecionamos a amostra e as condições do experimento, ou condições iniciais como temperatura, incremento de tempo, número de partículas, densidade, entre outros, para inserirmos em nossa simulação. Depois esperamos o tempo necessário para que o sistema entre em equilíbrio. Este processo é executado integrando-se as equações de movimento clássicas. Para gerar as vacâncias, retiramos um ou mais elementos para formar os defeitos. Depois corrigimos a caixa de modo que os dois sistemas, com e sem o defeito estejam à mesma densidade.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para diferentes sistemas, procuramos determinar a temperatura de fusão. Simulando com 340 átomos, obtemos os seguintes valores aproximados:

Densidade (ρ)	$0,80$	$0,85$	$0,90$	$0,95$	$1,00$
Temperatura de fusão	$0,35$	$0,65$	$1,20$	$1,90$	$2,60$

A energia de formação de uma vacância, na figura 2, com densidade $\rho = 0,9$, praticamente não varia com a temperatura bem antes da fusão, onde predomina a energia potencial. Na medida que se aproxima da fusão, porém, a energia cinética passa a competir com a energia potencial e isso provoca maior flutuação na energia total o que faz crescer a energia de formação. À medida em que a temperatura sobe além dessa região, a energia

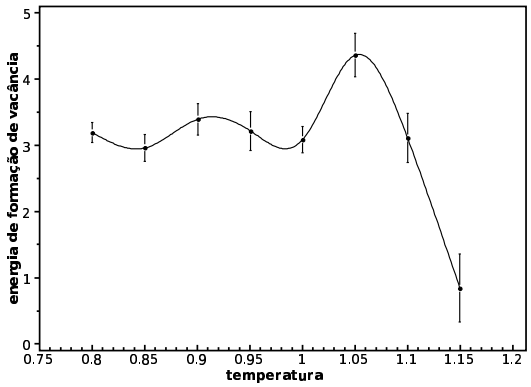


Figura 2: energia de formação de uma vacância em função da temperatura com $\rho = 0,9$ e $N = 340$.

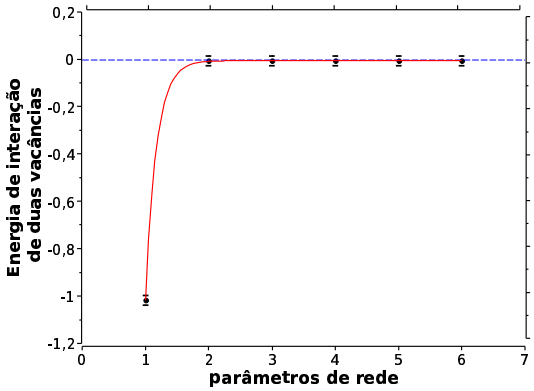


Figura 3: energia de interação entre vacâncias em função do parametro de rede com $T = 0,01$.

cinética passa a predominar provocando o decrescimento da energia de formação de forma acentuada. Isso explica maiores concentrações de vacâncias acima do ponto triplo. Para diversas amostras encontramos que a energia de interação entre as vacâncias, segundo CÂNDIDO, PHILLIPS e CEPERLEY (2001), apresenta forma da figura 3. A energia de ligação de pares é negativa, o que reflete o caracter atratativo a distâncias muito curtas, e essa atração diminui rapidamente com a distância. Na figura 4, mostramos a

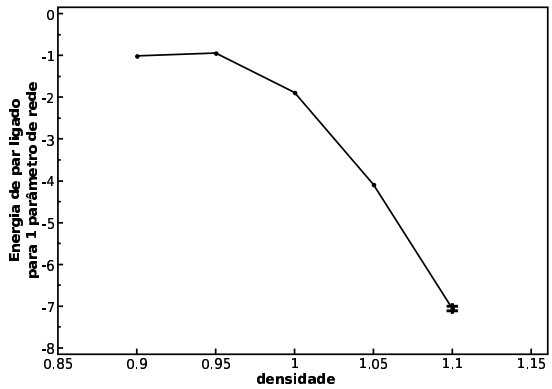


Figura 4: energia de interação da divacância com $T = 0,01$ em diferentes densidades.

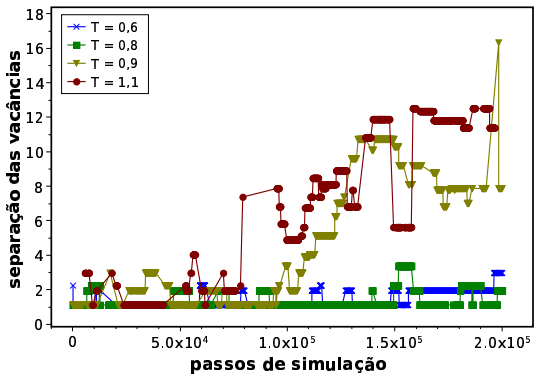


Figura 5: distância de duas vacâncias para diferentes temperaturas no decorrer do tempo.

dependência da energia de interação da divacância com a densidade, para a temperatura $T = 0,01$. Seu valor absoluto aumenta com a densidade. Porém, mesmo a altas densidades, a atração não é suficiente para criar um par estável de vacâncias, pois a temperatura de fusao também aumenta com a densidade. Com a energia de interação da divacância observamos que seu valor determina a temperatura em que a divacância deixa de ser atrativa e começa a se separar. Podemos observar isso no gráfico 5, que representa a difusão

de duas vacâncias que inicialmente estão na forma de divacância e que podem se afastar. É esperado que próximo da fusão, a concentração de vacâncias aumente muito já que a

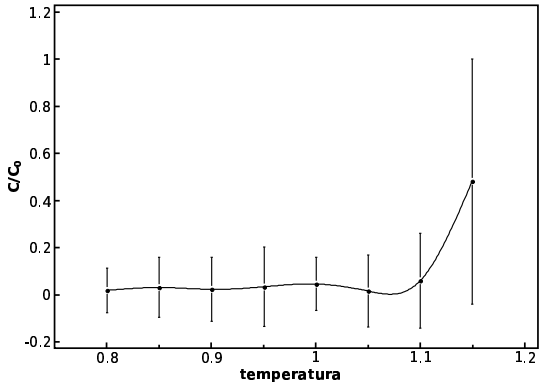


Figura 6: concentração em função da temperatura com densidade $\rho = 0,9$ com $N = 340$.

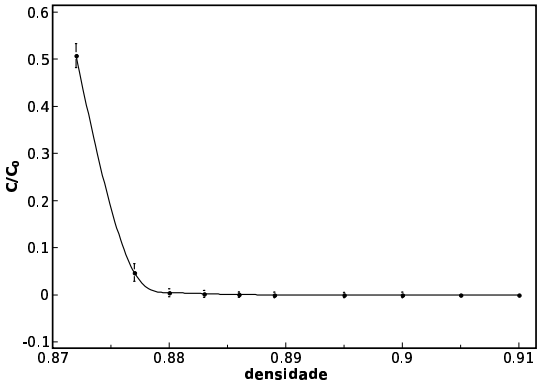


Figura 7: concentração em função da densidade com temperatura $T = 0,1$ com $N = 340$.

energia é menor para sua formação, além de ser um fenômeno bem conhecido no meio científico. Observa-se na figura 6 que a concentração aumenta rapidamente ao aproximar da região de fusão, que inicia na temperatura de 1,2, mantendo a densidade constante. O mesmo processo pode ser feito diminuindo a densidade, mantendo a temperatura constante, como na figura 7. Neste último, vemos como a concentração aumenta bastante ao chegar numa densidade baixa o suficiente para ocorrer fusão na temperatura de $T = 0,1$.

4. CONCLUSÃO

A energia de formação de vacâncias tende para zero ao se aproximar do ponto de fusão para várias densidades, o que sugere que tal defeito seja forte candidato ao papel de participante do mecanismo de fusão nestes materiais. A interação entre duas vacâncias é atrativa a pequenas distâncias, em torno de um parametro de rede. Para distâncias maiores, podemos tratar as vacâncias como elementos isoladas, sem nenhuma interação entre as mesmas. Como era esperado, a concentração da mesma aumenta muito perto da fusão de um cristal.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. ALLEN, M. P.; TILDESLEY, D. J. **Computer Simulation of Liquids**. Oxford: Oxford University Press, 1987.
2. BERENDSEN, H. J. C.; POSTMA, J. P. M.; GUNSTEREN, W. F. van; DINOLA, A.; HAAK, J. R. Molecular dynamics with coupling to an external bath. **The Journal of Chemical Physics**, v.81, n.8, p.3684-3690, out. 1984.
3. CÂNDIDO, L.; PHILLIPS, P.; CEPERLEY, D. M. Single and Paried Point Defects in a 2D Wigner Crystal. **Physical Review Letters**, v.86, n.3, p.492-495, jan. 2001.

FONTE DE FINANCIAMENTO - CNPq e Funape

1. Bolsa de Iniciação Científica. Instituto de Física. UFG. lucmod@gmail.com
2. Co-orientador. IF - UFG. ladir@if.ufg.br
3. Orientador. IF - UFG. jrabelo@if.ufg.br

Variedades de Einstein: um estudo introdutório.

Aluno: **Barboza,** Marcelo Bezerra; Orientador: **Pina,** Romildo da Silva;

Palavras-chave: variedades, Einstein;

1. Introdução

As variedades de Einstein são importantes em geometria diferencial, pois, sendo um ponto crítico do 'funcional de Hilbert-Einstein', apresentam a singular propriedade de terem sua curvatura suavemente distribuída ao longo da variedade: embora sua curvatura seccional não seja constante, sua média aritmética o é. O estudo destas variedades constitui um denso ramo de pesquisas em geometria, havendo ainda muitas perguntas não respondidas a seu respeito.

2. Objetivos

O objetivo deste plano de trabalho é o seguinte:

(1) Fazer um estudo sobre superfícies abstratas e variedades;

(2) Fazer um estudo das principais propriedades conhecidas sobre variedades de Einstein;

3. Metodologia

A metodologia utilizada neste plano de pesquisa é a seguinte:

(1) Análise do problema proposto;

(2) Levantamento da bibliografia utilizada;

(3) Participação em seminários;

(4) Estudo individual e reuniões semanais com o orientador;

(5) Análise dos resultados obtidos.

Variação do funcional de Hilbert-Einstein

Definição 1. *Sejam* $(\mathbb{M}, g)$ *uma variedade riemanniana compacta orientável e* $dV_g = \sqrt{det(g_{ij})}dx_1 \wedge \cdots \wedge dx_n$ *seu elemento de volume, em coordenadas locais. Os seguintes funcionais são definidos para uma variedade* $\mathbb{M}$ *fixa e métrica* g *variando:*

$$Vol(g) = \int_{\mathbb{M}} dV_g, \quad S(g) = \int_{\mathbb{M}} S_g dV_g. \tag{1}$$

O funcional S *é chamado de 'o funcional de Hilbert-Einstein'.*

Seja $\mathbb{M}$ uma variedade com métrica g dada. A variação da métrica g na direção h com o parâmetro real t é definido por $g_t = g + t \cdot h$, onde h é um arbitrário, mas fixo, (0,2)-tensor.

Como g é não degenerada, g_t é também não degenerada, desde que t seja suficientemente pequeno.

Proposição 1. *Seja* dV_t *o elemento de volume de* $g_t = g + t \cdot h$ *com* $dV_0 = dV_g$. *Então*

$$\frac{d}{dt}|_{t=o}(dV_t) = \frac{1}{2} Tr_g h \cdot dV_g \tag{2}$$

Proposição 2. *Seja* $g_t = g + t \cdot h$ *uma variação da métrica, e seja* ∇^t *a conexão Riemanniana e* R^t *o tensor curvatura de* g_t, *com as condições naturais* $\nabla^0 = \nabla$ *e* $R^0 = R$. *Então temos:*

(i)$g(\frac{d}{dt}|_{t=0}\nabla^t_X Y, Z) = \frac{1}{2}(\nabla_X h)(Y, Z)) + (\nabla_Y h)(Z, X) - (\nabla_Z h)(X, Y)$

(ii) A função $X, Y \mapsto \nabla'_h(X, Y) := \frac{d}{dt}|_{t=0}(\nabla^t_X Y)$ *é um (1,2)-tensor simétrico nas duas variáveis.*

(iii)$\frac{d}{dt}|_{t=0}(R^t(X, Y)Z) = (\nabla_X \nabla'_h)(Y, Z) - (\nabla_Y \nabla'_h)(X, Z)$.

Proposição 3. *Sejam* $\mathbb{M}$ *uma variedade compacta orientável, e* $g_t = g + t \cdot h$ *uma variação da métrica* g. *Permita que* S_t *denote a curvatura escalar de* g_t. *Então*

$$\frac{d}{dt}|_{t=0} S(g_t) = \frac{d}{dt}|_{t=0} \int_{\mathbb{M}} S_t dV_t =< \frac{S \cdot g}{2} - Ric, h >_g . \tag{3}$$

Observe que a métrica g_t é um ponto fixo do funcional S_{g_t} se, e só se, $Ric = \dfrac{S \cdot g}{2}$, ou seja, quando $\mathbb{M}$ é uma variedade de Einstein.

Bibliografia

[1] Carmo, M. P. do - Geometria Diferencial de Curvas e Superfícies - Sociedade Brasileira de Matemática, 2005;

[2] Carmo, M. P. do - Geometria Riemanniana - IMPA , 2005;

[3] Künhel, W., Differential Geometry, Curves - Surfaces - Manifolds, Translated from the 1999 German original by Bruce Hunt. Student Mathematical Library, 16. American Mathematical Society, Providence, R1, (2002);

[4] Tenenblat, K. - Introdução à geometria diferencial, Editora Unb, Brasília, 1988.

AVALIAÇÃO DA AÇÃO GENOTÓXICA DO COMPOSTO CIS-TETRAAMINOXALATORUTÊNIO (III) EM CAMUNDONGOS SWISS

PEREIRA, Nilson Rodrigues[1]; **RIBEIRO**, André Luis Thomé[1]; **SILVEIRA-LACERDA**, Elisângela de Paula[2]

Palavras-chave: Complexo de Rutênio, *Palicourea coriacea*, Toxicidade aguda

1. INTRODUÇÃO (justificativa e objetivos)

A neoplasia, de acordo com o Instituto Nacional do Câncer é um conjunto de mais de 100 doenças que tem em comum o crescimento desordenado (maligno) de células que invadem órgãos e tecidos, podendo se espalhar por todo o corpo (metástase). A busca por soluções ou meios de converter os quadros de morbidade e mortalidade causados pelas neoplasias são objetivos fundamentais da área biomédica. Um dos focos destes estudos baseia-se nos experimentos com compostos anti-neoplásicos utilizando metais e compostos inorgânicos. O primeiro grande achado nesta busca foi à utilização da Cisplatina e seus compostos, como forma de combater o câncer. Com características semelhantes encontra-se o Rutênio e seus compostos, em destaque o NAMI-A. Neste trabalho, utilizamos o composto de rutênio III, cis-tetraaminoxalatorutênio *(cis-[RU(C_2O_2)(NH_3)$_4$]$_2$)*. A análise do potencial tóxico deste composto a núcleos celulares, através do teste do micronúcleo, em organismos vivos tem fundamental importância no desenvolvimento de novos fármacos para o tratamento de neoplasias. Com isto, visamos o desenvolvimento de um fármaco eficaz para o tratamento de neoplasias e metástases, com toxicidade menor quando comparado aos compostos já consolidados no mercado como a carboplatina e a cisplatina.

2. METODOLOGIA

2.1 – Preparo dos compostos

O composto-teste foi sintetizado pelo Laboratório de Química Supramolecular do Instituto de Química da Universidade Federal de Uberlândia.

2.2 – Teste do micronúcleo em células de medula óssea de camundongos swiss

De acordo com a Dl50 do composto, foram definidos três grupos teste com 5 animais cada, referentes à 25%, 50% e 80% deste valor (75, 150 e 240 mg/kg respectivamente) além de grupos controle positivo (ciclofosfamida) e negativo para ambos os sexos. Os animais tratados foram sacrificados 24 horas após a aplicação do composto-teste, seus fêmures retirados para lavagem do conteúdo medular com soro fetal bovino e análise das células desta região em lâminas coradas com Giemsa. Analisou-se células normocromáticas (NCE) e policromáticas (PCE) da linhagem eritrocitária em busca de alterações nas proporções entre elas e a existência de número aumentado de micronúcleos.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Numa analise dos primeiros instantes após a aplicação dos compostos, animais de ambos os sexos dos grupos de 50% e 80% apresentaram secreções brancas nos olhos após os primeiros 15 minutos. Estes animais mantiveram os olhos fechados, com indícios de alguns distúrbios motores. Após 30 minutos do início do experimento, a primeira fêmea chegou ao óbito, cujo grupo correspondente era o de 240 mg/kg do composto-teste. No total, todas as fêmeas deste grupo chegaram ao

óbito, além de dois machos do mesmo grupo e uma fêmea do grupo de 50%. De acordo com o regime de doses, os óbitos não eram previstos. A proporção de eritrócitos imaturos (PCE) dentre o total de eritrócitos (PCE + NCE) foi determinada contando-se 200 eritrócitos (PCE + NCE) por animal, e a variação do número de micronúcleos contando-se 1000 PCEs por animal.

Tabela 1. Resultados óbitos no teste de micronúcleo após análise de células da medula óssea de camundongos swiss.

Camundongo	**Sexo**	**PCE**	**PCEMN***	**PCE * / (PCE+NCE)**
75 mg/kg	Feminino	1000	3,2	0,58
75 mg/kg	Masculino	1000	2	0,5
150 mg/kg	Feminino	1000	2	0,42
150 mg/kg	Masculino	1000	3	0,45
240 mg/kg	Masculino	1000	2,8	0,3
Cont. Positivo	Ambos	1000	8,2	0,72
Cont. Negativo	Ambos	1000	2,2	0,63

*Valores médios

Os resultados omitidos para o grupo de 240 mg/kg para fêmeas referem-se aos óbitos antes das 24 horas do teste, impossibilitando a realização do teste do micronúcleo.

O teste do micronúcleo é o ensaio, in vivo, mais amplamente utilizado para a detecção de agentes clastogênicos (que quebram cromossomos) e aneugênicos (que induzem aneuploidia ou segregação cromossômica anormal), internacionalmente aceito como parte da bateria de testes recomendada para a avaliação do potencial mutagênico e para o registro de novos produtos químicos que entram anualmente no mercado mundial. Este teste foi desenvolvido de inicio, em eritrócitos de medula óssea de camundongos mas é também realizado em ratos.

A presença de micronúcleos (MN) é analisada em eritrócitos policromáticos (PCE, eritrócitos jovens) de medula óssea de camundongos, mas pode, também, ser analisada em eritrócitos normocromáticos (NCE, eritrócitos maduros).

O teste do micronúcleo serve como biomarcador efetivo na avaliação de risco à obtenção de câncer e identificação de genomas mutados.

Como se pode notar, os grupos controle positivo e negativo representaram de forma bastante adequada e clara os efeitos clastogênicos ou não, causados por substâncias exógenas ao organismo, que podem ser vistos nas células eritrocitárias micronucleadas.

Os valores encontrados nos grupos controle ficaram dentro do esperado de acordo com a literatura.

Os grupos tratados com o composto-teste *cis*-tetraaminoxalatorutênio, não apresentaram aumento relativo de micronúcleos (Figura 1), com valor bastante próximo ao normal. No entanto, o valor comparativo entre NCEs e PCEs, demonstrou certa propensão à queda, já que o grupo controle negativo obteve a

média de 0,626 e desvio padrão de apenas 0,016, enquanto o grupo tratado com 250 mg/kg do composto teste apresentou 0,3 e 0,03, respectivamente.

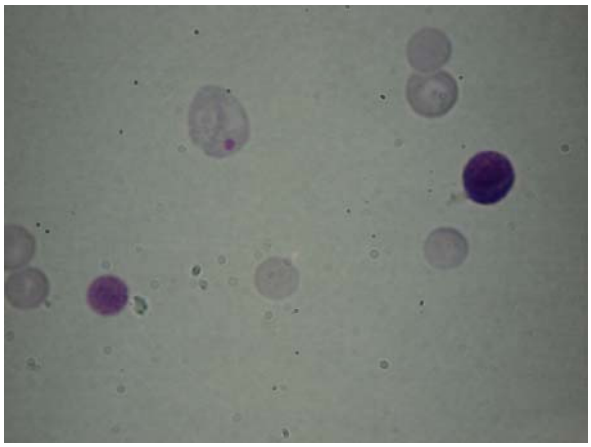


Figura 2: Micronúcleo em célula policromática no grupo da droga teste, 150 mg/kg

No grupo de 50% da dl_{50}, os valores PCE/(NCE+PCE), também ficaram abaixo do esperado., demonstrando que o composto pode ter agido de forma a causar algum tipo de supressão da medula óssea, ou ainda desviando o seu curso estável de geração de células sanguíneas, refletido no número diminuído de PCEs encontrados na medula. Devido à média da freqüência de micronúcleos e se comparando a freqüência normal de 3/1000, conclui-se que não houve atividade mutagênica em nenhum dos casos.

4. CONCLUSÃO

Como visto, a padronização das técnicas seve de base para a correta confecção de resultados confiáveis. Após a padronização da técnica e coloração, tornou-se realizável o experimento em si.De acordo com os resultados obtidos, pudemos concluir que: o composto *cis*-tetraaminoxalatorutênio não apresentou aumento significativo no valor de micronúcleos das células eritrocitárias; o composto teste apresentou redução significativa (<0,05%) na proporção entre PCEs e NCEs. Portanto, o composto não apresentou genotoxicidade de modo a causar aumento do número de micronúcleos nos grupos administrados, nas circunstâncias testadas.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

CLARKE, M.J. Ruthenium metallopharmaceuticals. Coord. Chemistry Rev., v.236, p. 209-233, 2003.

RIBEIRO, L.R.; SALVADORI, D.M.F.; TAKAHASHI, C.S. e GRISÓLIA. C.C. **Teste do micronúcleo em eritrócito de medula óssea de camundongos**. (Site da Sociedade Brasileira de Mutagênese e Carcinogênese Ambiental – SBMCTA). Disponível em: <http://www.sbmcta.org.br/index.php?arq=doc01>. Acesso em 17 de junho de 2007.

FONTE DE FINANCIAMENTO – CNPq/PIBIC

[1] Bolsista de iniciação científica. Instituto de Ciências Biológicas - ICB - Laboratório Genética Molecular e Citogenética, pereirarn@gmail.com

[2] Orientador/Instituto de Ciências Biológicas/UFG, elacerda@icb.ufg.br

MODOS VIBRACIONAIS EM UMA REDE DE FAVO DE MEL

TOMÁZ, Raphael Silva*; RABELO, José Nicodemos Teixeira†
Instituto de Física-UFG

Palavras-Chaves: Física do estado sólido, Dinâmica de rede, Estrutura de favo de mel

I. INTRODUÇÃO

A Física do Estado Sólido diz respeito, em grande parte, ao estudo dos cristais e dos elétrons nos cristais. O estudo do estado sólido como extensão da Física Atômica começou nos primeiros anos do século passado, após a descoberta da difração dos raio X e depois da publicação de uma série de artigos contendo cálculos e previsões simples sobre as propriedades cristalinas.

Em cristais os átomos vibram e torno de uma posição de equilíbrio e o calculo dos modos e freqüências vibracionais dessa rede de vibrações são assuntos importantes e muito estudados em física do estado sólido. Para interpretar várias propriedades das redes, por exemplo, calor específico, coeficiente de expansão térmica, constante elástica, é essencial o cálculo dos modos vibracionais.

Dentro da mecânica clássica a dinâmica de rede é tratada com as equações do movimento dos átomos que a compõe, sendo que para determinar as freqüências e modos vibracionais é necessário calcular os autovalores e autovetores da matriz-dinâmica que é obtida do potencial de interação interatômica.

II. OBJETIVOS

Primeiramente nosso objetivo era estudar coexistência solido-líquido em esferas macias porém optamos em estudar a física do estado sólido para melhor entendimento do novo método de cálculo para as freqüências e modos vibracionais de uma rede proposto por Ref.[2], já que o método tradicional é árduo e cansativo. Utilizaremos como exemplo do nosso trabalho a dinâmica de rede de uma estrutura de favo de mel já que suas propriedades de simetria favorece em nosso trabalho.

III. METODOLOGIA

Primeiro calcularemos a força de interação em cada átomo. Neste modelo simples, a interação interatômica pode ser representada por molas conectando os átomos da rede. O potencial de interação interatômica é freqüentemente aproximado incluindo apenas os termos quadráticos dos deslocamentos do átomos. Isto é chamado de aproximação harmônica.

As molas são ditas ideais e assim podemos afirmar que a força é proporcional ao deslocamento em relação ao ponto de equlíbrio. Denotando $\vec{r}$ como posição final da mola então a mudança de comprimento da mola é dada por $|\vec{r}| - |\vec{d}|$ e chamemos as constantes das molas por D. Então a força restauradora é:

$$\vec{F} = -D\frac{\vec{d}\times\vec{d}}{d^2}\vec{u}. \tag{1}$$

Achada a fórmula da força, escolheremos a nossa primeira célula da rede de favo de mel.

Chamemos os átomos da base da célula de m_1 e m_2, assim podemos mostrar que as equações do movimento para $\vec{u}(\vec{r})$ e $\vec{v}(\vec{r})$ são:

$$m_1\ddot{\vec{u}}(\vec{R}) = -D\vec{n}_1\times\vec{n}_1\cdot[\vec{u}(\vec{R})-\vec{v}(\vec{R})] - D\vec{n}_2\times\vec{n}_2\cdot[\vec{u}(\vec{R})-\vec{v}(\vec{R}-\vec{a}_1)] - D\vec{n}_3\times\vec{n}_3\cdot[\vec{u}(\vec{R})-\vec{v}(\vec{R}-\vec{a}_2)] \tag{2}$$

$$m_2\ddot{\vec{v}}(\vec{R}) = -D\vec{n}_1\times\vec{n}_1\cdot[\vec{v}(\vec{R})-\vec{u}(\vec{R})] - D\vec{n}_2\times\vec{n}_2\cdot[\vec{v}(\vec{R})-\vec{u}(\vec{R}+\vec{a}_1)] - D\vec{n}_3\times\vec{n}_3\cdot[\vec{u}(\vec{R})-\vec{v}(\vec{R}+\vec{a}_2)]. \tag{3}$$

---

* Bolsisita Voluntário. rapha_tomaz@hotmail.com
† Orientador. jrabelo@if.ufg.br

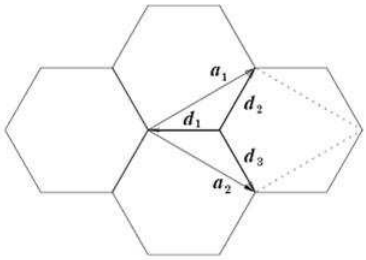


Figura 1: A célula utilizada será representada pelos vetores $\vec{a_1}$ e $\vec{a_2}$ mais as linhas pontilhadas, portanto a nossa célula tem um átomo no ponto inicial comum dos dois vetores enquanto o outro está a $\frac{1}{3}(\vec{a}_1 + \vec{a}_2)$.

Essas equações do movimento são um jogo infinito de contas. Então procuremos agora uma solução que representa uma onda de frequência angular. Tentaremos como resposta para as equações soluções do tipo:

$$\vec{u}(\vec{R}) = \frac{\vec{u}(\vec{q})}{\sqrt{m_1}} e^{i\omega(\vec{q})t + i\vec{q}\cdot\vec{R}} \tag{4}$$

$$\vec{v}(\vec{R}) = \frac{\vec{v}(\vec{q})}{\sqrt{m_2}} e^{i\omega(\vec{q})t + i\vec{q}\cdot\vec{R}}. \tag{5}$$

Substituino as soluções nas equações encontramos a resposta.

$$\vec{D}[\vec{q}] \begin{bmatrix} \vec{u}(\vec{q}) \\ \vec{v}(\vec{q}) \end{bmatrix} = \omega^2 \begin{bmatrix} \vec{u}(\vec{q}) \\ \vec{v}(\vec{q}) \end{bmatrix} \tag{6}$$

onde

$$\vec{D}[\vec{q}] = \begin{bmatrix} \vec{D}_{11}(q) & \vec{D}_{12}(\vec{q}) \\ \vec{D}_{21}(q) & \vec{D}_{22}(q) \end{bmatrix}. \tag{7}$$

A matriz $\vec{D}(\vec{q})$é chamada de matriz dinâmica. As autofreqüências podem ser encontradas resolvendo a seguinte equação:

$$det[\vec{D}(\vec{q}) - \omega^2(\vec{q})\vec{I}] = 0. \tag{8}$$

Onde $\vec{I}$ é matriz identidade 4x4. O calculo desse determinante é tedioso. Portanto a necessidade de aprender o metodo analítico.

Calculando $\overline{\lambda}(q)$ podemos obter as 4 auto frequências da matriz dinâmica $\vec{D}(\vec{q})$ que é um dos nossos objetivos.

$$\omega_{1,2} = \sqrt{\lambda_{1,2}(q)} = \sqrt{\frac{3}{4}D\left[\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \pm \sqrt{\left(\frac{1}{m_1} - \frac{1}{m_2}\right)^2 + \frac{12 + 8\eta(q)}{9m_1m_2}}\right]} \tag{9}$$

$$\omega_3 = \sqrt{\lambda_3(q)} = 0 \quad e \quad \omega_4 = \sqrt{\lambda_4(q)} = \sqrt{\frac{3}{2}D\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right)} \tag{10}$$

IV. RESULTADOS

Utilizando programas em linguagem FORTRAN conseguimos resolver os problemas e obtendo alguns gráficos.

Nas gráficos vimos os modos vibracionais para ω_1 e ω_2. A partir deles conseguimos notar a simetria dos modos (rotacionados de 60 °em relação ao eixo x) e observar que para $\vec{q} = 0$ o modo vibracional ω_1 possui um valor mínimo e já em ω_2 o valor, para o mesmo ponto, é máximo.

Quando os modos vibracionais tendem a zero na medida que $|\vec{q}|$ também tende a zero elas são chamadas na literatura de *banda acústica*, no nosso caso podemos perceber que ω_1 é um exemplo de *banda acústica*, quando isso não acontece como em ω_2 e ω_4 eles são chamados de *banda óptica*.

V. CONCLUSÃO

Supondo interação apenas de átomos vizinhos e que eles são conectados por molas ideais, calculamos a força da mola que agem sobre os átomos. Explicitamos as equações de movimento e a partir delas a matriz dinâmica foi encontrada e podemos encontrar os modos vibracionais resolvendo os autovalores da matriz dinâmica.

Encontramos respostas esperadas como $\omega_3 = 0$ que indica uma instabilidade na rede pois, não levamos em conta os termos de segunda ordem dos deslocamentos. Depois usamos $m_1 = m_2$ e vimos que zona vaga entre as frequências desaparece que e esse resultado é bem parecido com o que se encontra na literatura.

---

[1] Kittel, C. (1978), *Introdução à Física do Estado Sólido*, Ed. Guanabara Dois S.A., Rio de Janeiro

[2] József Cserti, Géza Tichy (2004), *A simple model for the vibrational modes in honeycomb lattices*, European Journal of Physics. 25 p. 723-736

SUPERPOSIÇÃO DE ESTADOS DA LUZ

TSUKINO, Roberto César e DANTAS, Célia M. A.
Instituto de Física - UFG

Palavras Chave: Superposição, Interferência, Estados da Luz

1 Introdução

O princípio da superposição está no coração da mecânica quântica [1]. Ele nos diz que a superposição de estados da luz resulta em novos estados com propriedades específicas. É isto que garante a dualidade onda-partícula tanto da matéria quanto da radiação.

2 Objetivo

Nosso objetivo é superpor o estado de número deslocado para obter um novo estado do campo eletromagnético e investigar as suas propriedades estatísticas.

3 Metodologia

Para estudar as propriedades estatísticas do estado de superposição de N estados de número deslocados utilizaremos as distribuições no espaço de fase: função de Wigner W [2] e a função de Husime Q [3].

4 Resultados e Discussão

A seguir, definiremos a superposição de N estados de número deslocados e falaremos de suas propriedades.

4.1 Superposição de N Estados de Número Deslocado

A superposição de N estados de número deslocado é definido como

$$|N, n, \alpha\rangle = N_n \sum_{p=1}^{N} |n, \alpha\rangle \,, \tag{1}$$

onde $|n, \alpha\rangle = D(\alpha)\,|n\rangle$ é um estado de número deslocado [4].

A representação pictórica deste estado é mostrada na Figura(1)

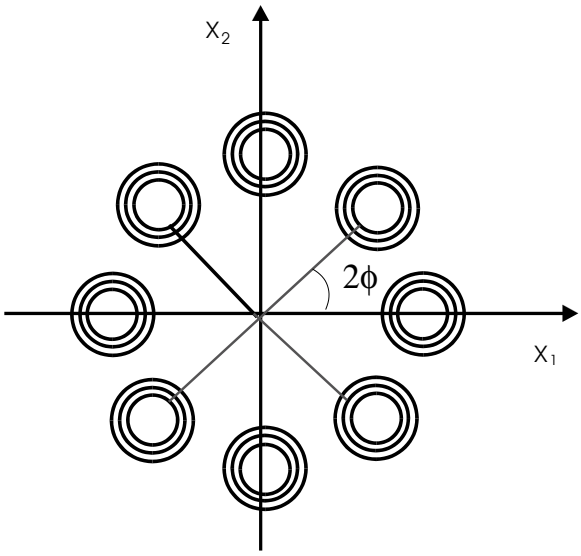


Figura 1: Representação pictórica da superposição de N estados de número deslocado.

A função de Wigner e a função Q para este estado são dados respectivamente por

$$W(x,p) = \frac{N_n(-1)^n}{\pi}\left[\sum_{k=1}^{N} e^{-\frac{1}{2}r_1}L(r_1) + 2\sum_{k=1}^{N}\sum_{j=k=1}^{N} e^{-\frac{1}{2}r_2}L(r_2)\cos(r_3)\right], \tag{2}$$

e

$$Q\left(x,p\right) = \frac{\mathcal{N}_n^2}{2\pi n!}\sum_{k,j=1}^{N}\left(\frac{(x-ip)}{\sqrt{2}} - \alpha_k^*\right)^n\left(\frac{(x+ip)}{\sqrt{2}} - \alpha_j\right)^n \times$$
$$\times e^{\frac{-\left|\alpha_k - \frac{(x+ip)}{\sqrt{2}}\right|^2 - \left|\alpha_j - \frac{(x+ip)}{\sqrt{2}}\right|^2}{2} + i\,\mathrm{Im}(\frac{(x-ip)}{\sqrt{2}}\alpha_k) - i\,\mathrm{Im}(\frac{(x-ip)}{\sqrt{2}}\alpha_j)}. \tag{3}$$

Defini-se a função de correlação C_W como

$$C_W = W(x,p) - P(x)P(p), \tag{4}$$

e a função C_Q como

$$C_Q = Q(x,p) - P(x)P(p), \tag{5}$$

Na Fig.(2) mostramos o gráfico das funções de Wigner, Q e as respectivas funções de correlação para o estado de superposição de N estados de número deslocado

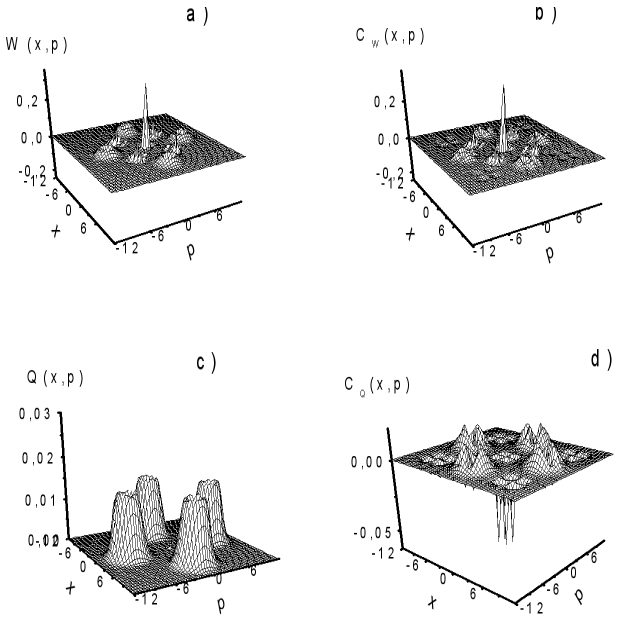


Figura 2: Funções Wigner (a) e Q (c) para o número de estados superpostos $N = 8$, $n = 2$, $\alpha = 9$ e diferença de fase $2\phi = \frac{\pi}{4}$ com as respectivas funções correlações

5 Conclusão

Como podemos ver na Figura(2) o estado de superposição de N estados de número deslocado apresenta os efeitos quânticos de interferência no espação de fase [5]. Esta interferência é mais acentuada na função de Wigner que na função Q, embora seja o mesmo estado. Isto ocorre porque a função Q ameniza os efeitos quânticos do estado em troca da simplificação da expressão analítica. É neste contexto que a função correlação apresenta um papel fundamental, pois ela mostra as propriedades quânticas que a função Q ocultou.

Referências

[1] P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. (London), A**114**, 243(1927).

[2] E. P. Wigner, Phys. Rev. **40,** 749(1932)

[3] K. Husimi, Proc, Phys. Math. Soc. Jpn **22,** 264(1940)

[4] F.A.M. de Oliveira; M. S. Kim e P.L.Knight, Phys. Rev.A**41**, 2645(1990)

[5] W. Schleich, M. Pernigo e Fam Lien Kien, Phys, Rev A**44**, 2172(1991); W. Schleich e J. A. Wheeler, Nature **326**, 574(1987)

Moléculas Artificiais: Um estudo da variação do potencial de interação nas propriedades estruturais

CANTANHEDE, Sávio Silva*; CÂNDIDO, Ladir da Silva†
Instituto de Física-UFG

Palavras-Chaves: Dinânica Molecular, Moléculas Artificiais, Potencial de Interação

I. INTRODUÇÃO

O método de simulação computacional, veio juntamente com a chegada da revolução científica gerando uma estreita ligação entre a teoria e a experiência.

É essencial lembrar que a simulação computacional não se limita ao uso de computadores e muito menos substitui a teoria e a experiência, mas contribui enormemente para o avanço de ambas.

Aglomerados contituídos de um pequeno número de partículas distribuídas espacialmente, tem sido usada para descrever uma grande variedade de sistemas físicos como por exemplo: eletrons em pontos quânticos semicondutores, elétrons confinados em bolhas e "covas" sobre uma superfície de hélio líquido, armadilhas a laser e radiofreqüências para íons e elétrons em plasma, elétrons em pontos quânticos em superfícies semicondutoras, e mais recente o cristal esférico de Coulomb tem sido observados e experimentos com plasmas ultra-frios de íons, Ref.[1].

Neste trabalho utilizando a Dinâmica Molecular, estudaremos um sistema constituído de uma molécula artificial simétrica, a qual é constituída pelo aclopamento de dois átomos artificiais que são formados por partículas carregadas interagindo através de potenciais que variam desde coulombiano blindado até logaritimo e confinados por um potencial harmônico. Calculamos a energia total e as configurações do estado fundamental para várias moléculas com números de partículas variando de N = 2 a 10.

II. METODOLOGIA

A idéia do método de Dinâmica Molecular é o de fazer uma descrição microscópica bem definida de um sistema físico. O sistema pode ter poucos ou muitos corpos. A descrição deve ser feita pela Lagrangeana (Hamiltoniana), ou expressa diretamente em equação de movimento de Newton. O método Ref.[4,5], como o próprio nome sugere, calcula as propriedades estáticas e dinâmicas de um sistema usando as equações de movimento.

O objetivo é resolver as equações de movimento numericamente (utilizando métodos iterativos) em computador. Para se fazer isto, as equações são aproximadas por um esquema conveniente para se obter a evolução numérica. Existem erros envolvidos devido à transição da descrição em termos de variáveis contínuas com operador diferencial para a descrição com variáveis discretas, operadores diferença finita. O método fornece trajetórias de fases clássicas de um sistema de partículas interagentes via um potencial bem conhecido. Se as posições das partículas são denotadas por r_i, e a energia potencial do sistema por U, as trajetórias clássicas podem ser obtidas resolvendo-se as equações de movimento de Newton:

$$m_i \ddot{\vec{r_i}} = -\vec{\nabla}_i U_i \tag{1}$$

onde m_i representa a massa da partícula i e $\ddot{\vec{r_i}}$ a derivada segunda com relação ao tempo e i varia de 1 até N.

Para resolver um conjunto de equações diferenciais de segunda ordem numericamente, tal como 1,), é necessário especificar posições e velocidades iniciais de todas as partículas, e usar o algoritmo conveniente para integrar essas equações e obter as trajetórias de todas as partículas para os tempos subseqüentes. A precisão dos álculos das trajetórias pode ser avaliada conferindo-se a conservação da energia total,

$$\frac{1}{2}\sum_i m_i v_i^2 = \frac{n}{2} N k_B T.$$

onde n denota a dimensão do sistema, k_B é a constante de Boltzmam e T é a temperatura absoluta.

---

* Bolsisita. savin@fisica.grad.ufg.br
† Orientador. ladir@if.ufg.br

III. RESULTADOS E DISCUSSÕES

As tabelas seguintes mostram resultados para energia do estado fundamental, para várias moléculas simétricas, no limite de $d \to 0$, com N (número de partículas) variando de 2 até 10 (primeira coluna das tabelas), a segunda coluna das tabelas, mostra que os elétrons do sistema estão distribuídos em camadas, onde N_1, N_2... são o número de partículas na primeira camada, segunda camada e assim sucessivamente, com a distância inter-élétron tanto dependendo do raio qunato do número total de elétron do aglomerado, em pleno acordo com os resultados da literatura.

A. Potencial de Interação Coulombiano Blindado

Na Tab.I, abaixo temos a energia e a configuração do estado fundamental para vários sistemas $N = 2$ a 10. Observamos que com o aumento do número de elétrons no átomo, a energia do estado fundamental aumenta de 0.75 para $N = 2$ a 4.48495 para $N = 10$. Tais resultados estão de acordo a literatura para interação coulombiana($\frac{1}{r}$).

N	N_1,N_2...	E/N
2	$0, 2$	0.75000
4	$0, 4$	1.83545
6	$1, 5$	2.80456
8	$1, 7$	3.66890
10	$2, 8$	4.48495

Tabela I: Energia e configuração, do estado fundamental de um sistema constituído de $N = 2$ a 10 elétrons com confinamento parabólico. N é o número de partículas, N_1, N_2... é a distribuição de elétrons na camada, e E/N são os nossos resultados.para a energia total por partícula.

B. Potencial de Interação $\frac{1}{r^2}$

Na Tab.II, abaixo temos a energia e a configuração do estado fundamental para vários sistemas $N = 2$ a 10. Observamos que com o aumento do número de elétrons no átomo, a energia do estado fundamental aumenta de 0.707106 para $N = 2$ à 3.664425 para $N = 10$. Tais resultados estão de acordo a literatura para interação ($\frac{1}{r^2}$).

N	N_1,N_2...	E/N
2	$0, 2$	0.707106
4	$0, 4$	1.58114
6	$1, 5$	2.35702
8	$1, 7$	3.03109
10	$3, 7$	3.66425

Tabela II: Energia e configuração, do estado fundamental de um sistema constituído de $N = 2$ a 10 elétrons com confinamento parabólico. N é o número de partículas, N_1, N_2... é a distribuição de elétrons na camada, e E/N são os nossos resultados.para a energia total por partícula.

C. Potencial de Interação $\frac{1}{r^3}$

Na Tab.III, abaixo temos a energia e a configuração do estado fundamental para vários sistemas $N = 2$ a 10. Observamos que com o aumento do número de elétrons no átomo, a energia do estado fundamental aumenta de 0.64602 para $N = 2$ à 3.19011 para $N = 10$. Tais resultados estão de acordo a literatura para interação ($\frac{1}{r^3}$).

N	N_1,N_2...	E/N
2	$0, 2$	0.64602
4	$0, 4$	1.38021
6	$1, 5$	2.04829
8	$1, 7$	2.63542
10	$3, 7$	3.19011

Tabela III: Energia e configuração, do estado fundamental de um sistema constituído de $N = 2$ a 10 elétrons com confinamento parabólico. N é o número de partículas, N_1, N_2... é a distribuição de elétrons na camada, e E/N são os nossos resultados.para a energia total por partícula.

IV. CONCLUSÃO

Um de nossos principais objetivos foi verificar o comportamento da energia, e as configurações dos estados fundamentais para diferentes valores do número de partículas m cada átomo. Comparamos a energia e a configuração de estado fundamental Tab.1(Interwação Coulombiano) com as demais tabelas, com interação variando de r^2 a r^3. Notamos que em relação a Tab.2 ($1/r^2$), apenas a configuração para dez elétrons altera, de $[2, 8]$ para $[3, 7]$, e comparando a energia do estado fundamental dos respectivos números de elétrons, notamos diferentes valores de energia. Já na Tab.3 ($1/r^3$), quando comparado com a Tab.1, observamos também que a única coniguração de estado q se altera é a de 10 elétrons e comparando a energia de estado fundamental para diferentes interações, verificamos também, diferentes valores de energia quando comparado a seus respectivos números de elétrons. Analizando a Tab.2, em comparação a Tab.3, notamos que houve uma igualdade em relação a configuração, e em relação as energias, observamos uma redução nos valores da energia. Todas as diferenças notadas devido às comparações, estão relacionadas aos diferentes potenciais de interação. As energias e configurações obtidas estão em pleno acordo com os valores da literatura, Ref[3]. Os resultados para o potencial de interação logaritima não foram explorados, pois ainda estão sendo implementados. Em resumo dos estudos realizados podemos verifcar que, a interação entre as partículas constituídas de átomos tem papel fundamental nas propriedades estruturais da molécula alterando suas configurações e energia. Uma análise mais detalhada com respeito ao comportamento seguido pelo energia do estado fundamental em função da interação elétron-elétron e em função da distância entre átomos neste sistema, estarão sendo realizados em trabalhos seguintes.

[1] A. Brito, B. G. Monografia (UFG 2006).
[2] de Carvalho.,T. M. Monografia (UFG 2007).
[3] S. S. de Moraes, D. Coimbra, J. R. de Souza, and H. O. da Frota, Brazilian Journal of Physics, vol.34, no. 2A, June, 2004.
[4] Toschek, P. E. in New Trends in Atomic Physics, Houches, Session 38, edited by G. Grynberg and R. A. Stora. (North-Holland, Amsterdam, 1984), vol.1, p.383.
[5] Bolton, F. e Rossler, U. Superlatt. Microstruct. Vol. 13, pág. 139 (1993).
[6] Benadov, V. M. e Peeters, F. M. Phys.Rev. B, Vol. 49, pág. 2667 (1994).

SILVA,S. S. GARCIA, R.A. Dinâmica e equações Diferenciais da Geometria Diferencial. In: CONGRESSO DE PESQUISA, ENSINO E EXTENSÃO DA UFG - CONPEEX, 4., 2007, Goiânia. Anais eletrônicos do XV Seminário de Iniciação Científica [CD-ROM], Goiânia: UFG, 2007. n.p.

Geometria dos Polinômios e Probabilidade

SILVA, Sunamita Souza[1]; **Garcia**, Ronaldo Alves[2]

Palavras-chaves: Geometria ,Probabilidade,Polinômios.

1. INTRODUÇÃO

Nesta pesquisa tivemos como motivação rolar uma curva fechada ao longo de uma linha e seguir o caminho traçado por algum ponto escolhido. Num caso simples, conhecemos a ciclóide traçada por um ponto sobre o círculo rolado.

E quanto ao problema inverso? Dadas curvas γ e β será possível encontrar uma curva α que rolada sobre β gere γ, quando fixado um ponto relativo à α?

Suponhamos que o ponto que gera a curva possa ser tomado dentro ou fora da curva rolada. Além disso, suponhamos que a "linha de rolagem"seja substituída por uma curva e que curvas não-convexas sejam permitidas rolar, isto é, exigindo que o ponto de contato mova-se suavemente sem deslizar e que a linha tangente esteja harmonizada com o ponto de contato. Em todos os casos, resolvemos o problema inverso localmente, em termos da normal à curva.

2. METODOLOGIA

Como literatura básica estamos dando ênfase ao livro *Geometria Diferencial de Curvas e Superfícies*, de autoria de Manfredo Perdigão do Carmo, o qual foi usado pelo aluna no seu curso de graduação dentro da disciplina de Geometria Diferencial. Este livro tem como função explicitar e exemplificar os vários conceitos que foram necessários no decorrer do projeto. Como principal literatura temos o artigo: *The Geometry of the rolling curves* de *J. Bloom e L. Whitt* do*Department of mathematics,Texas A e M University, College Station, TX77843* .Esse artigo foi a base principal do projeto, pois ele agrega o que de principal foi discutido, que é o problema inverso para curvas roladas. Paralelo à esse artigo, temos o artigo: *An Existence and Uniqueness Theorem for Roultetts* publicado por *R. Hynd e J. McCuan* pela *School of Mathematics, Georgia Institut of Technologiy, Atlanta, GA* $30332-0160$, que foi de suma importância para a compreensão do artigo anterior que foi tratado com mais ênfase.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Agora iremos abranger o estudo da teoria das curvas roladas e quais condições são necessárias e quais são suficientes para determinar α que rolada sobre β gere γ, quando fixado um ponto relativo à α. Discutiremos sobre as condições necessárias e suficientes para o problema inverso de curvas roladas.

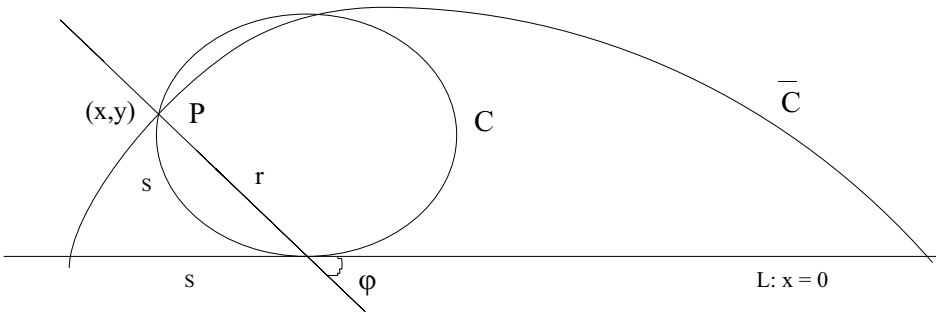
Condição necessária.Começaremos com um caso simples. Seja C que pode ser rolada ao longo de uma linha L; a curvatura de C é positiva exceto possivelmente num conjunto não denso e então, não existem "lados retos". Esta condição garante que o ponto de contato s está bem definido e comporta-se como o parâmetro comprimento de arco em C e L. O ponto $\mathbf{P}$ que traça a curva pode estar localizado dentro, sobre ou fora de C.

SILVA,S. S. GARCIA, R.A. Dinâmica e equações Diferenciais da Geometria Diferencial. In: CONGRESSO DE PESQUISA, ENSINO E EXTENSÃO DA UFG - CONPEEX, 4., 2007, Goiânia. Anais eletrônicos do XV Seminário de Iniciação Científica [CD-ROM], Goiânia: UFG, 2007. n.p.

SILVA,S. S. GARCIA, R.A. Dinâmica e equações Diferenciais da Geometria Diferencial. In: CONGRESSO DE PESQUISA, ENSINO E EXTENSÃO DA UFG - CONPEEX, 4., 2007, Goiânia. Anais eletrônicos do XV Seminário de Iniciação Científica [CD-ROM], Goiânia: UFG, 2007. n.p.

Se **P** é considerado como a origem, então C pode ser descrita por coordenadas (r, θ) . Se φ é o ângulo entre a linha radial de C, então **P** traça a curva de fora $\overline{C}$ dada por :

$$x = s - r\cos\varphi \qquad y = r\sin\varphi \tag{1}$$



▱

Condição 1..A normal à $\overline{C}$ intercepta l em ordem crescente. Esta condição é suficiente para a construção local de C.
Obs: A soma do ângulo $\theta + \varphi$ é o ângulo entre as retas tangentes de C e uma reta fixada. Já que $\frac{d(\theta+\varphi)}{ds}$ é a curvatura de C por definição. A hipótese sobre a curvatura de C é equivalente a $\frac{d(\theta+\varphi)}{ds} \geq 0$.

Condição 2.A função $\frac{1}{y}\frac{dx}{ds}$ é positiva exceto possivelmente sobre um conjunto não denso de $\overline{C}$.
Condição suficiente. Seja $\overline{C}$ uma curva plana que satisfaz a condição (1) e que é periódica com respeito à linha L. Desta maneira , o parâmetro comprimento de arco s sobre L também parametriza $\overline{C}$. A hipótese de diferenciabiliodade sobre $\overline{C}$ é que o comprimento $r(s)$ do vetor normal de $\overline{C}$ a L é suave e $r(s)$ e $\frac{dr}{rds}\tan\varphi$(ou equivalentemente $\frac{1}{y}\frac{dx}{ds} - \frac{d\varphi}{ds}$) tem uma extensão suave sobre todas as singularidades.
Lema 1: *Se L e $\overline{C}$ são como acima, então existe uma curva fechada suave C, não necessariamente simples, e um ponto distinto P que traça algum pedaço finito de $\overline{C}$.*
Teorema 1:*Sejam L e $\overline{C}$ como no Lema 1. Assuma, além disso que $\overline{C}$ satisfaz a condição (2) e*

$$\int_{\overline{C_1}} \frac{1}{y}\, dx = 2\pi \tag{2}$$

SILVA,S. S. GARCIA, R.A. Dinâmica e equações Diferenciais da Geometria Diferencial. In: CONGRESSO DE PESQUISA, ENSINO E EXTENSÃO DA UFG - CONPEEX, 4., 2007, Goiânia. Anais eletrônicos do XV Seminário de Iniciação Científica [CD-ROM], Goiânia: UFG, 2007. n.p.

SILVA,S. S. GARCIA, R.A. Dinâmica e equações Diferenciais da Geometria Diferencial. In: CONGRESSO DE PESQUISA, ENSINO E EXTENSÃO DA UFG - CONPEEX, 4., 2007, Goiânia. Anais eletrônicos do XV Seminário de Iniciação Científica [CD-ROM], Goiânia: UFG, 2007. n.p.

onde $\overline{C_1}$ é um período de $\overline{C}$ relativo à L. Então existe uma única curva convexa fechada suave C e um único ponto distinto P que traça toda $\overline{C}$.

4. CONCLUSÃO

Ao final do trabalho concluímos que foi de suma importância o estudo de como se comportam curvas regulares quaisquer que rolam sobre outras curvas também regulares, sendo observadas as equações geradas a partir do movimento, quando fixamos um ponto relativo à curva deslizada (não havendo restrições sobre onde tomamos o ponto; esse pode estar dentro, fora o sobre a curva rolada). Foram discutidas condições necessária e suficiente para determinar a curva que rolada sobre outra gere uma terceira, quando fixado um ponto relativo à primeira.Tratamos o problema para dimensão n=2, mas esse pode ser estendido para dimensões maiores. A disciplina Geometria Diferencial, auxiliou a aluna no entendimento dos problemas estudados. Também foi observado que a matemática não pode ser considerada como tendo partes isoladas, pois todas as suas ramificações são interligadas, sendo assim, impossível estudá-la isoladamente.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

J.Bloom, L.Whitt,*The geometry of rolling curve*, American Mathematical Monthly, volume 88, number 6, 1981, 420-426.

R. Hynd, J. McCuan , *An existence and uniqueness theorem for roulettes*, School of Mathematics, Georgia Institute of Technology Atlanta.

J.Sotomayor,*Lições de Equações Diferenciais Ordinárias*, Projeto Euclides, IMPA,(1979).

Do Carmo, M.P.,*Geometria Diferencial de Curvas e Superfícies.* Textos universitários, SBM, 2005.

Lima, E.L. ,*Espaços Métricos*, Projeto Euclides, Rio de

J.Maeda,*Diferential Moebius geometry of plane curves.* Jap.J.Math.18, 67-260.(1942).

J.Sotomayor,*Lições de Equações Diferenciais Ordinárias*, Projeto Euclides, IMPA,(1979).

[1] Bolsista de Iniciação Científica. Instituto de Matemática e Estatística, sunami_@hotmail.com
[2] Orientador Instituto de Matemática e Estatística, ragarcia@mat.ufg.br

SOLUÇÕES TIPO SÓLITONS PARA EQUAÇÕES DE EVOLUÇÃO

SILVA, Tarcísio Castro[1]; MELO, Maurílio Márcio[2].

Palavras-chave: Equações diferenciais parciais, leis de conservação, soluções tipo sólitons .

1. INTRODUÇÃO

Nosso principal objetivo era estudar um tipo especial de solução para alguns modelos de equações da Física-Matemática. Tais soluções são denominadas de *ondas viajantes* ou *ondas do tipo sóliton*.

Apresentamos duas técnicas devido a Peter D. Lax [6,7]. A primeira refere-se ao processo de existência de leis de conservação F_n, $n \in \mathbb{N}$, para a equação KdV, onde usa-se a seguinte fórmula de recursão para os gradientes G_n dos respectivos funcionais F_n,

$$HG_n = \partial G_{n+1}, \tag{1}$$

onde $\partial = \dfrac{\partial}{\partial x}$ e $H = \partial^3 + \dfrac{2}{3}u\partial + \dfrac{1}{3}u_x$.

A fórmula acima é devida a Andrew Lenart, primeiramente estudada em [6] por Lax. Exibindo os gradientes $G_{n's}$ é possível encontrar os F_n correspondentes. A segunda mostra a evolução de uma solução tipo 2-sólitons no decorrer do tempo para a equação KdV.

2. METODOLOGIA

Estudamos os tópicos propostos e apresentamos em seminários semanais, sob a coordenação do orientador.

3. RESULTADOS E DISCUSSÕES

3.1 Leis de Consevação para a Equação KdV

Consideremos a equação

$$u_t + uu_x + u_{xxx} = 0. \tag{2}$$

Investigamos a existência de leis de conservação na forma polinomial para a eq. (2), i. é, do tipo

$$F_n(u) = \int_{\mathbb{R}} f_n(u(x,t))dx, \ n \in \mathbb{N},$$

onde f_n é um polinômio em u e suas derivadas e $F_n(u)$ mantém-se invariante quando u varia de acordo com a eq. (2), i. é, $F_n(u)$ é independente de t para toda solução da eq. (2).

Em [6], Lax apresenta uma prova da existência destes funcionais F_n baseado na expressão dada em (1).

[1]Bolsista de iniciação científica. Instituto de Matemática e Estatística, matciso@yahoo.com.br
[2]Orientador. Instituto de Matemática e Estatística, melo@mat.ufg.br

Afirmamos que, se os gradientes G_n de F_n satisfazem a relação (1), então os F_n são leis de conservação para a eq. (2). Mais geralmente, os F_n são leis de conservação para a equação

$$u_t = \partial G_n(u).$$

A demonstração resume-se na seguinte igualdade

$$\langle G_m(u), \partial G_n(u) \rangle = 0, \ \forall \ m, \, n \in \mathbb{N},$$

pois se $u_t = \partial G_n(u)$, então $\dfrac{dF_m(u)}{dt} = \langle G_m(u), \partial G_n(u) \rangle$, assim $\dfrac{dF_m(u)}{dt} = 0$ quando $\langle G_m(u), \partial G_n(u) \rangle = 0$.

3.2 Interação de Ondas do Tipo 2-Sólitons

Fizemos uso do seguinte resultado, cuja demonstração pode ser encontrada em [7].

Teorema-1. *Para quaisquer par de constantes positivas c_1 e c_2, existe uma onda dupla, i. é, uma solução $d(x,t)$ da equação KdV tal que*

$$d(x,t) = s(x - c_1 t - \theta_1; c_1) + s(x - c_2 t - \theta_2; c_2) + r(t).$$

Considerando os funcionais G_1, G_2 e G_3, gradientes das respectivas leis de conservação F_1, F_2 e F_3 conforme [4,5,6], fizemos uma análise da variação do ponto de máximo da onda dupla dada pelo teorema acima e cuja representação geométrica é dada abaixo.

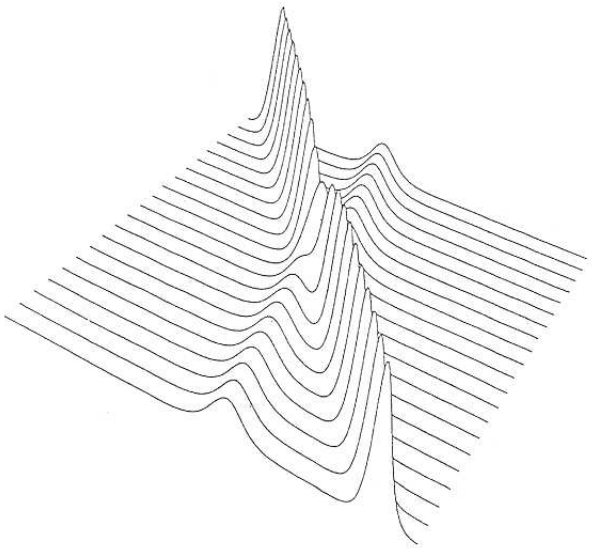


Figura 1: colisão de dois sólitons.

Concluímos que o processo de interação dos dois sólitons ocorre da seguinte forma: no momento em que a onda maior aproxima-se da onda menor, a amplitude da onda menor aumenta, enquanto a amplitude da onda maior diminui, não havendo assim uma diferença substancial entre os pontos de máximos das duas ondas. A absorção da onda

menor pela maior ocasiona um pico secundário sobre a onda maior, proporcionando um leve decrescimento e remite em seguida.

4. CONCLUSÃO

A idéia principal do trabalho era estudar um tipo especial de solução para uma classe de equações diferenciais parciais.

Os sólitons, tem sua fundamental importância na área das ciências tais como: meteorologia, física do estado sólido e várias outras. Em comunicação por grandes distâncias através de fibras óticas, utilizam-se os já padronizados sinais lineares no formato retangular e, também, em escala experimental, os sinais no formato sóliton. E devido à estabilidade de tais ondas, em meados dos anos oitenta foi proposto que sólitons pudessem ser utilizados em comunicações transoceânicas, e a partir de então, vários desenvolvimentos tecnológicos foram realizados na propagação de ondas do tipo sóliton (ver [3]).

No nosso trabalho encontramos algumas leis de conservação para a equação KdV e vimos como evolui uma solução tipo 2-sólitons no decorrer do tempo para a equação KdV. Observamos também a importância dos sólitons no estudo de certos problemas de Cauchy, mostrando a não unicidade de solução quando estudados em determinados espaços (ver [8]).

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] KICHENASSAMY, S., OLVER, P. J. *Existence and Nonexistence of Solitary Wave Solutions to Higher-Order Model Evolution Equations*; vol. 23, n^0 5, Sptember 1992, pp 1141-1155.

[2] MIURA, R. M. *The Korteweg-de Vries Equation: A Survey of Results*; May 5, 1975, pp 412-424.

[3] GALLÉAS, W., et. al. *Ondas do Tipo Sóliton em Guias Dielétricos*; Revista Brasileira de Ensino de Física, vol. 25, n° 3, Setembro, 2003, pp 294-304 ($www.sbfisica.org.br/rbef/Vol25/Num3/V25-294.pdf$).

[4] DRAZIN, P. G., JOHNSON, R. S. *Solitons: an Introduction*; Cambridge University Press, 1990, 226 p.

[5] MIURA, R. M. *Korteweg-de Vries Equation and Generalizations. I. A Remarkable Explicit Nonlinear Transformation*; Journal of Mathematical Physics, vol. 9, n^0 8, August 1968, pp 1202-1209.

[6] LAX, Peter D. *Almost Periodic Solutions of the KdV Equation*; Siam Review, vol. 18, n^0 3, July 1976, pp 351-361.

[7] LAX, Peter D. *Integrals of Nonlinear Equation of Evolution and Solitary Waves*; Comunications on Pure and Applied Mathematics, vol. XXI, 1968, pp 467-490.

[8] BIAGIONI, H. A., OBERGUGGENBERGER, M. *Generalized solutions to the Korteweg-de Vries and the regularized long-wave equations*; SIAM J. Math. Anal. 23 (1992), pp 923-940.

LIMA, T. A. GARCIA, R.A. Teoria das Equações Diferenciais da Geometria. In: CONGRESSO DE PESQUISA, ENSINO E EXTENSÃO DA UFG - CONPEEX, 4., 2007, Goiânia. Anais eletrônicos do XV Seminário de Iniciação Científica [CD-ROM], Goiânia: UFG, 2007. n.p.

Teoria das Equações Diferenciais da Geometria

LIMA, Thaynara Arielly[1]; **GARCIA**, Ronaldo Alves[2]

Palavras-chaves: Curvas de Bicicleta,Curvas roladas, Parametrização

1. INTRODUÇÃO

Inicialmente, discutiremos sobre curvas de bicicleta. Essas curvas tem uma característica interessante: uma curva Γ é dita de bicicleta se um par de pontos x e y podem atravessar Γ de maneira que a distância entre x e y seja constante ao percorrer a curva no plano. Falaremos sobre a parametrização dessas curvas e sua curvatura.

Posteriormente, trataremos de "curvas roladas". Tivemos como motivação, para estudar esse assunto, rolar uma curva fechada ao longo de uma linha e seguir o caminho traçado por algum ponto escolhido. Num caso simples, conhecemos a ciclóide traçada por um ponto sobre o círculo rolado.

E quanto ao problema inverso? Dadas curvas γ e β será possível encontrar uma curva α que rolada sobre β gere γ, quando fixado um ponto relativo à α?

Suponhamos que o ponto que gera a curva possa ser tomado dentro ou fora da curva rolada. Além disso, suponhamos que a "linha de rolagem"seja substituída por uma curva e que curvas não-convexas sejam permitidas rolar, isto é, exigindo que o ponto de contato mova-se suavemente sem deslizar e que a linha tangente esteja harmonizada com o ponto de contato. Em todos os casos, resolvemos o problema inverso localmente, em termos da normal à curva.

2. METODOLOGIA

A abordagem do assunto foi feita através de estudo dos conceitos básicos de curvas e suas propriedades, utilização de artigos matemáticos e por meio de pesquisa bibliográfica, bem como realização de seminários com outros alunos de iniciação científica que estudavam assuntos semelhantes.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Uma curva Γ é dita de bicicleta se um par de pontos x e y podem atravessar Γ de maneira que a distância entre x e y seja constante ao percorrer a curva no plano.

A bicicleta é representada por um segmento de comprimento fixo L, cujos pontos fixos são pontos de tangência das rodas traseiras e dianteiras com o chão. No processo de movimento os pontos finais atravessam as curvas planas e o segmento fica tangente à trajetória desses pontos finais posteriores.

Se denotarmos por $\gamma(t), \Gamma(t)$ e $T(t)$ as trajetórias das rodas traseira, dianteira e o vetor tangente unitário à curva γ, respectivamente, temos que:

$$\Gamma(t) = \gamma(t) + LT(t)$$

Um par de curvas γ e Γ é chamado ambíguo se essas podem cumpri as trajetórias das rodas traseira e dianteira da bicicleta quando atravessam em direções opostas. Assim não se pode determinar o caminho que a bicicleta fez.

Se (γ, Γ) são pares ambíguos e um segmento de comprimento $2L$ é tangente à γ em seu ponto médio então ambos os pontos finais do segmento estão sobre Γ.

Como exemplo de curvas ambíguas temo um par de círculos concêntricos cujos raios r

e R satisfazem $R^2 - r^2 = L^2$. Considere duas curvas suaves γ e Γ relatadas como anteriormente. Sejam t e x os parâmetros comprimento de arco de γ e Γ, respectivamente. A correspondência entre as duas curvas é dada por

$$\Gamma(x(t)) = \gamma(t) + L\gamma_t(t) \tag{1}$$

Sejam K_γ e K_Γ as curvaturas de γ e Γ. Denotemos por $\alpha(t)$ o ângulo entre os vetores tangentes às curvas nos respectivos pontos $\gamma(t)$ e $\Gamma(x(t))$.
Tem-se:

$$\frac{-\pi}{2} < \alpha(t) < \frac{\pi}{2}, \qquad \frac{dx}{dt} = \frac{1}{cos\alpha}, \qquad K_\gamma = \frac{tg\alpha}{L} \tag{2}$$

e

$$K_\Gamma = \frac{sen\alpha}{L} + \frac{d\alpha}{dx}$$

Segue do resultado acima que

$$0 < comprimento\Gamma - comprimento\gamma < L\int |K_\gamma| dt$$

Basta observarmos que

$$0 \leq \sqrt{1 + L^2 K_\gamma^2} - 1 \leq L|K_\gamma|$$

Se $|K_\gamma| > 0$ em um aberto, as desigualdades são estritas.

Definamos agora o raio do comprimento do arco xy pelo comprimento de Γ como sendo o número de rotação de uma curva de bicicleta. Este é denotado por ρ. Sempre assumiremos que o comprimento de uma curva de bicicleta é 2π.

Seja $\Gamma(x)$ uma curva convexa suave de bicicleta com número de rotação ρ e seja a corda de comprimento $2L$, parametrizada pelo comprimento de arco. Chamemos $\omega = \pi\rho$. Então o comprimento do arco de Γ subtendido por cada corda de comprimento $2L$ é igual a 2ω.
Como antes, seja $\alpha(x)$ o ângulo entre o segmento $\Gamma(x)\Gamma(x + 2\omega)$ e a curva Γ nos pontos $\Gamma(x)$ e $\Gamma(x + 2\omega)$.

Teorema: *Para todo $x \in [0, 2\pi]$ temos*

$$sen\alpha(x + \omega) - sen\alpha(x - \omega) = L(\alpha'(x + \omega) + \alpha'(x - \omega))$$

Consideremos agora o problema de curvas roladas. Seja C que pode ser rolada ao longo de uma linha L; a curvatura de C é positiva exceto possivelmente num conjunto não denso e então, não existem "lados retos". Esta condição garante que o ponto de contato s está bem definido e comporta-se como o parâmetro comprimento de arco em C e L. O ponto **P** que traça a curva pode estar localizado dentro, sobre ou fora de C.
Se **P** é considerado como a origem, então C pode ser descrita por coordenadas (r, θ) .
Se φ é o ângulo entre a linha radial de C, então **P** traça a curva de fora $\overline{C}$ dada por :

$$x = s - r\cos\varphi \qquad y = r\sin\varphi \tag{3}$$

Discutiremos condições necessárias e suficientes para encontrarmos tal curva C a partir de $\overline{C}$. Comentaremos ainda como é possível encontrar a equação de uma curva fechada suave qualquer rolando sobre outra curva suave.

Exemplo (*Ciclóide*): O conjunto dos pontos

$$P = (x, y) = (Rt - Rsent, R - Rcost), t \in \mathbb{R}$$

representa a trajetória de um ponto pertencente a um círculo de raio R posto a girar, sem deslizar, ao longo de uma reta situada num plano horizontal; por esta razão esta curva é chamada de ciclóide.

Observemos que $\overline{AA'} = \widehat{A'P} = Rt$ e que

$$x = \overline{AA'} - PQ = Rt - Rsent$$

e

$$y = A'C' - QC' = R - Rcost$$

4. CONCLUSÃO

Ao final do trabalho concluímos que foi de grande valia o estudo de como se comportam curvas regulares: sendo essas curvas de bicicleta e outras curvas quaisquer que rolam sobre outras curvas também regulares, sendo observadas as equações geradas a partir desses movimentos. Quanto às curvas de bicicleta discutimos ,ainda, aspectos da curvatura e orientação dessas. No caso de curvas roladas, olhamos para a equação quando fixamos um ponto relativo à curva deslizada (não havendo restrições sobre onde tomamos o ponto; esse pode estar dentro, fora o sobre a curva rolada). Foram salientadas condições necessária e suficiente para determinar a curva que rolada sobre outra gere uma terceira, quando fixado um ponto relativo à primeira.Tratamos o problema para dimensão n=2, mas esse pode ser estendido para dimensões maiores.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1.TABACHNIKOV, S., **Tire track geometry: variations on a theme**, Penn State University, Preprint, 2004.

2.HYND,R.,McCUAN, J., **An Existence and Uniquess Theorem for Roullets**, School of Mathematics,Georgia Institut of Technology, Atlanta.

3. BLOOM,J., WHITT, L., **The Geometry of the Rolling Curves**,Department of Mathematics, Texas.

---

[1] Bolsista de Iniciação Científica. Instituto de Matemática e Estatística, thatamat@hotmail.com

[2] Orientador Instituto de Matemática e Estatística, ragarcia@mat.ufg.br

MECÂNICA QUÂNTICA NO ESPAÇO DE FASE: FUNÇÃO DE HUSIME

PRADO, Thiago Freitas e DANTAS, Célia M. A.
Instituto de Física - UFG

Palavras Chave: Espaço de Fase, Função de Husime

1 Introdução

Funções que guardam certa semelhança com as funções de distribuição no espaço de fase, as chamadas funções de "quasiprobabilidade", são de grande utilidade no estudo de sistemas quânticos $[1-3]$. Elas são usualmente não somente ferramentas de cálculos, mas podem também produzir avanços na conecção entre a mecânica clássica e a mecânica quântica.

Entre as distribuições no espaço de fase, podemos citar a Função de Wigner [1], a Função de Husime [2] e a Função P de Glauber [3], estando estas relacionadas com a ordem de atuação dos operadores de aniquilação $(\widehat{a})$ e criação $(\widehat{a}^{+})$, ou seja, as ordens normal, antinormal e simétrico, respectivamente. Neste trabalho utilizamos especificamente a Função de Husime [2], para investigarmos as propriedades estatísticas dos estados do campo eletromagnético.

2 Objetivo

Neste trabalho, estamos investigando a distribuição de Husime para vários estados do campo eletromagnético, como o estado de número, o estado coerente, o estado de número deslocado e o estado coerente comprimido.

A distribuição de Husime $Q(\beta)$ para um estado quântico genérico $|\Psi\rangle$ é dada por

$$Q(\beta) = \frac{1}{\pi} \left|\langle\beta|\,\Psi\rangle\right|^2 \ . \tag{1}$$

que representa o módulo ao quadrado da projeção deste estado, em uma base de estados coerentes $|\beta\rangle$.

3 Metodologia

Nosso principal objetivo é investigar o problema relacionado a Mecânica Quântica no espaço de fase, via Função de Husime, definida pela Eq.(1). Investigamos as pecularidades para cada um dos estados da luz, calculando analiticamente a função, simulando-a computacionalmente e analisando os resultados através de gráficos.

4 Resultados e Discussão

Como sabemos, o Princípio da Incerteza de Heisenberg torna problemático o conceito de espaço de fase, quando lidamos com a mecânica quântica. Isto ocorre porque uma partícula não pode ter sua posição q e momentum p bem definidos simultaneamente.

No entanto, funções que possuem algumas semelhanças com as funções clássicas de distribuição no espaço de fase, chamadas "funções de distribuição de quasiprobabilidade" vêm demonstrando ser muito úteis no estudo de sistemas quânticos. São úteis não apenas como ferramentas para cálculo de médias estatísticas, mas também fornecem-nos informações relacionadas a conexão entre a mecânica clássica e a mecânica quântica. Estas distribuições permitem-nos expressar médias quânticas num formalismo semelhante ao cálculo de médias clássicas.

A Eq.(1) nos dá a Função de Husime no espaço de fase $\beta(\beta_x, \beta_y)$, relacionadas à posição e o momento, respectivamente, para um estado genérico $|\Psi\rangle$. Ela pode ser escrita em termos dos seus coeficientes da representação de número $C_m^{|\Psi\rangle}$ e dos coeficientes $C_m^{|\beta\rangle}$ do estado coerente $|\beta\rangle$.

De fato, se escrevermos $|\Psi\rangle$ e $\langle\beta|$ numa base de estados de número $|m\rangle$, obtemos

$$|\Psi\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} C_m^{|\Psi\rangle} \ |m\rangle \tag{2}$$

$$\langle\beta| = \sum_{m'=0}^{\infty} \left\langle m' \right| C_m^{*|\beta\rangle} \quad . \tag{3}$$

Substituindo as Eq.(2) e (3) na Eq.(1), obtemos

$$Q(\beta) = \frac{1}{\pi} \left| \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{m'=0}^{\infty} C_m^{|\Psi\rangle} \cdot C_{m'}^{*|\beta\rangle} \left\langle m' \mid m \right\rangle \right|^2 \tag{4}$$

.Utilizando a relação de ortogonalidade dos estados de número, a qual é dada por $\left\langle m' \mid m \right\rangle = \delta_{m,m'}$,obtemos

$$Q(\beta) = \frac{1}{\pi} \left| \sum_{m=0}^{\infty} C_m^{|\Psi\rangle} \cdot C_m^{*|\beta\rangle} \right| \quad . \tag{5}$$

Nosso objetivo, é investigar $Q(\beta)$ dada pela Eq.(5) para o estado de número deslocado, cujos coeficientes $C_m^{|n,\alpha\rangle}$ já são conhecidos.

4.1 Função de Husime do Estado de Número Deslocado

O Estado de Número Deslocado $|n, \alpha\rangle$ é definido da seguinte forma [4]

$$|n, \alpha\rangle = \widehat{D}(\alpha) \, |n\rangle \, , \tag{6}$$

onde $\widehat{D}(\alpha)$ é o operador de deslocamento de Glauber.

A Função de Husime do Estado de Número Deslocado é dada por

$$Q(\beta) = \frac{1}{\pi n!} e^{-|\beta-\alpha|^2} \left|\alpha - \beta\right|^{2n} \quad . \tag{7}$$

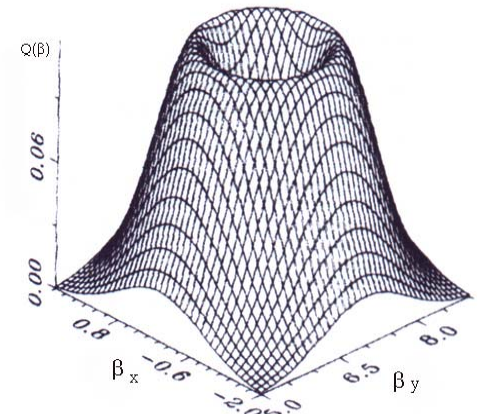


Figure 1: Função de Husime do Estado de Número Deslocado, com número inicial de fótons $n = 1$ e parâmetro de deslocamento $\alpha = 7$.

Na Fig.(1) mostramos a função de Husime do estado de número deslocado. O buraco na figura representa uma característica específica do estado de número deslocado, não presente no estado de número devido aos efeitos de interferência no espaço de fase.

5 Conclusão

Neste trabalho, estudamos o formalismo de uma das funções de distribuição no espaço de fase, a Função de Husime $Q(\beta)$, a fim de estudarmos a partir dela, as propriedades estatísticas dos estados do campo eletromagnético.

Conforme pudemos observar através da análise da Função de Husime, os diferentes estados do campo eletromagnético possuem propriedades estatísticas completamente diferentes.

Alguns estados apresentam o efeito de interferência no espaço de fase (como o Estado de Número Deslocado), que é uma assinatura da natureza quântica deste estado, sendo uma prova da natureza granular, ou discreta da radiação.

References

[1] E. P. Wigner, *Phys. Rev.* **40,** 749(1932).

[2] K. Husimi, Proc, Phys. Math. Soc. Jpn **22,** 264(1940).

[3] R. J. Glauber, Phys. Rev. **131**, 2766(1963)

[4] F. A. M. de Oliveira, M. S. Kim e P. L. Knight, *Phys. Rev.* **A41,** 2645(1990).

Corrente de Tunelamento Numa Tripla Barreira Magnética Digital

MENDES, U. C*; SOUZA, M. A. R†; LEÃO, S. A.‡
Instituto de Física-UFG

Palavras-Chaves: Densidade de Corrente, Spin-Polarizada, Semicondutor Magnético Diluído

I. INTRODUÇÃO

Nas últimas décadas houve um crescente interesse nos semicondutores magnéticos diluídos (DMS) como ZnCdSe, ZnMnSe, CdMnSe, CdMnTe e outros, eles tem atraído considerável interesse da comunidade científica, pois com estes materiais surgiu a "spintrônica", uma nova maneira na qual a informação pode ser transmitida. Na "spintrônica" é o spin do elétron (em vez da carga do elétron, ou em adição a carga do elétron) o novo elemento ativo (portador) no processamento e na transmissão da informação. Deste fato, surgiram inúmeras idéias para novos dispositivos, tais como transistores de spin, dispositivos de memória com spin, e até mesmo computadores quânticos de spin. Essencialmente para obtermos dispositivos com estas características precisamos de uma maneira eficiente de injetar uma corrente spin-polarizada dentro de um semicondutor, de tal modo, que a defasagem do spin durante o transporte seja negligenciável. Nestes novos dispositivos de DMS além de podermos manipular os portadores através da aplicação de uma voltagem de gate, pode-se manipular o comportamento eletrônico através de um campo magnético aplicado.

Um tópico de grande interesse nesses sistemas é o transporte spin-polarizado. Este fenômeno também está associado com a busca por fontes efetivas de corrente spin-polarizada, a qual pode ser controlada por um campo magnético **B** e uma voltagem (V_a). Nos DMS a corrente spin-polarizada deve-se a interação de troca sp-d entre os elétrons de condução e os momentos magnéticos dos íons de Mn^{2+}, que são incorporados na heteroestrutura em substituição aos elementos do grupo VI-B da tabela periódica. Aplicando-se um campo magnético a heteroestrutura há uma separação Zeeman gigante dos níveis de energia dos elétrons, devido a essa interação. Como resultado, os elétrons com spins orientados na mesma direção do campo magnético **B** (spin up) ou no sentido oposto (spin down) sentem diferentes potenciais, logo têm diferentes coeficientes de transmissão através da heteroestrutura. Portanto, temos um filtro de spins na corrente de elétrons que ocorre quando temos um campo magnético moderado, e os elétrons com spin up ou down dominam a corrente. A idéia de filtro de spins usando DMS foi proposta por Egues[1] e obtida experimentalmente por Fiederling et. al.[2].

Neste trabalho nos estudamos, as características de corrente e voltagem em uma tripla barreira magnética digital, sendo que o conceito de crescimento digital foi introduzido por Crooker et al, em 1995[3], esta técnica só é possível devido alto grau de desenvolvimento das técnicas de crescimento com *Molecular Beam Epitaxy* (MBE) que tornaram possível o crescimento de camadas semicondutoras ultrafinas, com interfaces bastante abruptas, sobre as quais tem-se um controle da ordem de uma monocamada atômica. Com isso os efeitos de spin sobre as propriedades estáticas e dinâmicas dos (DMS) são bem evidênciados[4]. Nós apresentamos novos resultados sobre o efeito de filtros de spin numa heteroestrutura magnética digital constituída por uma tripla barreira de acordo a seqüência: sobre uma camada de CdTe é crescida uma barreira de $Cd_{0,8}Mg_{0.20}Te$ de largura L_b em seguida é crescida 70 monocamadas (MC) de $Cd_{0,75}Mn_{0.25}Te/CdTe$ e por fim uma barreira de $Cd_{0,8}Mg_{0.20}Te$ de largura L_b, sendo que as monocamadas magnéticas são diluidas no poço de forma equispaçada (3×1 MC) e assim sucessivamente $6 \times \frac{1}{2}$, $9 \times \frac{1}{3}$, $12 \times \frac{1}{4}$, $15 \times \frac{1}{5}$ e $18 \times \frac{1}{6}$, isso é feito mantendo a concentração de Mn constante no poço.

II. MODELO TEÓRICO

O campo magnético B e o potencial V_a são aplicados ao longo da direção de crescimento z, consideramos somente os efeitos devido a banda de condução. Portanto, a hamiltoniana que descreve os elétrons de condução nesse sistema pode ser escrita como

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) - eV_a z/L + V_{\sigma_z}, \tag{1}$$

* Bolsisita. ucm22@yahoo.com.br
† Coorientador. marcio@if.ufg.br
‡ Orientador. salviano@if.ufg.br

sendo m^* a massa efetiva do elétron que é considerada a mesma através da heteroestrutura, $V(z) = \Delta E_c(z)$ é o potencial da heteroestrutura, e $\Delta E_c(z)$ é a diferença de potencial das bandas de condução entre o $CdTe/Cd_{0,8}Mg_{0,2}Te$ e $Cd_{0,8}Mg_{0,2}Te/Cd_{0,75}Mn_{0,25}Te$. V_{σ_z} é o potencial dependente do spin, que é introduzido devido a separação Zeeman gigante nos íons magnéticos de Mn^{+2}. Considera-se a aproximação de campo médio, tal que o potencial dependente de spin pode ser escrito como $V_{\sigma_z} = -N_0\alpha\sigma_z x_{ef}\langle S_z\rangle$. Nesta equação, $N_0\alpha$ é a constante eletrônica de troca sp-d, σ_z representa a componente de spin do elétron ($\pm$ 1/2 ou $\uparrow, \downarrow$) , $x_{ef} = x_p(x_p - 1)^4$ é a concentração efetiva de Mn usada para representar os pares antiferro-magnéticos, $x_p = x/Nbi$ sendo que x é a concentração real de Mn na amostra e Nbi o número de barreiras na região do poço quântico, e $\langle S_z\rangle$ é a média termica das componentes de spin ao longo do campo magnético, que pode ser descrito pela função de Brillouin $SB_S(Sg_{Mn}\mu_B B/k_B T)$.

Como não há espalhamento de elétrons o movimento no plano xy é livre, neste plano o movimento é quantizado em níveis de Landau com energias $E_n = \hbar w_c(n + 1/2)$, sendo $n = 0, 1, 2, \ldots$ e $w_c = eB/m^*$ a frequência ciclotrônica. Ao longo do eixo z o movimento dos elétrons é descrito pelo coeficiente de transmissão dependente de spin $T_{\sigma_z}(E_z, B, V_a)$, sendo $E_z = \hbar^2 k_z^2/2m^*$ a energia de um elétron viajando com vetor de onda k_z. Obtemos o coeficiente de transmissão pelo método da matriz transferência.

A densidade corrente é calculada do emissor para o coletor, como o produto da carga e pela probabilidade de corrente, somada sobre todos os estados ocupados no emissor que se movem em direção ao coletor:

$$J_{\sigma_z} = \frac{e^2 B}{4\pi^2\hbar^2}\int_0^\infty T_{\sigma_z}(E_z, B, V_a)[F(E_{n,k_z,V_{\sigma_z}}) - F(E_{n,k_z,V_{\sigma_z}} + eV_a)]dz, \tag{2}$$

na qual $E_{n,k_z,V_{\sigma_z}} = \hbar w_c(n + 1/2) + (\hbar^2 k_z^2/2m^*) + V_{\sigma_z}$ a energia total do sistema e $F(E_{n,k_z,V_{\sigma_z}})$ a função distribuição de Fermi-Dirac. A densidade de corrente total é $J = J_\uparrow + J_\downarrow$.

III. RESULTADOS E DISCUSSÕES

A corrente de tunelamento é obtida facilmente via integração numérica da eq. (2), para todos os resultados apresentados abaixo consideramos energia de Fermi igual 5 meV, temperatura $T = 4$ K, $N_0\alpha = 220$ meV, $m^* = 0,103m_e$ (m_e é a massa do elétron livre). As Figuras abaixo ilustram o comportamento da densidade de corrente em função da voltagem de *gate* aplicada ao longo da direção de crescimento para um dado campo magnético. Aplicando

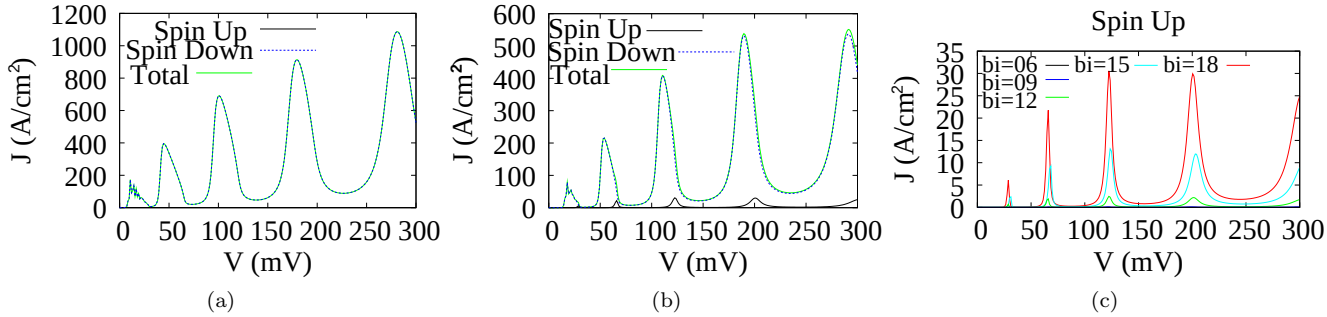


Figura 1: O comportamento da densidade de corrente para um campo magnético de 1 tesla. Na figura (a) temos o comportamento da densidade de corrente para um sistema que tem diluição correspondente a seis barreiras contendo íons de Mn. Na figura (b) a diluição é de 18 barreiras. Na figura (c) temos a densidade de corrente para os elétrons com spin up, para diversas diluições.

um campo magnético de 1 tesla num sistema em que há diluição correspondente a seis barreiras na região do poço (ver Fig. 1(a)), a densidade de corrente devido aos portadores de spin down é muito maior do que a de spin up, ou seja, a contribuição dos elétrons com spin up para a densidade de corrente é desprezível para corrente total. Logo temos uma densidade de corrente polarizada, que denominamos corrente spin-polarizada. Quando aumentamos a diluição de Mn aumentamos a contribuição dos portadores com spin up para densidade de corrente total, entretanto, nos sistemas investigados ela continua sendo muito pequena comparada com a contribuição dos portadores com spin down. A Fig. 1(b) ilustra o comportamento da densidade de corrente para um sistema em que há diluição correspondente a 18 barreiras, pode-se notar que a densidade corrente total é composta por ambos os portadores, e este é o caso investigado cuja contribuição dos portadores com spin up foi máxima para corrente total. Observa-se também que para uma voltagem de *gate* aplicada de aproximadamente 30 V temos uma corrente spin-polarizada, nesse caso uma corrente devido aos portadores com spin down.

A Fig. 1(c) ilustra o comportamento da densidade de corrente devido aos portadores com spin up para um campo magnético aplicado de 1 tesla para diferentes diluições, observa-se que quanto maior a diluição de Mn maior será a densidade de corrente.

Para campos magnéticos acima de 1 tesla, a densidade de corrente total é praticamente devida aos elétrons com spin down, isso só ocorre porque os portadores com spin up sentem um potencial efetivo muito maior que os elétrons com spin down sentem, mesmo com o aumento da diluição dos íons de Mn a densidade de corrente para os elétrons com spin up é negligenciável comparada a dos elétrons com spin down. Esse comportamento é ilustrado na Fig. 2. Pode-se observar que a densidade de corrente total para zero de voltagem de *gate* é de aproximadamente 500 A/cm^2 e ela é constituída somente por portadores com spin down, ou seja, temos uma corrente spin-polarizada para zero de voltagem de *gate*. Entretanto, quando aumentamos a diluição a densidade corrente total ainda é constituída somente por portadores com spin down, mas ela depende da voltagem de *gate* aplicada, pois só há corrente quando há voltagens acima de 10 volts aplicada.

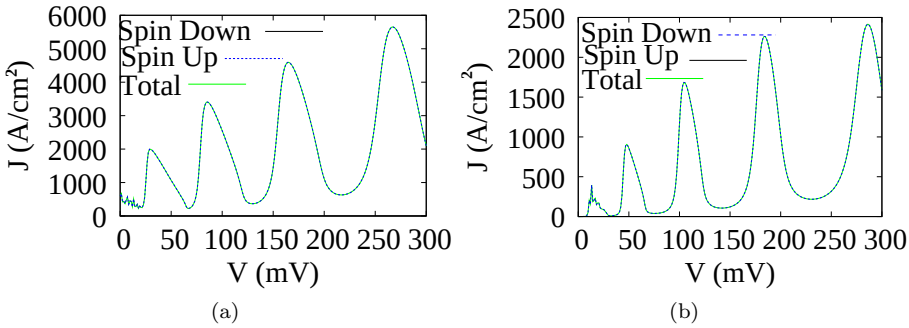


Figura 2: O comportamento da densidade de corrente para um campo magnético de 3 tesla. Na figura (a) temos o comportamento da densidade de corrente para um sistema que tem diluição correspondente a seis barreiras contendo íons de Mn. Na figura (b) a diluição é de 18 barreiras.

IV. CONCLUSÃO

Em todas as heteroestruturas investigadas, para campos magnéticos aplicados acima de 1 tesla, em todos os sistemas investigados, a contribuição para a corrente dos portadores com spin up é desprezível comparada a contribuição dos portadores com spin down, portanto, estas heteroestruturas comportam-se como um filtro de spin, pois a corrente total do sistemas será constituída essencialmente pelos portadores spin down.

Com o aumento da diluição há um decréscimo nas intensidade dos picos da corrente, isso ocorre devido a dificuldade do elétron tunelar do emissor para o coletor, pois agora há mais barreiras magnéticas na região do poço. O efeito devido ao campo magnético é basicamente de separar as contribuições de spin up e spin down, enquanto que o potencial aplicado facilita na transmissão.

Quando aumentamos o campo magnético há um aumento na intensidade de corrente total, isso porque os portadores com spin down sentem um potencial efetivo menor, logo o tunelamento do emissor para o coletor é facilitado, no caso destes portadores.

V. AGRADECIMENTOS

Ao CNPq pela concessão da bolsa de iniciação cientifica, a UFG por todo o suporte ao projeto.

[1] J. C. Egues, Phys. Rev. Lett. **80**, 4578 (1998).
[2] R. Fiederling, M. Keim, G. Reuscher, W. Ossau, G. Schmidt, A. Waag, and L. W. Molenkamp, Nature **402**, 787 (1999).
[3] S. A. Crooker, D. A. Tulchinsky, J. Levy, D. D. Awschalom, R. Garcia, and N. Samarth, Phys. Rev. Lett. **75**, 505 (1995).
[4] M. K. Kneip, D. R. Yakovlev, M. Bayer, G. Karczewski, T. Wojtowicz, and J. Kossut, Appl. Phys. Lett. **88**, 152105 (2006).

Estudo dos Modelos BTW e de Oslo

Carvalho,V.S.* and Caparica,A.A.†
Instituto de Física, Universidade Federal de Goiás, C.P.131, 74.001-970, Goiânia (GO), Brasil

I. INTRODUÇÃO

As idéias de criticalidade auto-organizada podem ser ilustradas conceitualmente através da metáfora da pilha de areia. Se jogarmos, sobre o tampo de uma mesa, grãos de areia, um a um, em posições aleatórias, inicialmente os grãos vão se dispor sobre a mesa sem exibir nenhuma configuração em especial. Mais adiante, porém, avalanches serão induzidas pela adição de um grão num local em que a inclinação local da pilha de grãos exceder uma inclinação limite determinada pela "viscosidade" dos grãos. No começo, as avalanches tendem a ser muito pequenas e localizadas. Esta é a resposta que se espera de um sistema em equilíbrio fora da criticalidade: a resposta é simplesmente proporcional à perturbação externa. Todavia, se continuarmos a depositar grãos lentamente sobre a mesa, o tamanho da pilha cresce, uma vez que ela pode manter uma inclinação finita graças à fricção entre os grãos. Ela não vai, porém, crescer indefinidamente, pois as avalanches fazem com que as inclinações locais caiam abaixo da inclinação limite, rearranjando as configurações internas da pilha e ao mesmo tempo transportando grãos para fora da mesa. Assim, mesmo após a ocorrência de uma avalanche, a pilha continua em um estado altamente susceptível. A pilha construída lentamente atinge no final um estado estável de não equilíbrio, em que na média o número de grãos e a energia que entra na pilha se equipara ao número de grãos que sai e à energia que se dissipa. O conceito de criticalidade auto-organizada, também chamada de complexidade, foi introduzido em 1987 por Back, Tang e Wiesenfeld[1] como um mecanismo genérico para invariância de escala numa classe particular de sistemas de não equilíbrio. O sistema sísmico é provavelmente o melhor candidato a sistema crítico auto-organizado da natureza. Para tornar o conceito de criticalidade mais tangível Back, Tang e Wiesenfeld estudaram o chamado autômato celular[2], que é discreto no espaço, tempo e variáveis dinâmicas. A configuração do autômato celular num determinado instante é completamente especificada pelos valores da variáveis dinâmicas em cada sítio. Por exemplo, as variáveis dinâmicas poderiam representar as inclinações locais da pilha de areia. A adoção de um conjunto de regras dinâmicas locais, na forma de um algoritmo, define o modelo e a sua evolução. Esse algoritmo é aplicado *ad infinitum*. Modelos simples assim sãos capazes de exibir complexidade.

II. METODOLOGIA

A. Materiais Utilizados e instalações

Para o desenvolvimento do projeto foram utilizados computadores do laboratório de informática do Instituto de Física da Universidade Federal de Goiás, a linguagem de programação Fortran no ambiente do Linux, o livro "Complexity and Criticality"[3], contando com a colobora-çao do autor Dr. Kim Christensen do Imperial College de Londres.

B. Descrição das técnicas

Uma das técnicas utilizadas para a obtenção de resultados foi o algoritmo BTW para o caso unidimensional. Esse algoritmo assemelha-se, ao menos, intuitivamente, à dinâmica da pilha de areia construída lentamente: um grão despenca do seu sítio para o seu primeiro vizinho quando a variável dinâmica, representando a inclinação local, excede a inclinação limite. Seja, por exemplo, um sistema unidimensional de L sítios, $i = 1, 2, ...L$. O sistema é fechado à esquerda, ao lado do sítio $i = 1$, impedindo que os grãos escapem. O sistema é, porém, aberto do lado direito, no sítio $i = L$, por onde os grãos podem sair. O número de grãos no sítio i é considerado como a sua altura, h_i, enquanto que a inclinação no sítio i é definida como $z_i = h_i - h_{i+1}$, com a convenção de que $h_{L+1} = 0$. A inclinação limite é a mesma para todos os sítios e é definida como z^{th}. A evolução do sistema se dá pela adição de um grão em um sítio aleatório, $h_i \rightarrow h_i+1$. Se a inclinação do sítio i é maior que a inclinação limite, $z_i > z^{th}$, um grão cai do sítio i para o sítio $i+1$, ou seja, $h_i \rightarrow h_i - 1$ e $h_{i+1} \rightarrow h_{i+1} + 1$. Em conseqüência, uma queda inicial pode levar outros sítios a ultrapassarem a inclinação limite, levando a novas quedas, causando uma avalanche que vai se propagar até que uma configuração estável seja atingida, com todos $z_i \leq z^{th}$ para todos os sítios.

No modelo BTW, o valor da inclinação limite z^{th} é irrelevante para o comportamento do sistema em questão. Sendo assim, pode-se tomar , por exemplo, $z^{th} = 1$ por simplicidade.

Os grãos são adicionados quando o sistema está em uma configuração estável, ou seja, quando os sítios não possuem inclinação acima da inclinação limite z^{th}. O tempo de resposta do sistema(o tempo de duração de uma avalanche) é ínfimo comparado com o tempo entre as adições dos grãos. A sequência do algoritmo pode ser resumida na seguinte forma: 1. Início. Prepare o sistema

em uma configuração estável arbitrária com $z_i \leq z^{th}$ para todos sítios i. 2.Pertubação. Adicione um grão em um sítio aleatório i. Para $i = 1$:

$$z_1 \rightarrow z_1 + 1 \tag{1}$$

Para $i = 1, ..., L$:

$$z_i \rightarrow z_i + 1 \tag{2}$$

$$z_{i-1} \rightarrow z_{i-1} - 1 \tag{3}$$

3.Relaxação. Se $z_i > z^{th}$, relaxe o sítio i. Para $i = 1$:

$$z_1 \rightarrow z_1 - 2 \tag{4}$$

$$z_2 \rightarrow z_2 + 1 \tag{5}$$

Para $i = 2, ..., L - 1$:

$$z_i \rightarrow z_i - 2 \tag{6}$$

$$z_{i-1} \rightarrow z_{i-1} + 1 \tag{7}$$

$$z_{i+1} \rightarrow z_{i+1} + 1 \tag{8}$$

Para $i = L$:

$$z_L \rightarrow z_L - 1 \tag{9}$$

$$z_{L-1} \rightarrow z_{L-1} + 1 \tag{10}$$

Continue relaxando os sítios até que $z_i \leq z^{th}$ para todo i. 4.Interação. Retorne para 2.

O segundo algoritmo considerado foi o do modelo de Oslo. Este modelo é inspirado no experimento quase unidimensional da pilha de arroz que, apresenta variações visíveis de inclinação Ao contrário do algoritmo para o modelo BTW, a inclinação limite não assume um mesmo valor para todos os sítios, e sim dois, $z_i^{th} \in 1, 2$. Além disso, a cada vez que acontece uma relaxação uma nova inclinação limite é escolhida aleatoriamente para o sítio que foi relaxado. Tal mudança se deve a forma com que os dois modelos avaliam o problema da ocorrência de avalanche em um determinado sistema: o algoritmo de Oslo consegue simular a dissipação de energia.

III. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Quando o atrito entre os grãos é pequeno, uma avalanche pode ser gerada. Caso ela ocorra, a energia potencial que foi fornecida à pilha pela adição de um grão é convertida em energia cinética pela avalanche, com uma eventual dissipação de energia, em razão da fricção entre os grãos.

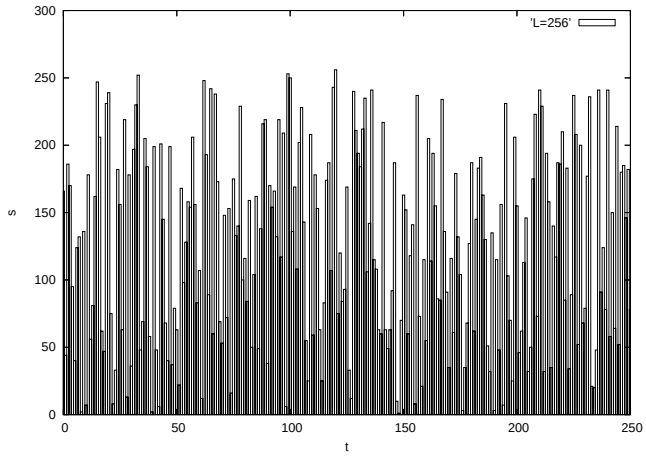


Figura 1: Resutado numérico para tamanho de avalanche , s, versus o tempo, t, medido em número de adições para o modelo BTW unidimensional para uma configuração recorrente em um sistema de tamanho $L = 256$. O tamanho máximo de avalanche observado é $s_{max} = L$.

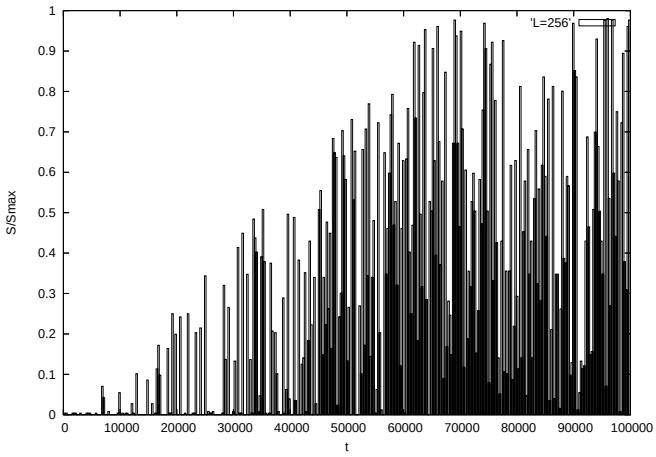


Figura 2: Resultado numérico para tamanho de avalanche reescalado, s/s_{max} , versus o tempo, t, para um sitema de tamanho L=256 que passa de um estado transiente para um recorrente. Este resultado foi obtido usando o modelo BTW uni-dimensional.

O atrito entre os grãos é capturado no modelo BTW uni-dimensional pelo uso de uma inclinação limite z^{th} diferente de zero, o que permite que a pilha aumente em altura. Com zero de inclinação limite, este aumento tornar-se-ia impossível, uma vez que os grãos sairiam para fora do sistema como um fluido. Além disso, uma inclinação limite diferente de zero assegura a existência de configurações estáveis e avalanches de todos os tamanhos.

Quando o sistema está em uma configuração recorrente(ver Fig.(1)) a adição de um grão no sítio i produ-

zirá uma avalanche de tamanho:

$$s = L + 1 - i \tag{11}$$

Portanto, a maior avalanche, de tamanho $s = L$, ocorrerá quando o grão for adicionado ao sítio $i = 1$; e a menor, de tamanho $s = 1$, quando o grão for adicionado ao último sítio, $i = L$. O tamanho máximo de avalanche, $s_{max} = L$, varia linearmente com o tamanho do sistema.

Partindo de uma configuração onde todos os sítios tem

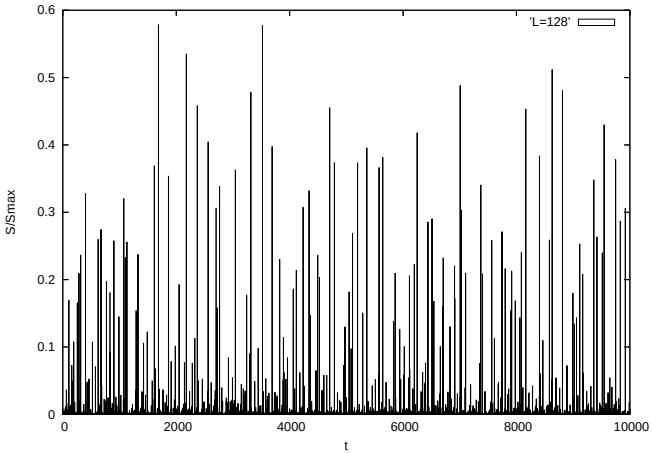


Figura 3: Resultado numérico para o tamanho de avalanche reescalado, s/s_{max}, versus o tempo, t, medido em número de adições para o modelo de Oslo em um sistema de tamanho $L = 128$.

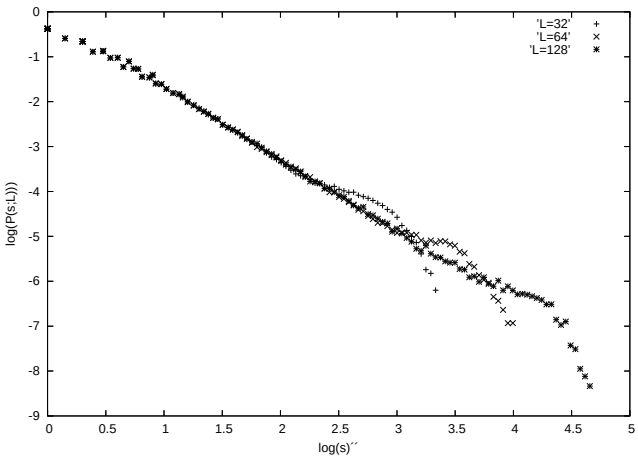


Figura 4: Resultado numérico para a probabilidade de tamanho de avalanche, $P(s; L)$, versus o tamanho de avalanche, s, para o modelo de Oslo em sistemas de tamanho $L = 32,\ 64,\ 128$.

a mesma altura, ou seja, $z_i = 0$, as simulações mostram que as avalanches são inicialmente pequenas e crescem a medida que o tempo passa, como se pode ver na Fig.(2). Porém, a partir de um certo instante, quando um tamanho de avalanche atinge o máximo de crescimento, que é o tamanho L do sistema, a probabilidade de que ocorra uma avalanche passa a ser igual para todos os tamanhos de avalanche. Temos nesse caso uma trasição de fase, onde o sistema passa de um estado onde existiam apenas configurações transientes para um onde se tem somente configuraçõs recorrentes.

Para o modelo de Oslo, quando o sistema está no estado das configurações recorrentes, ao contrário do modelo BTW, a probabilidade de que ocorram avalanches menores é maior que a probabilidade de que ocorram avalanches maiores. A FIG. 3, inlustra bem este fato. Nela pode-se ver que existem poucos picos de tamanho de avalanche reescalado, s/s_{max}, indicando que avalanches menores são mais prováveis de acontecer.

As simulações computacionais(ver FIG. 4), para sistemas que se encontram no estado das configurações recorrentes, mostraram que a curva de probabilidade de tamanho de avalanche apresenta um mesmo aspecto, qualquer que seja o tamanho do sistema. Isso leva a crer que o modelo de Oslo, possui uma função de escala que representa o colapso de pontos para a curva de probabilidade de tamanho de avalanche.

IV. CONCLUSÃO

No estudo dos modelos BTW e de Oslo em uma dimensão, conseguiu-se reproduzir para vários tamanhos de sistemas resultados obtidos por pesquisadores da área. Obteve-se alguns resutados relevantes para o modelo BTW, como, por exemplo, o tempo que um sistema demora para atingir a primeira configuração recorrente. Para o modelo de Oslo, a maioria dos resultados não foi colocada, pois ainda precisa ser analisada com mais cuidado, ficando assim para o próximo relatório. Contudo, já é possível concluir que o modelo de Oslo unidimensional é mais sofisticado que o modelo BTW, por trazer outros outros fatores físicos para a evolução do sistema, como a dissipação de energia.

* Electronic address: `vanuildo@gmail.com`
† Electronic address: `caparica@if.ufg.br`

[1] Back, P., Tang, C., and Wiesenfeld, K. "Self-Organized Criticality: An Explanation of 1/f Noise", Phys. Rev. Lett. **59**, 832 (1987).
[2] Back, P., Tang, C., and Wiesenfeld, K. "Self-Organized Criticality", Phys. Rev. A. **38**, 832 (1988).
[3] .Christensen, K. and Moloney, N. R., "Complexity and Criticality", Imperial College Press, (2005).

COMPLICAÇÕES APÓS A COLOCAÇÃO E USO DE *PIERCING* NA REGIÃO BUCAL

SOUZA, Vinícius Rezende[1]; ARANTES, Vinícius de Oliveira Rossi[2]; SILVA, Larissa de Neves e Sousa B.[3]; SOUZA, João Batista[4]; LOPES, Lawrence Gonzaga[5].

Palavras-Chave: *piercing* corporal; *piercing bucal*; conseqüências/*piercing*.

1. INTRODUÇÃO

O uso do *piercing* está ganhando bastante popularidade entre jovens de diversos países e de diferentes camadas sócio-econômicas e pode ser justificada como moda, rebeldia, identidade de um grupo, diferenciação, razões sexuais, lembranças de eventos, influências étnicas ou tribais e marginalização. O seu uso pode estar relacionado a casos de dor, edema, infecção, transmissão de doenças, obstrução das vias aéreas, hemorragia, trincas ou fratura de dentes, trauma gengival, hipersalivação, cicatriz hipertrófica, dano nervoso, aspiração do *piercing*, formação de cálculo na superfície do metal, hipersensibilidade ao metal e angina de Ludwig. Poucos estudos foram realizados com o intuito de verificar as conseqüências desta prática. Este estudo adquire uma relevância na medida em que trata de um modismo que pode causar danos à homeostasia dos tecidos bucais, interferindo na saúde e qualidade de vida dos usuários. Desta forma teve-se o propósito de avaliar as possíveis complicações relacionadas ao uso deste adorno.

2. METODOLOGIA

O subprojeto teve como amostra 28 pacientes, sendo 13 pacientes examinados na Faculdade de Odontologia da Universidade Federal de Goiás e 15 estudantes de uma escola estadual de Goiânia-GO. O critério de inclusão foi pacientes portadores de *piercing* bucal e sua negativa, nosso critério de exclusão. Para o conhecimento da história pregressa do uso do *piercing* bucal do paciente, foi elaborado e validado semanticamente, um questionário, que foi aplicado juntamente ao exame clínico da cavidade bucal. O exame clínico foi realizado por operadores calibrados procurando observar as possíveis conseqüências do uso do *piercing* bucal. Nos pacientes da FO-UFG o exame clínico foi realizado nos ambulatórios da Faculdade. Nos pacientes do colégio estadual o exame clínico foi realizado em uma sala de aula reservada, sentados em cadeira convencional e com luz artificial (pequena lanterna). Foram respeitadas todas as normas de biossegurança. Seguido o exame clínico, todos os casos foram fotografados com máquina digital NIKON D100 e lente MEDICAL-NIKKOR 120 mm com aumento de 1,2X, respeitando sempre a integridade do paciente. Desta forma, foram analisados os tipos de localizações do *piercing* bucal, dando um parâmetro para qualificar e quantificar as possíveis complicações advindas do uso deste adorno. Os dados foram tabulados conforme sua ocorrência e especificando o percentual de sua análise descritiva.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

O cirurgião-dentista deve orientar o paciente quanto a remoção e limpeza da jóia, a higienização bucal e as alterações devido aos maus hábitos do uso do *piercing*. O profissional deve estar atento para saber lidar com a individualidade daqueles que optam pela prática e se resguardar aos deveres de orientar e monitorar os pacientes. Os pesquisados apresentaram *piercings* em diferentes sítios anatômicos, tais como língua, lábio e nos freios lingual e labial. Não foi encontrado nenhum

PDF Creator - PDF4Free v2.0 http://www.pdf4free.com

piercing na úvula e no freio labial inferior. Do total dos pesquisados a maioria (64,7%) utilizava *piercing* na língua. Este resultado está de acordo com Peticolas; Tilliss; Cross-Poline (2000) que verificaram que na cavidade bucal a língua é o local mais freqüentemente escolhido. De modo geral, a maioria dos pesquisados utilizavam *piercing* feito de aço cirúrgico (91,2%), o que foi salientado por Horle; Kuba (2002) que afirmaram em seus estudos que as jóias em aço cirúrgico são mais freqüentemente usadas devido ao seu menor custo quando comparados com as demais. Mesmo o aço cirúrgico possuindo biocompatibilidade comprovada (BORDJI et al., 1996), constatou-se que as jóias feitas com este material, por serem pesadas e rígidas, são as principais responsáveis pelas depressões na língua, uma conseqüência encontrada em onze pacientes. Também foi observado depressão na mucosa labial em quatro pacientes que utilizavam *piercing* na região central do lábio inferior. Não foi encontrado nada semelhante na revisão de literatura. Casos de dor pós-operatória, edema, obstrução das vias aéreas secundárias ao edema, hemorragia, trincas ou fratura de dentes, trauma gengival ou salivação, formação de cicatriz hipertrófica, dano nervoso ou parestesia provisória, incorporação de corpos estranhos e formação de cálculo na superfície do metal são as possíveis complicações relatadas na literatura (DE MOOR; WITTE; BRUYNE, 2000; PETICOLAS; TILLISS; CROSS-POLINE, 2000). Portanto, como conseqüência do uso do piercing foi relatada pelos usuários dificuldade na fala (32,1%), na mastigação (17,8%), na deglutição (25%) e na respiração (3,6%), logo após a colocação da jóia; 39,3% disseram já ter engolido o *piercing* ou parte dele. Outras conseqüências relatadas foram: morder o *piercing* durante a mastigação ou fala (78,6%), sensação de choque (21,4%), sensibilidade (32,1%), sangramento gengival (21,4%) e fratura dentária (3,6%). Após a colocação do *piercing* foi relatado ter ocorrido também inchaço, sangramento e dor sendo 92,8%; 10,7% e 3,6% respectivamente. Dos pacientes pesquisados 57,1% informaram o habito de "brincar" com o *piercing*. O paciente A.F.M.S. relatou que, desde quando colocou o *piercing*, há seis meses, durante a fala, mastigação e a deglutição a jóia sempre tocava o palato e ao exame clínico observou-se uma depressão no palato duro. Foi esclarecido ao paciente que o quelóide foi causado pelo contato constante da esfera metálica; corroborando com este achado há também os relatos de DE MOOR; WITTE; BRUYNE (2000). No caso da paciente C.M.S., 19 anos, devido a relação de oclusão da paciente e aquisição de hábitos bucais deletérios pela presença do *piercing*, encontrou-se desgastes interincisivos (ameia incisal). Igualmente foi relatado um caso de desgaste dentário por Brennan; O'Connell; O'Sullivan (2006). Encontrou-se quatro outros pacientes com desgaste dental, que por serem pequenos, não houve necessidade de restaurar. Um caso em particular foi do paciente E.D.B., 19 anos, com um *piercing* na região antero-mediana da língua, há um ano e um mês, que ao morder inadvertidamente a esfera do *piercing* gerou uma fratura da cúspide distal do elemento 36. Brennan; O'Connell; O'Sullivan (2006) relataram casos semelhantes de fratura dental. Na amostra foi encontrado sete casos de recessão gengival, na região antero-inferior, por vestibular nos casos dos pacientes usuários de *piercing* labial inferior e por lingual em alguns casos de *piercing* de língua. Na literatura foi relatada casos de recessão gengival (BROOKS HOOPER; REYNOLDS, 2003; CHAMBRONE; CHAMBRONE, 2003). Outra conseqüência encontrada foi a de um paciente com *piercing* intruído no lábio inferior, que não causava nenhum incômodo. O paciente foi orientado a higienizar a região, pois a impossibilidade de remoção para a limpeza facilitaria uma infecção. Um caso semelhante foi relatado por Mandal; Mckinnell; Berry, (2002). Dois pacientes

PDF Creator - PDF4Free v2.0 http://www.pdf4free.com

retiraram o *piercing* de língua após ter a língua levemente dilacerada. Um teve o freio lingual dilacerado e outro o lábio inferior. Os quatro pacientes relataram que removeram as peças logo após o incidente. Apenas um colocou novamente a jóia em um outro local depois que a ferida cicatrizou.

4. CONCLUSÃO

As conseqüências encontradas estão associadas, em sua maioria, pelo contato *piercing*/mucosa e/ou *piercing*/dente. Não sendo observada nenhuma relação entre o tempo de uso do *piercing* e suas conseqüências. As conseqüências ficaram restritas à região circunvizinha ao *piercing,* apesar de muitos relatarem ter engolido o *piercing* ou parte dele. Há de se ressaltar que nenhuma ocorrência mais grave foi detectada. As ocorrências mais comumente encontradas foram depressões na língua, recessões gengivais, desgastes dentários e depressões na mucosa labial. Destaca-se ainda que após a colocação do *piercing*, no pós-operatório, os pacientes queixaram-se de dificuldades na fala, na mastigação e na deglutição.

5. REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

BORDJI, K; JOUZEAU, JY; MAINARD, D, et al. Evoluation of the effect of three surface treatments on the biocompatibility of 316L stain-less using human differentiated cells. Biomaterials 1996; 17:491(5).

BRENNAN, M; O'CONNELL, B; O'SULLIVAN, M. Multiple dental fractures following tongue barbell placement: a case report. Dent Traumatol. 2006 Feb;22(1):41-3.

BROOKS, JK; HOOPER, KA; REYNOLDS, MA. Formation of mucogingival defects associated with intraoral and perioral piercing: case reports. J Am Dent Assoc. 2003 July;134 (7):837-43.

CHAMBRONE, L; CHAMBRONE, LA. Gingival recessions caused by lip piercing: case report. J Can Dent Assoc. 2003: vol 69 n 8 505-8.

DE MOOR, RJ; DE WITTE, AM; DE BRUYNE, MA. Tongue piercing and associated oral and dental complications. Endod Dent Traumatol. 2000 Oct; 16(5):232-7.

HORLE, S; KUBA, GB. Complications following eyebrow piercing. Ophthalmologe. 2002 Mar; 99(3): 200-2.

MANDAL, AMS; MCKINNELL, TBS; BERRY, RB. Retained tongue stud: an unusual complication of tongue piercing. Brit J Plast Surg. 2002 Sept, 55(6):535-6

PETICOLAS, T; TILLISS, TS; CROSS-POLINE, GN. Oral and perioral piercing: a unique form of self-expression. J Contemp Dent Pract. 2000 Aug 15;1(3):30-46.

FONTE DE FINANCIAMENTO - CNPq

1. Bolsa de Iniciação Científica. Faculdade de Odontologia. UFG. vinicius_rezende50@hotmail.com
2. Aluno de graduação. FO/UFG.
3. Aluna de Iniciação Científica. FO/UFG.
4. Orientador. FO/UFG. jbs@odonto.ufg.br
5. Co-orientador. FO/UFG

PDF Creator - PDF4Free v2.0 http://www.pdf4free.com

Geração e propriedades da superposição de estados de fase deslocado $|\alpha, \beta, \theta_\kappa\rangle$

1 Introdução

Desde o trabalho de Glauber em 1963, após a descoberta do laser, um estudo extensivo do campo eletromagnético quantizado (CEQ) foi feito na literatura, principalmente após a detecção do efeito de anti-agrupamento de fótons ("*antibunching*") em 1977, constituindo a primeira prova distinta de um efeito quântico exibido pelo campo luminoso. Posteriormente, outros efeitos quânticos exibidos pelo CEQ foram descobertos, dentres eles: a estatística sub-Poissoniana , compressão das quadraturas("*squeezing*") , oscilações na distribuição estatística de fótons (P_n) e probabilidade nula de encontrar o estado de vácuo, etc. Dentre esses efeitos quânticos citados, existem também outros exibidos pelo CEQ mostrando que a quantização do campo é necessária, mesmo quando o campo é o mais clássico dentre os quânticos, como no caso do estado coerente.

2 Metodologia

A Metodologia consistirá no uso do formalismo do Campo Eletromagnético Quantizado (operadores de criação e aniquilação) aprisionado numa cavidade de microondas de alta qualidade, interagindo com átomos (de Rydberg) de dois níveis, previamente preparados em zonas de Ramsey, através do modelo de Jaynes-Cummings.

3 Resultados

Os resultados foram divididos em duas seções: cálculo da superposição dos estados de fase deslocado e análise de sua distribuição estatística de fótons e, partindo dessa análise, discutimos algumas características estatísticas como: parâmetro Q de Mandel e função de correlação de segunda ordem $g^{(2)}(0)$, determinantes para a percepção quântica do estado.

3.1 Propriedades da superposição do Estado de Fase Deslocado

Nesta parte do trabalho investigamos a propriedade da superposição dos estados de fase deslocado, a distribuição estatística de fótons (P_n), o que possibilitopu calcular outras propriedades, tais como: cálculo da função Q de Mandel e cálculo da função de correlação de segunda ordem $g^{(2)}(0)$.

3.1.1 Cálculo da P_n

$$P_n = \frac{1}{(N+1)(2+\Gamma(\alpha,\beta))}\left|\sum_{l=0}^{N} e^{il\theta_\kappa}[C_n^l(\alpha)+C_n^l(\beta)]\right|^2 \tag{1}$$

Ficou clara, pelos gráficos abaixo, a ausência de distribuição, ou seja, $P_n = 0$, além do fato de existirem oscilações nessa distribuição. Ambas características garantem a existência de efeitos não-clássicos no estado estudado.

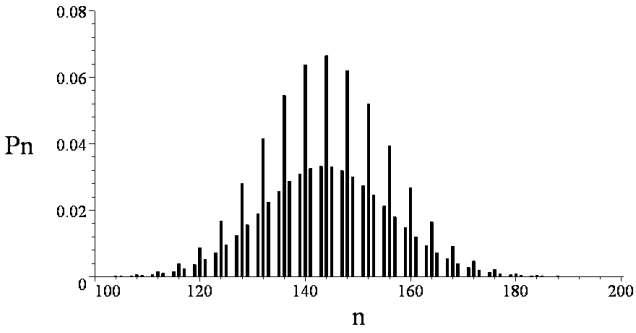


Figura 1: P_n para $\alpha = 12$, $\beta = 12e^{i\frac{\pi}{2}}$, $N = 0$, $\theta_0 = 0$

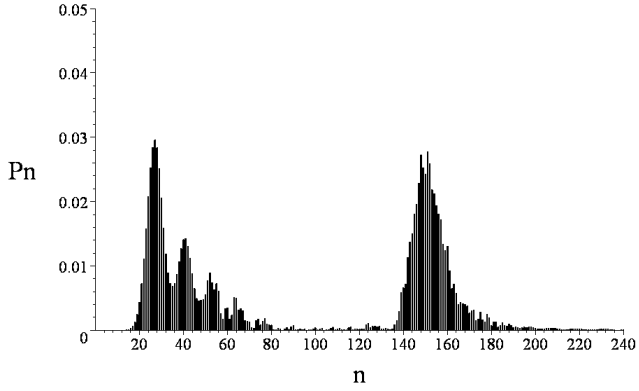


Figura 2: P_n para $\alpha = 9$, $\beta = 12$, $N = 20$, $\theta_0 = pi$

3.1.2 Cálculo do parâmetro Q de Mandel

A estatística de fótons de um certo estado pode ser qualificada pela função Q de Mandel, veja equação 2, definida em termos da variância do número de fótons $\Delta\hat{n}$ e do número médio de fótons $\langle\hat{n}\rangle$, de acordo com a equação 3. A função Q de Mandel caracteriza a ocorrência de estatística Super-Poissoniana(Q>0) e Poissonia(Q=0), ambas estatíticas clássicas, além da Sub-Poissoniana(Q<0), que é uma estatística quântica[1].

$$Q = \frac{\Delta\hat{n}^2 - \langle\hat{n}\rangle}{\langle\hat{n}\rangle} \tag{2}$$

$$\Delta\hat{n} = \sqrt{\langle\hat{n}^2\rangle - \langle\hat{n}\rangle^2} \qquad ; \qquad \langle\hat{n}\rangle = \sum_n^{\infty} nP_n \tag{3}$$

Portanto, foi feita a análise de Q em relação a N para $y = 0$ [2], quando α estivesse fixo e β variando entre 0 e 3. Percebe-se da figura 3, que para $\beta = 1$, quando $N < 4$, a função apresentou estatistica quântica, ou seja, é sub-Poissoniana. Para os demais valores, $Q > 0$, ou seja, Poissoniana.

3.1.3 Cálculo da função $g^{(2)}(0)$

A função de correlação de segunda ordem $g^{(2)}(0)$, dada pela equação 4 para o caso de uma luz estacionária em estado de um único modo excitado, caracteriza a ocorrência de agrupamento($g^{(2)}(0) > 1$) ou anti-agrupamento de fótons($g^{(2)}(0) < 1$), ou seja, ela expressa se há um reforço ou não na probabilidade de detectar um segundo fóton logo após a detecção do primeiro fóton. O anti-agrupamento de fótons(*photon anti-bunching*) é efeito não-clássico,

[1] Distribuição estatística para estados do campo eletromagnético quantizado

[2] $\alpha = re^{i\theta}$, $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, $\theta = \text{arctg}(y/x)$

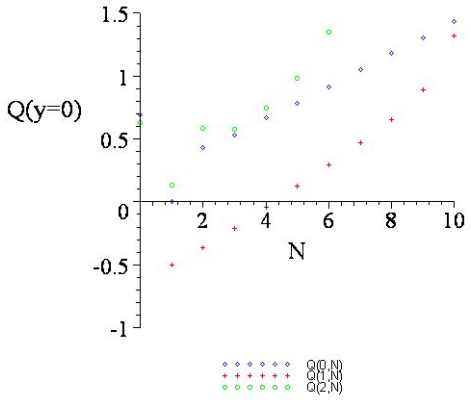


Figura 3:

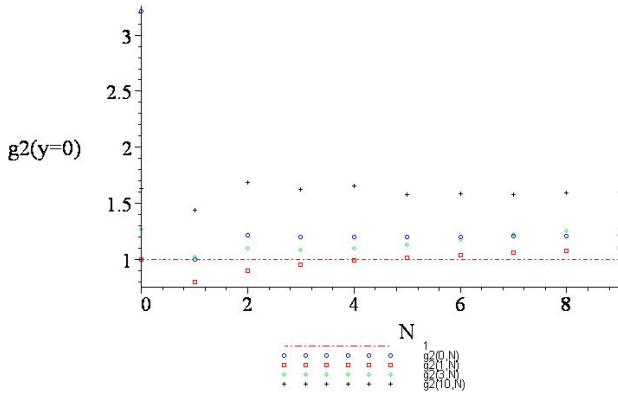


Figura 4:

ou seja, é um efeito puramente quântico, visto que uma certa função probabilidade $P(\alpha)$ deve assumir valores negativos.

$$g^{(2)}(0) = 1 + \frac{\Delta\hat{n}^2 - \langle\hat{n}\rangle}{\langle\hat{n}\rangle^2} \tag{4}$$

Nota-se, pela figura 4, que quando o parâmetro de deslocamento α é fixado e $\beta = 1$, assim como para $y = 0$, o intervalo $0 < N \leqslant 4$ mostra do anti-agrupamento de fóton, que é uma estatística quântica. Já para $N < 4$, assim como para $\beta \neq 1$, percebeu-se o agrupamento de fótons para esse mesmo α. Ou seja, não houve reforço na probabilidade de detectar o segundo fóton.

4 Conclusão

Nesse trabalho foram evidentes as características quânticas na superposição do Estado de Fase Deslocado. Essas foram: oscilação na distribuição do número de fótons, estatística sub-poissoniana e anti-agrupamento de fótons.

ESTABILIDADE DE EQUAÇÕES DIFERENÇAS LINEARES TRINOMIAIS COM DOIS RETARDAMENTOS

SOUZA, Wender José de[1]; CRUZ, José Hilário da[2].

Palavras-chave: Equações diferenças lineares, Estabilidade Assintótica, Retardamentos.

1. INTRODUÇÃO

Nosso principal objetivo é estudar a estabilidade da solução nula da eq. diferença linear $x(n) = ax(n-m) + bx(n-k)$ (1), com a,$b \in \mathbb{R}$ e dois retardamentos $k, m \in \mathbb{N}$, com $k > m$. O polinômio característico da eq. (1) é: $f(\lambda) = \lambda^k - a\lambda^{k-m} - b$ (2).

O problema geral do estudo da estabilidade do polinômio (2) foi considerado em [11] e [12]. Em [12], foram apresentamos os seguintes problemas:
(i) identificar as fronteiras do domínio de estabilidade da equação (1);
(ii) determinar as regiões de estabilidade, no plano a e b, para $k, m \in \mathbb{N}$ da (1);
(iii) estudar o que acontece com o domínio de estabilidade de (1) se $k \to \infty$, $m \to \infty$.

S. A. Levin e R. B. May mostraram em [10] que a desigualdade $a < b < -2\,\text{sen}\,\frac{\pi}{2(2k-1)}$ é a condição necessária e suficiente para estabilidade assintótica da equação (1) para $m = a = 1$. O problema da estabilidade de (1) para $m = 1$ foi resolvido em [7]. A equação (1), com $m = k-1$, foi estudada em [5] e a eq.(1) foi considerada sob algumas pendências sobre a e b em [8].

2. METODOLOGIA

Estudamos os tópicos propostos e as referências complementares e apresentamos em seminários semanais, sob a coordenação do orientador.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

3.1. **Introdução às equações diferenças**

Fizemos um estudo detalhado sobre equações diferenças, algumas propriedades, definição de grau de uma equação diferença, definição de equação diferença linear, o teorema da existência e unicidade da solução de uma problema de valor inicial, pontos equilíbrio de uma equação diferença e condições para a estabilidade dos pontos equilíbrio. Estudamos também as soluções de uma equação diferença linear, soluções linearmente dependentes e soluções linearmente independentes, polinômio característico e solução geral de uma equação diferença linear com coeficientes constantes.

3.4 **Equações diferença lineares com vários retardamentos e argumento contínuo**

Consideremos a equação $a_0x(t) + a_1x(t-1) + ... + a_\ell x(t-\ell)$ (3).

Observamos que fazendo $\ell = k$, $a_0 = -1$, $a_1 = \cdots = a_{m-1} = 0$, $a_m = a$, $a_{m+1} = \cdots = a_{k-1} = 0$, $a_k = b$, na equação (3), temos a equação diferença (1), com *argumento contínuo* e seu polinômio característico é dado por $f(\lambda) = \lambda^k - a\lambda^{k-m} - b$.

[1]Bolsista de iniciação científica. Instituto de Matemática e Estatística, wender.souza@hotmail.com
[2]Orientador. Instituto de Matemática e Estatística, jhilario@mat.ufg.br

Teorema 1. *Sejam k e m primos entre si com $k > m$. Então, existe um par de nº naturais (j, s) tais que $|mj - ks| = 1$, $j < k$, s é ímpar. Se m é ímpar, então (j, s) é único e se m é par, então existe dois pares de (j, s), onde em um, o j é par e no outro, o j é ímpar.*

Teorema 2. *Seja k e m primos entre si com $k > m$. A solução nula da equação (1) é assintoticamente estável, se e somente se, o par (a, b) esta no interior da região limitada pelas curvas: (i) $a + b = 1$; (ii) $a = \dfrac{\operatorname{sen}(k\omega)}{\operatorname{sen}(k-m)\omega}$, $b = -\dfrac{\operatorname{sen}(m\omega)}{\operatorname{sen}(k-m)\omega}$; (iii) $(-1)^m a + (-1)^k b = 1$; (iv) $a = (-1)^m \dfrac{\operatorname{sen}(k\omega)}{\operatorname{sen}(k-m)\omega}$, $b = -(-1)^k \dfrac{\operatorname{sen}(k\omega)}{\operatorname{sen}(k-m)\omega}$; onde ω varia entre $j\pi/k$ e $s\pi/m$. Os números j e s satisfazem a hipótese do teorema 1.*

As figuras abaixo ilustram alguns exemplos.

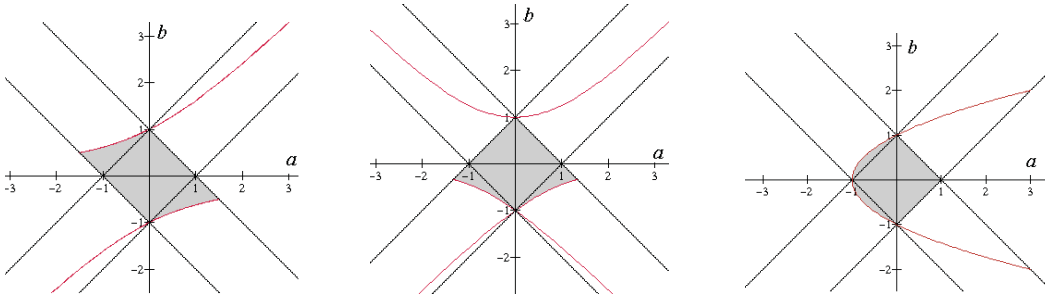


Figura 1: (i) $m = 1$ e $k = 3$ (ii) $m = 1$ e $k = 4$ (iii) $m = 2$ e $k = 3$

Definição 1. *Denotemos por $D(k, m)$ o conjunto dos pares (a, b) tais que a eq. (1) com os dados coeficientes a e b e retardamentos k e m é assintoticamente estável.*

Definição 2. *Dizemos que:*
- $(k-1, m-1) \succ (k-2, m-2)$ *no quadrante* $Q_{rt} = \{(a, b) : (-1)^r a \geq 0, (-1)^t b \geq 0\}$ $(r, t = 0, 1)$ *se* $D(k_1, m_1) \cap Q_{rt} \supset D(k_2, m_2) \cap Q_{rt}$.
- $(k_1, m_1) \approx (k_2, m_2)$ *no* Q_{rt} *se* $D(k_1, m_1) \cap Q_{rt} = D(k_2, m_2) \cap Q_{rt}$.
- *os pares* (k_1, m_1) *e* (k_2, m_2) *são incomparáveis em* Q_{rt} *se* $(k_1, m_1) \succ (k_2, m_2)$ *ou* $(k_2, m_2) \succ (k_1, m_1)$ *ou* $(k_1, m_1) \approx (k_2, m_2)$ *(4) não é verdade em* Q_{rt}.

O teorema seguinte permite determinar, para qualquer par de retardamento, a ocorrência dos termos de (4) ou expressar que os pares são incompatíveis.

Teorema 3. *Sejam (k_1, m_1), (k_2, m_2), $k_3, m_3)$, (k_4, m_4) quatro pares de números naturais primos entre si e seja $k_r > m_r$ $(1 \leq r \leq 4)$. (1) Então $(k_1, m_1) \approx (k_2, m_2)$ em Q_{00}; (2) Sejam k_1, k_2 ímpares e k_3, k_4 pares.*
(2.1) Se $k_1 < k_2$, $m_1 \leq m_2$ ou $k_1 \leq k_2$, $m_1 < m_2$, então $(k_1, m_1) \succ (k_2, m_2) \succ (k_3, m_3) \approx (k_2, m_2)$ em Q_{10};

(2.2) Se $k_1 > k_2$, $m_1 < m_2$, *então* (k_1, m_1) *e* (k_2, m_2) *são incomparavéis em* Q_{10};
(3) Sejam $(k_1 + m_1)$ *e* $(k_2 + m_2)$ *números ímpares e* $k_3 + m_3)$ *e* $(k_4 + m_4)$ *pares.*
(3.1) Se $k_1 < k_2$, $m_1 \leq m_2$ *ou* $k_1 \leq k_2$, $m_1 < m_2$, *então* $(k_1, m_1) \succ (k_2, m_2) \succ (k_3, m_3) \approx (k_2, m_2)$ *em* Q_{11};
(3.2) Se $k_1 > k_2$, $m_1 < m_2$, *então* (k_1, m_1) *e* (k_2, m_2) *são incomparavéis em* Q_{11};
(4) Sejam m_1,m_2 *números ímpares e sejam* m_3,m_4 *pares.*
(4.1) Se $k_1 < k_2$, $m_1 \leq m_2$ *ou* $k_1 \leq k_2$, $m_1 < m_2$, *então* $(k_1, m_1) \succ (k_2, m_2) \succ (k_3, m_3) \approx (k_2, m_2)$ *em* Q_{01};
(4.2) Se $k_1 > k_2$, $m_1 < m_2$, *então* (k_1, m_1) *e* (k_2, m_2) *são incomparavéis em* Q_{01}.

4. CONCLUSÃO

Apresentamos as fronteiras da região de estabilidade da equação diferença linear $x(n) = ax(n-m) + bx(n-k)$, com os retardamentos k e m, mostramos que quanto menor os retardamentos maior é a região de estabilidade da equação. Observamos também que os resultados obtidos podem ser estendidos à equação com argumento continuo, motivando-nos a sequir nossos estudos na linha de [2], [3] e [4].

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Borges, M, Estabilidade Assintótica e Periodicidade de uma Classe de Equações Diferenças. Dissertação de Mestrado em Matemática,IME/UFG,2000.
2. Cruz,J. H. e Santos,R. A. Uma nota sobre a estabilidade e instabilidade da equação $x(t) - ax(t-1) + bx(t-l) = 0$, 58º Seminário Brasileiro de Análise, Novembro de 2003.
3. Cruz2Cruz,J. H. e Santos,R. A. As regiões de estabilidade, no plano dos parâmetros a e b, da equação $x(t) - ax(t-1) + bx(t-l) = 0$, 60º Seminário Brasileiro de Análise, Novembro de 2004, 275-284.
4. Cruz,J. H. e Táboas, P. Z., Periodicity and Stability for Singularly Perturbed Linear Delay Differential Equation, Nonlinear Analysis, Volume 67, Issue 6, 15 September 2007, Pages 1657-1667.
5. Dannan, F. M. and Elaydi, S. N., Asymptotic Stability of Linear Difference Equations of Advanced Type, Tec. Rep. no.60, 2001, pp.1-15 (htpp://www.trinity.edu).
6. Elaydi, S. M., An Introdution to Difference Equations. Springer, 1989.
7. kuruklis, S. A., The Asymptotic Stability of $x(n+1) - ax(n) + bx(n-k) = 0$, J.Math. Anal. Appl.,1994, vol.188, pp.719-731.
8. Kipnis, M. M. and Nigmatullin, R. M., Stability of Some Difference Equations with Two Delays, 2003, no.5, pp.122-130.
9. Kipnis,M.M. and Nigmatullin, R.M., Stability of Trinomial Linear Difference Equations with Two Delays. Automation and Remote Control, vol.65, no. 11, 2004, pp. 1710-1723. translated from Avtomatika e Telemedhanida, no.11, pp.25-39,2004.
10. Levin,S.A. and May, R., A Note on Difference-delay Equations, Theor. Pop. Biol., 1976, vol.9, pp.178-187.
11. Nikolaev,Yu.P., On Symmetry and Other Properties of the Multdimensional Asymptotic Stability of the Linear Discrete Systems, 2001, no. 4, pp. 98-108.
12. Nikolaev,Yu.P., On Studying the Geometry of the Set of the Stable Polynomials of the Linear Discrete Systems, 2002, no. 7, pp.44-54.